计算方法

Liquan Mei

School of Mathematics and Statistics, Xi'an Jiaotong University

要求

1 迭代法思想及其收敛性

要求

1. 迭代法思想及其收敛性
2. 熟练掌握三种基本迭代法

要求

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

要求

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

要求

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

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

向量序列和矩阵序列的极限

Definition

设$\{x^{(k)}\}$是R^n中的向量序列，其中$x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)})^T$. 若$\{x^{(k)}\}$的每一个分量$x_i^{(k)}$收敛于$x_i^*$，则称向量序列$\{x^{(k)}\}$收敛于向量$x^* = (x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)^T$. 或者说$x^*$是向量序列$\{x^{(k)}\}$的极限，记作

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

向量序列和矩阵序列的极限

Definition

设$\{x^{(k)}\}$是R^n中的向量序列，其中$x^{(k)}=(x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)})^T$.
若$\{x^{(k)}\}$的每一个分量$x_i^{(k)}$收敛于x_i^*，则称向量序列$\{x^{(k)}\}$收敛于向量$x^*=(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)^T$. 或者说$x^*$是向量序列$\{x^{(k)}\}$的极限，记作

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

Definition

设$\{A^{(k)}\}$是$R^{n\times n}$中的矩阵序列，其中$A^{(k)}=(a_{ij}^{(k)})_{n\times n}$. 若$A^{(k)}$的每个元素$a_{ij}^{(k)}$收敛于$a_{ij}$，则称矩阵序列$\{A^{(k)}\}$收敛于$A=(a_{ij})$，或者说矩阵$A$是矩阵序列$\{A^{(k)}\}$的极限，记作

$$\lim_{k\to\infty} A^{(k)}=A.$$

向量序列和矩阵序列的极限

Theorem

(1) R^n中的向量序列$\{x^{(k)}\}$收敛于x^*的充分必要条件是

$$\lim_{k\to\infty} \|x^* - x^{(k)}\| = 0.$$

(2) $R^{n\times n}$ 中的矩阵序列$\{A^{(k)}\}$收敛于矩阵A的的充分必要条件是

$$\lim_{k\to\infty} \|A - A^{(k)}\| = 0.$$

向量序列和矩阵序列的极限

Theorem

(1) R^n中的向量序列$\{x^{(k)}\}$收敛于x^*的充分必要条件是

$$\lim_{k\to\infty}\|x^* - x^{(k)}\| = 0.$$

(2) $R^{n\times n}$ 中的矩阵序列$\{A^{(k)}\}$收敛于矩阵A的的充分必要条件是

$$\lim_{k\to\infty}\|A - A^{(k)}\| = 0.$$

由范数的等价性知向量序列和矩阵序列的收敛性与所取的范数无关.

Theorem

$\lim_{k\to\infty} A_k = 0$的充分必要条件是$\lim_{k\to\infty} A_k x = 0, \forall x \in R^n$.

向量序列和矩阵序列的极限

Theorem

设$B \in R^{n\times n}$，$\|\cdot\|$为任一种范数，则

$$\lim_{k\to\infty} \|B^k\|^{\frac{1}{k}} = \rho(B).$$

Theorem

设$B \in R^{n\times n}$，$\|\cdot\|$为任一种范数，则

$$\lim_{k\to\infty} \|B^k\|^{\frac{1}{k}} = \rho(B).$$

Theorem

设$B \in R^{n\times n}$，则

$$\lim_{k\to\infty} B^k = 0$$

的充分必要条件是

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

设有线性方程组$Ax=b \quad (|A|\neq 0, b\neq 0)$. 将其等价变形为$x=Bx+g$.

解线性方程组的基本迭代法

设有线性方程组$Ax = b \quad (|A| \neq 0, b \neq 0)$. 将其等价变形为$x = Bx + g$.构造迭代格式

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g, \qquad k = 0, 1, 2, \cdots$$

给定初始向量$x^{(0)}$, 由迭代格式产生迭代序列$\{x^{(k)}\}$. 设$\{x^{(k)}\}$收敛于x^*, 两端令$k \to \infty$取极限. 得

$$x^* = Bx^* + g.$$

由此可知x^*满足$Ax^* = b$, 即x^*是方程组$Ax = b$的解.

设有线性方程组$Ax = b \quad (|A| \neq 0, b \neq 0)$. 将其等价变形为$x = Bx + g$.构造迭代格式

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g, \qquad k = 0, 1, 2, \cdots$$

给定初始向量$x^{(0)}$, 由迭代格式产生迭代序列$\{x^{(k)}\}$. 设$\{x^{(k)}\}$收敛于x^*, 两端令$k \to \infty$取极限. 得

$$x^* = Bx^* + g.$$

由此可知x^*满足$Ax^* = b$, 即x^*是方程组$Ax = b$的解.

迭代法的优点是在迭代过程中矩阵B不变, 从而利用了原方程组系数矩阵A含有大量零元素的特点, 具有计算量小的优点.

设有线性方程组$Ax=b \quad (a_{ii}\neq 0, b\neq 0)$, 把方程组改写为等价的同解方程组

$$\begin{cases} x_1 &= (b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \cdots - a_{1n}x_n)/a_{11}, \\ x_2 &= (b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - \cdots - a_{2n}x_n)/a_{22}, \\ & \cdots \\ x_i &= (b_i - a_{i1}x_1 - \cdots - a_{i,i-1}x_{i-1} - a_{i,i+1}x_{i+1} - \cdots - a_{in}x_n)/a_{ii}, \\ & \cdots \\ x_n &= (b_n - a_{n1}x_1 - a_{n2}x_2 - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1})/a_{nn}. \end{cases}$$

雅可比迭代格式或雅可比迭代法

$$x_i^{(k+1)} = (b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j^{(k)})/a_{ii}, \quad i=1,2,\cdots,n.$$

雅可比(Jacobi)迭代法

写成矩阵形式

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

写成矩阵形式

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

其中

$$B = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1,n-1}}{a_{11}} & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} & \cdots & -\frac{a_{2,n-1}}{a_{22}} & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n3}}{a_{nn}} & \cdots & -\frac{a_{n,n-1}}{a_{nn}} & 0 \end{pmatrix},$$

$$g = (\frac{b_1}{a_{11}}, \frac{b_2}{a_{22}}, \cdots, \frac{b_n}{a_{nn}})^T.$$

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

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

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

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

解 雅可比迭代格式为

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

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

高斯-赛德尔迭代法或高斯-赛德尔迭代格式.

$$
\left\{
\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} &= \left(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}\right)/a_{11},\\
x_2^{(k+1)} &= \left(b_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}\right)/a_{22},\\
&\cdots\\
x_i^{(k+1)} &= \left(b_i - a_{i1}x_1^{(k+1)} - \cdots - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} - a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)}\right.\\
&\quad \left. - \cdots - a_{in}x_n^{(k)}\right)/a_{ii},\\
&\cdots\\
x_n^{(k+1)} &= \left(b_n - a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)}\right)/a_{nn}.
\end{aligned}
\right.
$$

高斯-赛德尔(Gauss-Seidel)迭代法

高斯-赛德尔迭代法或高斯-赛德尔迭代格式.

$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} & = & (b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)})/a_{11}, \\
x_2^{(k+1)} & = & (b_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)})/a_{22}, \\
 & \cdots & \\
x_i^{(k+1)} & = & (b_i - a_{i1}x_1^{(k+1)} - \cdots - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} - a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} \\
 & & - \cdots - a_{in}x_n^{(k)})/a_{ii}, \\
 & \cdots & \\
x_n^{(k+1)} & = & (b_n - a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)})/a_{nn}.
\end{cases}
$$

上式也可以简记为

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

例3.2 用高斯-赛德尔迭代法求解例3.1中的方程组.

例3.2 用高斯-赛德尔迭代法求解例3.1中的方程组.

解 高斯-赛德尔迭代格式为

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

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

例3.2 用高斯-赛德尔迭代法求解例3.1中的方程组.

解 高斯-赛德尔迭代格式为

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

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

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

逐次超松弛(SOR)迭代法

逐次超松弛(SOR,Successive Over-Relaxation)迭代法. 简称为**SOR方法**,

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)x_i^{(k)} + \omega(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)})/a_{ii}, \quad i = 1, \cdots, n.$$

逐次超松弛(SOR,Successive Over-Relaxation)迭代法. 简称为**SOR方法**,

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)x_i^{(k)} + \omega(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)})/a_{ii},\ i = 1, \cdots, n.$$

参数ω称为**松弛因子**. 由上式可见, 高斯-赛德尔迭代法是超松弛迭代法中, 松弛因子$\omega = 1$时的特例. 若将由高斯-赛德尔迭代法计算出的$x^{(k+1)}$记为$x_{G-S}^{(k+1)}$,则超松弛迭代法可简记为

$$x_{SOR}^{(k+1)} = (1-\omega)x^{(k)} + \omega x_{G-S}^{(k+1)}.$$

故超松弛迭代法可以看作是$x^{(k)}$与$x_{G-S}^{(k+1)}$的一种加权平均. 若ω选取合适, 就能起到加速收敛的效果.

迭代法的矩阵表示

将三种迭代法改写为统一的迭代格式:$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g$.

将线性方程组的系数矩阵A分解为$A = D - E - F$. 其中

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix},$$

$$F = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & -a_{13} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & -a_{23} & \cdots & -a_{2n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & 0 & -a_{n-1,n} \\ & & & & 0 \end{pmatrix}.$$

迭代法的矩阵表示

(1) 雅克比迭代法

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{E} + \mathbf{F})x^{(k)} + D^{-1}b.$$

迭代法的矩阵表示

（1）雅克比迭代法

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g = \mathbf{D}^{-\mathbf{1}}(\mathbf{E} + \mathbf{F})x^{(k)} + D^{-1}b.$$

（2）高斯-赛德尔迭代法

$$x^{(k+1)} = D^{-1}Ex^{(k+1)} + D^{-1}Fx^{(k)} + D^{-1}b$$

$$x^{(k+1)} = (\mathbf{D} - \mathbf{E})^{-\mathbf{1}}\mathbf{F}x^{(k)} + (D - E)^{-1}b = Bx^{(k)} + g.$$

迭代法的矩阵表示

（1）雅克比迭代法

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{E} + \mathbf{F})x^{(k)} + D^{-1}b.$$

（2）高斯-赛德尔迭代法

$$x^{(k+1)} = D^{-1}Ex^{(k+1)} + D^{-1}Fx^{(k)} + D^{-1}b$$

$$x^{(k+1)} = (\mathbf{D} - \mathbf{E})^{-1}\mathbf{F}x^{(k)} + (D - E)^{-1}b = Bx^{(k)} + g.$$

（3）超松弛迭代法

$$x^{(k+1)} = (1 - \omega)x^{(k)} + \omega D^{-1}(Ex^{(k+1)} + Fx^{(k)} + b)$$

$$x^{(k+1)} = (\mathbf{D} - \omega\mathbf{E})^{-1}[(\mathbf{1} - \omega)\mathbf{D} + \omega\mathbf{F}]x^{(k)} + \omega(D - \omega E)^{-1}b = Bx^{(k)} + g$$

Theorem

对任意给定的初始点$x^{(0)}$, 由迭代格式

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g, \qquad k = 0, 1, 2, \cdots$$

产生的迭代点列$\{x^{(k)}\}$都收敛的充分必要条件是以下两条件之一成立.

（1）$B^k \to 0\ (k \to \infty)$;

（2）迭代矩阵B的谱半径$\rho(B) < 1$.

迭代法的收敛性

证明　（1）设x^*是方程组的解，即$x^* = Bx^* + g$，相减，得

$$x^* - x^{(k)} = B(x^* - x^{(k-1)}) = B^2(x^* - x^{(k-2)}) = \cdots = B^k(x^* - x^{(0)}).$$

证明 （1）设x^*是方程组的解，即$x^* = Bx^* + g$，相减，得

$$x^* - x^{(k)} = B(x^* - x^{(k-1)}) = B^2(x^* - x^{(k-2)}) = \cdots = B^k(x^* - x^{(0)}).$$

设$x^{(k)} \to x^*$，$x^* - x^{(0)} \neq 0$，从而$B^k \to 0(k \to \infty)$.

证明 （1）设x^*是方程组的解，即$x^* = Bx^* + g$，相减，得

$$x^* - x^{(k)} = B(x^* - x^{(k-1)}) = B^2(x^* - x^{(k-2)}) = \cdots = B^k(x^* - x^{(0)}).$$

设$x^{(k)} \to x^*$，$x^* - x^{(0)} \neq 0$，从而$B^k \to 0(k \to \infty)$.
反之，$B^k \to 0(k \to \infty)$，得$x^{(k)} \to x^*(k \to \infty)$.

证明 （1）设x^*是方程组的解，即$x^* = Bx^* + g$，相减，得

$$x^* - x^{(k)} = B(x^* - x^{(k-1)}) = B^2(x^* - x^{(k-2)}) = \cdots = B^k(x^* - x^{(0)}).$$

设$x^{(k)} \to x^*$，$x^* - x^{(0)} \neq 0$，从而$B^k \to 0 (k \to \infty)$.
反之，$B^k \to 0 (k \to \infty)$，得$x^{(k)} \to x^* (k \to \infty)$.

设λ为B特征值，ξ为特征向量，则$B\xi = \lambda\xi$，$B^k\xi = \lambda^k\xi$，

$$\therefore \quad B^k \to 0 \Leftrightarrow \lambda^k \to 0 \Leftrightarrow \rho(B) < 1.$$

迭代法的收敛性

Theorem

若迭代矩阵B的范数$\|B\| < 1$, 则对任意给定的初始点$x^{(0)}$, 由迭代格式

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g, \qquad k = 0, 1, 2, \cdots$$

产生的迭代序列$\{x^{(k)}\}$都收敛于方程组$x = Bx + g$ 的解x^*, 且有误差估计式

$$\|x^* - x^{(k)}\| \le \frac{\|B\|}{1 - \|B\|}\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|,$$

$$\|x^* - x^{(k)}\| \le \frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|}\|x^{(1)} - x^{(0)}\|.$$

证明

$$|\lambda|\|\xi\| = \|\lambda\xi\| = \|B\xi\| \leq \|B\|\|\xi\| < \|\xi\|$$

$$\Rightarrow \||\lambda| < 1 \Rightarrow \rho(B) < 1 \Rightarrow x^{(k)} \to x^*$$

证明

$$|\lambda|\|\xi\| = \|\lambda\xi\| = \|B\xi\| \leq \|B\|\|\xi\| < \|\xi\|$$

$$\Rightarrow \||\lambda| < 1 \Rightarrow \rho(B) < 1 \Rightarrow x^{(k)} \to x^*$$

证两个误差估计式

$$\|x^{(k+n)} - x^{(k)}\| = \|x^{(k+n)} - x^{(k+n-1)} + \cdots + x^{(k+1)} - x^{(k)}\|$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \|x^{(k+i)} - x^{(k+i-1)}\|.$$

而

$$\|x^{(k+i)} - x^{(k+i-1)}\| = \|Bx^{(k+i-1)} + g - (Bx^{(k+i-2)} + g)\|$$
$$\leq \|B\| \, \|x^{(k+i-1)} - x^{(k+i-2)}\| \leq \cdots \leq \|B\|^{i-1} \, \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|.$$

迭代法的收敛性

$$\therefore \|x^{(k+n)} - x^{(k)}\| \le \sum_{i=1}^{n} \|B\|^{i-1} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|$$

$$= \frac{1 - \|B\|^n}{1 - \|B\|} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|.$$

在上式两边令$n \to \infty$取极限得

$$\|x^* - x^{(k)}\| \le \frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|}{1 - \|B\|} \le \frac{\|B\|}{1 - \|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|.$$

$$\therefore \|x^{(k+n)} - x^{(k)}\| \le \sum_{i=1}^{n} \|B\|^{i-1} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|$$
$$= \frac{1 - \|B\|^n}{1 - \|B\|} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|.$$

在上式两边令$n \to \infty$取极限得

$$\|x^* - x^{(k)}\| \le \frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|}{1 - \|B\|} \le \frac{\|B\|}{1 - \|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|.$$

又

$$\because \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \le \|B\|^{k-1} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|.$$
$$\therefore \|x^* - x^{(k)}\| \le \frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|.$$

例 线性方程组

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

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

发散

例 线性方程组

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

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

发散

例

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

可以判定迭代收敛，but

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

不能判定迭代发散

Corollary

超松弛迭代法收敛的必要条件是$0 < \omega < 2$.

Corollary

超松弛迭代法收敛的必要条件是$0 < \omega < 2$.

证明 超松弛迭代法的迭代矩阵

$$B = (D - \omega E)^{-1}[(1 - \omega)D + \omega F].$$

设λ_i $(i = 1, 2, \cdots, n)$是矩阵B的特征值, 则

$$\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n = |B| = |(D - \omega E)^{-1}|\,|(1 - \omega)D + \omega F|$$
$$= \frac{|(1 - \omega)D + \omega F|}{|D - \omega E|} = \frac{(1 - \omega)^n a_{11}a_{22}\cdots a_{nn}}{a_{11}a_{22}\cdots a_{nn}} = (1 - \omega)^n.$$

若超松弛迭代法收敛, 则$\rho(B) = \max\limits_{1\le i\le n}\{|\lambda_i|\} < 1$.
所以, $|1 - \omega|^n = |(1 - \omega)^n| = |\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n| < 1$.
由此可得, $|1 - \omega| < 1 \Rightarrow 0 < \omega < 2$.

Lemma

设A是严格对角占优阵, $0 < \omega \le 1$, 当$|\lambda| \ge 1$时, 矩阵

$$(\lambda + \omega - 1)D - \lambda\omega E - \omega F$$

是严格对角占优阵, 从而是非奇异矩阵.

Lemma

设A是严格对角占优阵, $0 < \omega \le 1$, 当$|\lambda| \ge 1$时, 矩阵

$$(\lambda + \omega - 1)D - \lambda\omega E - \omega F$$

是严格对角占优阵, 从而是非奇异矩阵.

Corollary

设线性方程组的系数矩阵A是严格对角占优矩, 则对任意给定的初始点$x^{(0)}$, 雅可比迭代法、高斯-赛德尔迭代法和$0 < \omega \le 1$的超松弛迭代法收敛.

证明 （1）雅可比迭代法的迭代矩阵为

$$B = D^{-1}(E+F).$$

则$|\lambda I - B| = |\lambda I - D^{-1}(E+F)| = |D^{-1}||\lambda D - (E+F)|$.

由$A = D - E - F$是严格对角占优阵知,

当$|\lambda| \geq 1$时$\lambda D - (E+F)$是严格对角占优阵, 从而是非奇异矩阵.

因此, $|\lambda D - (E+F)| \neq 0$. 故当$|\lambda| \geq 1$ 时$|\lambda I - B| \neq 0$. 反之,

$|\lambda I - B| = 0$, 必然$|\lambda| < 1$. 据此, 矩阵B的特征

值$|\lambda| < 1 \Rightarrow \rho(B) < 1$. 由定理知雅可比迭代法收敛.

证明 （1）雅可比迭代法的迭代矩阵为

$$B = D^{-1}(E+F).$$

则$|\lambda I - B| = |\lambda I - D^{-1}(E+F)| = |D^{-1}||\lambda D - (E+F)|$.
由$A = D - E - F$是严格对角占优阵知,
当$|\lambda| \geq 1$时$\lambda D - (E+F)$是严格对角占优阵, 从而是非奇异矩阵.
因此, $|\lambda D - (E+F)| \neq 0$. 故当$|\lambda| \geq 1$ 时$|\lambda I - B| \neq 0$. 反之,
$|\lambda I - B| = 0$, 必然$|\lambda| < 1$. 据此, 矩阵B的特征
值$|\lambda| < 1 \Rightarrow \rho(B) < 1$. 由定理知雅可比迭代法收敛.
（2）超松弛迭代法$(0 < \omega \leq 1)$
超松弛迭代法的迭代矩阵

$$B = (D - \omega E)^{-1}[(1-\omega)D + \omega F],$$

则

$$
\begin{aligned}
|\lambda I - B| &= |\lambda I - (D-\omega E)^{-1}[(1-\omega)D+\omega F]\,| \\
&= |(D-\omega E)^{-1}|\,|\lambda(D-\omega E) - [(1-\omega)D+\omega F]\,| \\
&= |(D-\omega E)^{-1}|\,|(\lambda+\omega-1)D - \lambda\omega E - \omega F|.
\end{aligned}
$$

由引理3.3.1知$0<\omega\leq 1$, 当$|\lambda|\geq 1$ 时,

$$|(\lambda+\omega-1)D - \lambda\omega E - \omega F| \neq 0.$$

又

$$|(D-\omega E)^{-1}| = \frac{1}{a_{11}a_{22}\cdots a_{nn}} \neq 0.$$

从而$|\lambda I - B| \neq 0$. 据此可知对于$0<\omega\leq 1$, 只有当$|\lambda|<1$时,
$|\lambda I - B| = 0$.
即矩阵B的特征值的模$|\lambda|<1 \Rightarrow \rho(B)<1$.

Corollary

设线性方程组的系数矩阵A是对称正定矩阵, 则对任意给定的初始点$x^{(0)}$, 雅可比迭代法收敛的充分必要条件是$2D-A$是对称正定矩阵.

Corollary

设线性方程组的系数矩阵A是对称正定矩阵, 则对任意给定的初始点$x^{(0)}$, 雅可比迭代法收敛的充分必要条件是$2D-A$是对称正定矩阵.

证明 必要性

设雅可比迭代法收敛. 由A 是对称矩阵知$A=D-E-E^T$,则迭代矩阵

$$B=D^{-1}(E+E^T)=I-D^{-1}A=D^{-1/2}(I-D^{-1/2}AD^{-1/2})D^{1/2}.$$

设$D^{-1/2}AD^{-1/2}$ 的特征值为μ , 则$I-D^{-1/2}AD^{-1/2}$ 的特征值为$1-\mu$. 由于B 相似于$I-D^{-1/2}AD^{-1/2}$, 故B的特征值为$\lambda=1-\mu$. 由雅可比迭代法收敛知$\rho(B)<1$.

由此得$|\lambda| = |1-\mu| < 1 \Rightarrow 0 < \mu < 2$. 故$2I - D^{-1/2}AD^{-1/2}$ 的特征值为$2-\mu \in (0,2)$. 所以, $2I - D^{-1/2}AD^{-1/2}$ 是正定矩阵. 由此可知$2D - A = D^{1/2}(2I - D^{-1/2}AD^{-1/2})D^{1/2}$ 是正定矩阵.

由此得$|\lambda| = |1-\mu| < 1 \Rightarrow 0 < \mu < 2$. 故$2I - D^{-1/2}AD^{-1/2}$ 的特征值为$2-\mu \in (0,2)$. 所以, $2I - D^{-1/2}AD^{-1/2}$ 是正定矩阵. 由此可知$2D - A = D^{1/2}(2I - D^{-1/2}AD^{-1/2})D^{1/2}$ 是正定矩阵.

充分性　设$2D - A$ 是正定矩阵. 则由A是对称正定矩阵知$D^{-1/2}AD^{-1/2}$ 也是对称正定矩阵, 设其特征值为$\mu(\mu > 0)$. 同必要性的证明知B 的特征值为$\lambda = 1-\mu$. 由$\mu > 0$知

$$\lambda = 1 - \mu < 1.$$

另一方面, $-B=-D^{-1/2}(I-D^{-1/2}AD^{-1/2})D^{1/2}$
$=D^{-1/2}\left[I-D^{-1/2}(2D-A)D^{-1/2}\right]D^{1/2}$.
由此可知, $-B$的特征值与$I-D^{-1/2}(2D-A)D^{-1/2}$ 的特征值相同.
由$2D-A$ 是正定矩阵知$D^{-1/2}(2D-A)D^{-1/2}$是正定矩阵, 设其特征值为$\bar{\mu}(\bar{\mu}>0)$. 而$I-D^{-1/2}(2D-A)D^{-1/2}$ 的特征值为$1-\bar{\mu}$.
B的特征值为λ , 则$-B$的特征值为$-\lambda$, 故有

$$-\lambda=1-\bar{\mu}<1.$$

即$\lambda>-1$. $\quad|\lambda|<1\Rightarrow\rho(B)<1$. 所以, 雅克比迭代法收敛.

Corollary

设线性方程组系数矩阵A是对称正定矩阵，则对任意给定的初始点$x^{(0)}$，超松弛迭代法收敛的充分必要条件是$0 < \omega < 2$.

Corollary

设线性方程组系数矩阵A是对称正定矩阵，则对任意给定的初始点$x^{(0)}$，超松弛迭代法收敛的充分必要条件是$0 < \omega < 2$.

超松弛迭代法收敛的快慢取决于松弛因子ω的选取，自然希望选取最佳松弛因子ω使得超松弛迭代法具有较快的收敛速度，但目前尚无可供计算最佳松弛因子的实用方法. 但当A 是对称正定的三对角矩阵时，Young(1950)从理论上建立了最佳松弛因子的计算公式

$$\omega = \frac{2}{1+\sqrt{1-[\rho(B_J)]^2}},$$

其中B_J是雅可比迭代矩阵.

例 讨论求解方程组$Ax=b$的三种迭代法的收敛性.

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

例 讨论求解方程组$Ax=b$的三种迭代法的收敛性.

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

解 （1） A是对称矩阵，其顺序主子式分别为

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

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

例 讨论求解方程组$Ax=b$的三种迭代法的收敛性.

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

解 （1） A是对称矩阵, 其顺序主子式分别为

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

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

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

例 设线性方程组$Ax = b$ 的系数矩阵

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

若要雅可比迭代法、高斯-赛德尔迭代法收敛，请给出数a的取值范围.

例 设线性方程组$Ax = b$ 的系数矩阵

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

若要雅可比迭代法、高斯-赛德尔迭代法收敛，请给出数a的取值范围.

解 对于雅可比迭代法考察其迭代矩阵

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

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

例 设线性方程组$Ax=b$ 的系数矩阵

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

若要雅可比迭代法、高斯-赛德尔迭代法收敛，请给出数a的取值范围.

解 对于雅可比迭代法考察其迭代矩阵

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

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

对于高斯-赛德尔迭代法，

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

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

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

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

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

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

共轭梯度法

本节介绍大型稀疏对称正定矩阵的线性方程组$Ax=b$的共轭梯度法.

本节介绍大型稀疏对称正定矩阵的线性方程组$Ax = b$的共轭梯度法.

共轭梯度法是把求解线性方程组的问题转化为求解一个与之等价的二次函数极小化的问题. 从任意给定的初始点出发, 沿一组关于矩阵A的共轭方向进行线性搜索, 在无舍入误差的假定下, 最多迭代n次(n是矩阵A的阶数), 就可求得二次函数的极小点, 也就求得了线性方程组$Ax = b$的解.

本节介绍大型稀疏对称正定矩阵的线性方程组$Ax=b$的共轭梯度法.

共轭梯度法是把求解线性方程组的问题转化为求解一个与之等价的二次函数极小化的问题. 从任意给定的初始点出发, 沿一组关于矩阵A的共轭方向进行线性搜索, 在无舍入误差的假定下, 最多迭代n次(n是矩阵A的阶数), 就可求得二次函数的极小点, 也就求得了线性方程组$Ax=b$的解.

n元函数$f(x)$的梯度定义为

$$\bigtriangledown f(x) = gradf(x) = (\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial f}{\partial x_n})^T.$$

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

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

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

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

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

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

由此则得

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

共轭梯度法

由此则得

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

下述定理给出了求系数矩阵A是对称正定矩阵的线性方程组$Ax=b$的解与求二次函数$f(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx$极小点的等价性.

Theorem

设A是n阶对称正定矩阵，则x^*是方程组$Ax=b$的解的充分必要条件是x^*是二次函数$f(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx$的极小点，即

$$Ax^*=b \Leftrightarrow f(x^*)=\min_{x\in R^n} f(x).$$

Theorem

设A是n阶对称正定矩阵，则x^*是方程组$Ax=b$的解的充分必要条件是x^*是二次函数$f(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx$的极小点，即

$$Ax^*=b \Leftrightarrow f(x^*)=\min_{x\in R^n} f(x).$$

证明 必要性　若x^*是方程组$Ax=b$的解，即$Ax^*=b$. 注意到A是对称正定矩阵，故$\forall x\in R^n$，有

$$f(x)-f(x^*)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx-\frac{1}{2}x^{*T}Ax^*+b^Tx^*$$
$$=\frac{1}{2}(x^TAx-2(Ax^*)^Tx+x^{*T}Ax^*)-(Ax^*-b)^Tx^*$$
$$=\frac{1}{2}(x-x^*)^TA(x-x^*)\geq 0.$$

即x^*是$f(x)$的极小点.

充分性　设x^*是$f(x)$的极小点, 则由无约束最优化问题最优解的必要条件知

$$\bigtriangledown f(x^*) = Ax^* - b = 0,$$

即x^*是方程组$Ax = b$的解.

充分性　设x^*是$f(x)$的极小点，则由无约束最优化问题最优解的必要条件知

$$\bigtriangledown f(x^*) = Ax^* - b = 0,$$

即x^*是方程组$Ax = b$的解.

最速下降法（Newton下山法）的思想： 由一点$x^{(0)}$出发，找到下降的方向$p^{(0)}$,在下降的方向上做一定的步长下降$x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 p^{(0)}$，使得$f(x^{(1)}) \leq f(x^{(0)})$；一般地，由一点$x^{(k)}$出发，找到下降的方向$p^{(k)}$,在下降的方向上做一定的步长下降$x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_k p^{(k)}$，使得$f(x^{(k+1)}) \leq f(x^{(k)})$

共轭梯度法的思想：

对变量分离函数$f(x) = f_1(x_1) + f_2(x_2) + \cdots + f_n(x_n)$，从任一点$x$出发，分别沿每个坐标轴方向进行一维搜索，进行一遍（进行n次线搜索后）一定能找到$\min f(x)$的最优解。

共轭梯度法

共轭梯度法的思想：

对变量分离函数$f(x) = f_1(x_1) + f_2(x_2) + \cdots + f_n(x_n)$，从任一点$x$出发，分别沿每个坐标轴方向进行一维搜索，进行一遍（进行n次线搜索后）一定能找到$\min f(x)$的最优解。

对$f(x) = x^T Ax - 2b^T x$ (A对称正定)，选择适当的一组基$\{d^1, d^2, \cdots, d^n\}$使得$d^i$满足

$$(d^i)^T Ad^j = 0, (i \neq j)$$

在新基下，$f(x)$变为变量分离形式，从任何一个初始点出发，分别沿每个d^i方向进行搜索，经过一轮后，一定能得到最优解。

共轭梯度法

Definition

（共轭向量） 设A是n阶对称正定矩阵，若R^n中一组非零向量$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$满足$(d^{(i)}, Ad^{(j)}) = 0, \quad i \neq j$，则称$d^{(i)}, d^{(j)}$是关于矩阵$A$的共轭向量，$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$是关于矩阵$A$的共轭向量组.

当$A = I$时共轭向量组即正交向量组，可以认为共轭是正交概念的推广.

共轭梯度法

Definition

（**共轭向量**）　设A是n阶对称正定矩阵，若R^n中一组非零向量$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$满足$(d^{(i)}, Ad^{(j)}) = 0, \quad i \neq j$，则称$d^{(i)}, d^{(j)}$是关于矩阵$A$的共轭向量，$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$是关于矩阵$A$的共轭向量组.

当$A = I$时共轭向量组即正交向量组，可以认为共轭是正交概念的推广.

如何构造两两A共轭的方向？—特殊的共轭梯度。

Definition

（共轭向量） 设A是n阶对称正定矩阵，若R^n中一组非零向量$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$满足$(d^{(i)}, Ad^{(j)}) = 0, \quad i \neq j$，则称$d^{(i)}, d^{(j)}$是关于矩阵$A$的共轭向量，$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$是关于矩阵$A$的共轭向量组.

当$A = I$时共轭向量组即正交向量组，可以认为共轭是正交概念的推广.

如何构造两两A共轭的方向？—特殊的共轭梯度。

共轭梯度法：在每个迭代点x^k外，以负梯度方向r^k和前一个搜索方向d^{k-1}的恰当组合，构成和前$k-1$个搜索方向$d^1, d^2, \cdots, d^{k-1}$均两两$A$共轭的搜索方向$d^k$.

共轭梯度法

Theorem

关于矩阵A的共轭向量$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$线性无关.

共轭梯度法

Theorem

关于矩阵A的共轭向量$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$线性无关.

证明　设

$$c_0 d^{(0)} + c_1 d^{(1)} + \cdots + c_m d^{(m)} = 0.$$

对上式两边用$Ad^{(i)}(i = 0, 1, \cdots, m)$作内积, 则有

$$(Ad^{(i)}, \sum_{j=0}^{m} c_j d^{(j)}) = \sum_{j=0}^{m} c_j (Ad^{(i)}, d^{(j)}) = c_i (Ad^{(i)}, d^{(i)}) = 0, \quad i = 0, 1, \cdots$$

由A是对称正定矩阵

及$d^{(i)} \neq 0 (i = 0, 1, \cdots, m)$知$(Ad^{(i)}, d^{(i)}) > 0$, 从

而$c_i = 0 (i = 0, 1, \cdots, m)$, 即向量$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$线性无关.

共轭梯度法

共轭梯度法在形式上具有迭代法的特征：给定初始点$x^{(0)}$，由迭代格式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$$

产生的迭代序列$x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, \cdots$，求得$f(x)$的最小点，

$f(x^{(k+1)}) = \min f(x) = \min_{y \in span\{d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(k-1)}\}} f(y + \alpha_k d^{(k)})$

也就是方程组$Ax = b$的解.

极小化

$$f(y + \alpha d^{(k)}) = \frac{1}{2}\alpha^2 (d^{(k)})^T A d^{(k)} - \alpha b^T d^{(k)} + f(y) + \alpha(Ay, d^{(k)})$$

故

$$(Ay, d^{(k)}) = 0 \qquad (Ad^{(j)}, d^{(k)}) = 0, j = 0, 1, \cdot, k-1$$

共轭梯度法中关键的两点是，确定迭代格式中的搜索向量$d^{(k)}$和最佳步长α_k（$\alpha_k > 0$）.

步长α_k的确定原则是给定迭代点$x^{(k)}$和搜索方向$d^{(k)}$后，要求选取非负实数α_k使得$f(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)})$达到最小．即选择$\alpha_k$满足

$$f(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}) = \min_{0\leq\alpha} f(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}).$$

共轭梯度法

步长α_k的确定原则是给定迭代点$x^{(k)}$和搜索方向$d^{(k)}$后，要求选取非负实数α_k使得$f(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)})$达到最小. 即选择$\alpha_k$满足

$$f(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}) = \min_{0\le\alpha} f(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}).$$

根据多元复合函数的求导法则得

$$\begin{aligned} 0 &= \triangledown f(x^{(k)}+\alpha d^{(k)})^T d^{(k)} = [A(x^k+\alpha d^{(k)})-b]^T d^{(k)} \\ &= (Ax^{(k)}-b+\alpha A d^{(k)})^T d^{(k)} = (-r^{(k)}+\alpha A d^{(k)})^T d^{(k)}, \end{aligned}$$

$$\alpha_k = \frac{{r^{(k)}}^T d^{(k)}}{{d^{(k)}}^T A d^{(k)}}, \quad r^{(k)} = b - Ax^{(k)}.$$

步长α_k的确定原则是给定迭代点$x^{(k)}$和搜索方向$d^{(k)}$后，要求选取非负实数α_k使得$f(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)})$达到最小. 即选择$\alpha_k$满足

$$f(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)})=\min_{0\le\alpha} f(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}).$$

根据多元复合函数的求导法则得

$$0=\bigtriangledown f(x^{(k)}+\alpha d^{(k)})^T d^{(k)}=[A(x^k+\alpha d^{(k)})-b]^T d^{(k)}$$
$$=(Ax^{(k)}-b+\alpha Ad^{(k)})^T d^{(k)}=(-r^{(k)}+\alpha Ad^{(k)})^T d^{(k)},$$

$$\alpha_k=\frac{{r^{(k)}}^T d^{(k)}}{{d^{(k)}}^T Ad^{(k)}},\quad r^{(k)}=b-Ax^{(k)}.$$

搜索方向

给定初始点$x^{(0)}$后，由于负梯度方向是函数下降最快的方向，故$d^{(0)}=r^{(0)}=-\bigtriangledown f(x^{(0)})=b-Ax^{(0)}$，令$x^{(1)}=x^{(0)}+\alpha_0 d^{(0)}$，$\alpha_0=\frac{r^{(0)T}d^{(0)}}{d^{(0)T}Ad^{(0)}}$

共轭梯度法

第2次迭代时，从$x^{(1)}$出发的搜索方向选取$d^{(1)} = r^{(1)} + \beta_0 d^{(0)}$使得$d^{(1)}$与$d^{(0)}$是关于矩阵$A$ 的共轭向量，即要求$d^{(1)}$满足$(d^{(1)}, Ad^{(0)}) = 0$，由此可求得参数

$$\beta_0 = -\frac{{r^{(1)}}^T A d^{(0)}}{d^{(0)T} A d^{(0)}}.$$

第2次迭代时，从$x^{(1)}$出发的搜索方向选取$d^{(1)} = r^{(1)} + \beta_0 d^{(0)}$使得$d^{(1)}$与$d^{(0)}$是关于矩阵$A$ 的共轭向量，即要求$d^{(1)}$满足$(d^{(1)}, Ad^{(0)}) = 0$，由此可求得参数

$$\beta_0 = -\frac{{r^{(1)}}^T Ad^{(0)}}{d^{(0)T} Ad^{(0)}}.$$

$d^{(k)}$是关于矩阵A的共轭向量．设已经求出$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$，计算$r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)}$，令$d^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k d^{(k)}$，选取$\beta_k$ 使得$d^{(k+1)}$与$d^{(k)}$是关于A的共轭向量，即要求$d^{(k+1)}$满足$(d^{(k+1)}, Ad^{(k)}) = 0$．由此可得

$$\beta_k = -\frac{r^{(k+1)T} Ad^{(k)}}{d^{(k)T} Ad^{(k)}},$$

Hestenes-Stiefel(1952)公式

$$\alpha_k = \frac{r^{(k)}{}^T d^{(k)}}{d^{(k)}{}^T A d^{(k)}}, \quad \beta_k = -\frac{r^{(k+1)T} A d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}}.$$

Flecter-Reeves公式

$$\alpha_k = \frac{r^{(k)}{}^T r^{(k)}}{d^{(k)}{}^T A d^{(k)}}, \quad \beta_k = \frac{r^{(k+1)T} r^{(k+1)}}{r^{(k)T} r^{(k)}}.$$

共轭梯度法

共轭梯度的计算过程：

（1）给定初始近似点$x^{(0)}$及精度$\epsilon > 0$;

共轭梯度法

共轭梯度的计算过程：

（1）给定初始近似点$x^{(0)}$及精度$\epsilon > 0$；

（2）计算 $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$，取$d^{(0)} = r^{(0)}$；

共轭梯度的计算过程：

（1）给定初始近似点$x^{(0)}$及精度$\epsilon > 0$；

（2）计算 $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, 取$d^{(0)} = r^{(0)}$；

（3）*for* $k = 0, 1, \cdots, n-1$ *do*

1^0 $\alpha_k = \frac{r^{(k)T} r^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}}$

2^0 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$

3^0 $r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)}$

4^0 若$\|r^{(k+1)}\| \le \epsilon$ 或 $k+1 = n$, 则输出近似解 $x^{(k+1)}$, 停.

否则转5^0

5^0 $\beta_k = -\frac{r^{(k+1)T} A d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}} = \frac{\|r^{(k+1)}\|_2^2}{\|r^{(k)}\|_2^2}$;

6^0 $d^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k d^{(k)}$;

end do

共轭梯度法

Theorem

设$r^{(i)}, d^{(i)}(i = 0, 1, \cdots, n-1)$分别是共轭梯度法中产生的非零残向量和搜索方向, 则

(1) $(r^{(k)}, d^{(k-1)}) = 0$;

(2) $(r^{(k)}, d^{(k)}) = (r^{(k)}, r^{(k)})$;

(3) $r^{(0)}, r^{(1)}, \cdots, r^{(k)}, (k \leq n-1)$是正交向量组;

$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(k)}, (k \leq n-1)$是关于$A$的共轭向量组.

Theorem

设$r^{(i)}, d^{(i)} (i = 0, 1, \cdots, n-1)$分别是共轭梯度法中产生的非零残向量和搜索方向，则

（1）$(r^{(k)}, d^{(k-1)}) = 0$;

（2）$(r^{(k)}, d^{(k)}) = (r^{(k)}, r^{(k)})$;

（3）$r^{(0)}, r^{(1)}, \cdots, r^{(k)}, (k \le n-1)$是正交向量组;
$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(k)}, (k \le n-1)$是关于$A$的共轭向量组.

证明　（1）$r^{(k)} = b - Ax^{(k)} = b - A(x^{(k-1)} + \alpha_{k-1} d^{(k-1)}) = r^{(k-1)} - \alpha_{k-1} A d^{(k-1)}$. 故
$(r^{(k)}, d^{(k-1)}) = (r^{(k-1)}, d^{(k-1)}) - \alpha_{k-1}(Ad^{(k-1)}, d^{(k-1)})$
代入α_{k-1}，则

$$(r^{(k)}, d^{(k-1)}) = 0.$$

（2）$d^{(k)} = r^{(k)} + \beta_{k-1} d^{(k-1)}$, 并利用结论（1）可得

$$(r^{(k)}, d^{(k)}) = (r^{(k)}, r^{(k)}) + \beta_{k-1}(r^{(k)}, d^{(k-1)}) = (r^k, r^k).$$

（2）$d^{(k)} = r^{(k)} + \beta_{k-1} d^{(k-1)}$, 并利用结论（1）可得

$$(r^{(k)}, d^{(k)}) = (r^{(k)}, r^{(k)}) + \beta_{k-1}(r^{(k)}, d^{(k-1)}) = (r^k, r^k).$$

（3）用归纳法证明之.

第1步　证当$m = 1$时, $r^{(0)}, r^{(1)}$正交, $d^{(0)}, d^{(1)}$关于矩阵A共轭;

$$(r^{(1)}, r^{(0)}) = (r^{(0)} - \alpha_0 A d^{(0)}, r^{(0)}) = (r^{(0)}, r^{(0)}) - \alpha_0 (A d^{(0)}, r^{(0)}),$$

注意到$d^{(0)} = r^{(0)}$, 代入α_0 则

$$(r^{(1)}, r^{(0)}) = 0,$$

$$\begin{aligned}(d^{(1)}, Ad^{(0)}) &= (r^{(1)} + \beta_0 d^{(0)}, Ad^{(0)}) \\ &= (r^{(1)}, Ad^{(0)}) + \beta_0 (d^{(0)}, Ad^{(0)}).\end{aligned}$$

代入β_0, 则

$$(d^{(1)}, Ad^{(0)}) = 0.$$

第2步　假定$m=k$时结论成立，即$r^{(0)}, r^{(1)}, \cdots, r^{(k)}$是正交向量组，
$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(k)}$是关于矩阵$A$的共轭向量组；

第2步　假定$m=k$时结论成立，即$r^{(0)},r^{(1)},\cdots,r^{(k)}$是正交向量组，
$d^{(0)},d^{(1)},\cdots,d^{(k)}$是关于矩阵$A$的共轭向量组；
第3步　证$m=k+1$时结论也成立，即
证$r^{(0)},r^{(1)},\cdots,r^{(k)},r^{(k+1)}$是正交向量组，
$d^{(0)},d^{(1)},\cdots,d^{(k)},d^{(k+1)}$是关于矩阵$A$的共轭向量组.
当　$i=0,1,\cdots,k-1$时，
由　$d^{(i)}=r^{(i)}+\beta_{i-1}d^{(i-1)}$　知　$r^{(i)}=d^{(i)}-\beta_{i-1}d^{(i-1)}$. 所以，

$$\begin{aligned}
&(r^{(k+1)},r^{(i)})=(r^{(k)}-\alpha_k Ad^{(k)},r^{(i)})=(r^{(k)},r^{(i)})-\alpha_k(Ad^{(k)},r^{(i)})\\
&=(r^{(k)},r^{(i)})-\alpha_k\left[(Ad^{(k)},d^{(i)})-\beta_{i-1}(Ad^{(k)},d^{(i-1)})\right]\\
&=0.\quad(\text{根据第2步假定})
\end{aligned}$$

共轭梯度法

当$i=k$时,

$$
\begin{aligned}
(r^{(k+1)}, r^{(k)}) &= (r^{(k)}, r^{(k)}) - \alpha_k\left[(Ad^{(k)}, d^{(k)}) - \beta_{k-1}(Ad^{(k)}, d^{(k-1)})\right] \\
&= (r^{(k)}, r^{(k)}) - \frac{(r^{(k)}, d^{(k)})}{(d^{(k)}, Ad^{(k)})}(Ad^{(k)}, d^{(k)}) \\
&= (r^{(k)}, r^{(k)}) - (r^{(k)}, d^{(k)}) \\
&= 0.
\end{aligned}
$$

即$r^{(0)}, r^{(1)}, \cdots, r^{(k)}, r^{(k+1)}$是正交向量组.

下面证 $(d^{(k+1)}, Ad^{(i)}) = 0, \quad i = 0, 1, \cdots, k.$

由 $d^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k d^{(k)}$ 知

$$(d^{(k+1)}, Ad^{(i)}) = (r^{(k+1)}, Ad^{(i)}) + \beta_k(d^{(k)}, Ad^{(i)}).$$

共轭梯度法

当$i=0,1,\cdots,k-1$时，由$r^{(i+1)}=r^{(i)}-\alpha_i Ad^{(i)}$ 得

$$Ad^{(i)}=(r^{(i)}-r^{(i+1)})/\alpha_i,\quad (\alpha_i>0).$$

代入，并由$\{r^{(i)}\}$的正交性及第2步假定得

$$(d^{(k+1)},Ad^{(i)})=\frac{(r^{(k+1)},r^{(i)}-r^{(i+1)})}{\alpha_i}+\beta_k(d^{(k)},Ad^{(i)})=0.$$

当$i=k$时，
$(d^{(k+1)},Ad^{(k)})=(r^{(k+1)},Ad^{(k)})+\beta_k(d^{(k)},Ad^{(k)})=0$. 所以，有

$$(d^{(k+1)},Ad^{(i)})=0,\qquad i=0,1,\cdots,k.$$

即 $d^{(0)},d^{(1)},\cdots,d^{(k)},d^{(k+1)}$是关于矩阵$A$的共轭向量组，也即结论在$m=k+1$时也成立. 根据归纳法，结论得证.

可以将α_k和β_k的表达式化简为

$$\alpha_k = \frac{r^{(k)T} r^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}} \tag{3.4.4'}$$

$$\beta_k = \frac{r^{(k+1)T} r^{(k+1)}}{r^{(k)T} r^{(k)}} \tag{3.4.5'}$$

事实上，将定理的结论(2)$(r^{(k)}, d^{(k)}) = (r^{(k)}, r^{(k)})$代入$\alpha_k$的表达式即得(3.4.4′). 由$Ad^{(k)} = (r^{(k)} - r^{(k+1)})/\alpha_k$, 则

$$\beta_k = -\frac{r^{(k+1)T} A d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}} = -\frac{r^{(k+1)T}(r^{(k)} - r^{(k+1)})}{\alpha_k d^{(k)T} A d^{(k)}} = \frac{r^{(k+1)T} r^{(k+1)}}{\alpha_k d^{(k)T} A d^{(k)}}.$$

将α_k的表达式(3.4.4′)代入上式，即得(3.4.5′)式.

Theorem

设A是n阶对称正定矩阵，用共轭梯度法求解线性方程组$Ax=b$或等价地求二次函数$f(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx$的极小点，若计算过程中无舍入误差，最多迭代$n$ 次就可得到方程组$Ax=b$的解或二次函数的最小点.

Theorem

设A是n阶对称正定矩阵，用共轭梯度法求解线性方程组$Ax=b$或等价地求二次函数$f(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx$的极小点，若计算过程中无舍入误差，最多迭代$n$ 次就可得到方程组$Ax=b$的解或二次函数的最小点.

证明 在共轭梯度法的迭代过程中，若某个$r^{(k)}=b-Ax^{(k)}=0, \quad (0\le k\le n-1)$，则$x^{(k)}$是方程组的准确解；若$r^{(k)}\ne 0$ $(k=0,1,\cdots,n-1)$，由定理3.4.3的结论（3）的证明过程知残向量$r^{(0)},r^{(1)},\cdots,r^{(n-1)},r^{(n)}$是正交向量组，而在向量空间$R^n$中最多有$n$个互相正交的向量，必然有$r^{(n)}=b-Ax^{(n)}=0$. 即$x^{(n)}$是方程组的准确解.

共轭梯度法

Theorem

设$\{x^{(k)}\}$是用共轭梯度法求得的迭代点列, 则有误差估计式

$$\|x^{(k)}-x^*\|_A \le 2\left(\frac{\sqrt{K}-1}{\sqrt{K}+1}\right)^k \|x^{(0)}-x^*\|_A.$$

其中范数$\|x\|_A=\sqrt{x^TAx}$, $\quad K=Cond_2(A)$.

共轭梯度法

Theorem

设$\{x^{(k)}\}$是用共轭梯度法求得的迭代点列，则有误差估计式

$$\|x^{(k)}-x^*\|_A \le 2\left(\frac{\sqrt{K}-1}{\sqrt{K}+1}\right)^k \|x^{(0)}-x^*\|_A.$$

其中范数$\|x\|_A=\sqrt{x^TAx}, \quad K=Cond_2(A).$

方程组系数矩阵的条件数越大收敛越慢；反之，收敛速度越快

计算经验表明，对于不是十分病态的问题，共轭梯度法收敛较快，迭代次数远小于系数矩阵的阶数n. 对于病态问题，只要进行足够多次迭代（迭代次数大约为矩阵阶数n的3~5倍）后，一般也能得到满意的结果. 因而，共轭梯度法是求解高阶稀疏线性方程组的一个常用有效方法.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

迭代两次求得了方程组的解$x^*=x^{(2)}=(1,1,1)^T$.

双共轭梯度法(BiCG)

当矩阵不对称时，共轭梯度方法无法使用。不同于共轭梯度方法，双共轭梯度方法分别对A和A^T计算残量，产生两个共轭方向序列：

（1）给定$x^{(0)}$, 计算 $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, 取$d^{(0)} = r^{(0)}$, $\tilde{r}^{(0)} = r^{(0)}$;

双共轭梯度法(BiCG)

当矩阵不对称时，共轭梯度方法无法使用。不同于共轭梯度方法，双共轭梯度方法分别对A和A^T计算残量，产生两个共轭方向序列：

（1）给定$x^{(0)}$, 计算 $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, 取$d^{(0)} = r^{(0)}$, $\tilde{r}^{(0)} = r^{(0)}$;

（2）$for \quad k = 0, 1, \cdots, n-1 \quad do$

$1^0 \quad \alpha_k = \frac{r^{(k)T}\tilde{r}^{(k)}}{d^{(k)T}A\tilde{d}^{(k)}}$

$2^0 \quad x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$

$3^0 \quad r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A d^{(k)}, \quad \tilde{r}^{(k+1)} = \tilde{r}^{(k)} - \alpha_k A^T \tilde{d}^{(k)}$

4^0 若$\|r^{(k+1)}\| \le \epsilon$ 或 $k+1 = n$, 则输出近似解 $x^{(k+1)}$, 停.

否则转5^0

$5^0 \quad \beta_k = \frac{r^{(k+1)T}\tilde{r}^{(k+1)}}{r^{(k)T}\tilde{r}^{(k)}}$;

$6^0 \quad d^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k d^{(k)}, \quad \tilde{d}^{(k+1)} = \tilde{r}^{(k+1)} + \beta_k \tilde{d}^{(k)}$;

$end \ do$

伽辽金原理和克雷洛夫子空间

设求解的线性方程组为

$$Ax = b \ (|A| \neq 0),$$

其中$A \in R^{n\times n}$是大型非对称矩阵，$b \in R^n$.
任意给定$x^{(0)} \in R^n$，令$x = x^{(0)} + z$，则方程组等价于

$$Az = r^{(0)}.$$

其中$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$. 若求得其近似解$z^{(m)}$，则原方程组的近似解为$x^{(m)} = x^{(0)} + z^{(m)}$.

设求解的线性方程组为

$$Ax = b \ (|A| \neq 0),$$

其中$A \in R^{n\times n}$是大型非对称矩阵, $b \in R^n$.
任意给定$x^{(0)} \in R^n$, 令$x = x^{(0)} + z$, 则方程组等价于

$$Az = r^{(0)}.$$

其中$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$. 若求得其近似解$z^{(m)}$, 则原方程组的近似解为$x^{(m)} = x^{(0)} + z^{(m)}$.
设R^n中两个m维子空间K_m、L_m的基分别为$\{v_i\}_{i=1}^m$、$\{w_i\}_{i=1}^m$, 则

$$K_m = Span\{v_1, v_2, \cdots, v_m\}, \quad L_m = Span\{w_1, w_2, \cdots, w_m\}.$$

伽辽金原理(Galerkin)：在子空间K_m中找方程组$Az=r^{(0)}$的近似解$z^{(m)}$, 使得残向量$r^{(0)}-Az^{(m)}$与L_m 中的所有向量正交. 即求$z^{(m)}\in K_m$, 使

$$(r^{(0)}-Az^{(m)},w_i)=0,\quad i=1,2,\cdots,m.$$

伽辽金原理和克雷洛夫子空间

伽辽金原理(Galerkin)： 在子空间K_m中找方程组$Az = r^{(0)}$的近似解$z^{(m)}$, 使得残向量$r^{(0)} - Az^{(m)}$与L_m 中的所有向量正交. 即求$z^{(m)} \in K_m$, 使

$$(r^{(0)} - Az^{(m)}, w_i) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m.$$

记矩阵

$$V_m = (v_1, v_2, \cdots, v_m) \in R^{n\times m},$$

$$W_m = (w_1, w_2, \cdots, w_m) \in R^{n\times m}.$$

由$z^{(m)} \in K_m$ 知$z^{(m)} = y_1 v_1 + y_2 v_2 + \cdots + y_m v_m = V_m y^{(m)}$, 其中$y^{(m)} = (y_1, y_2, \cdots, y_m)^T$. 于是

$$w_i^T (r^{(0)} - AV_m y^{(m)}) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m.$$

其矩阵形式为$W_m^T(r^{(0)} - AV_m y^{(m)}) = 0$, 即

$$(W_m^T A V_m) y^{(m)} = W_m^T r^{(0)}.$$

若$W_m^T A V_m$可逆, 则$y^{(m)} = (W_m^T A V_m)^{-1} W_m^T r^{(0)}$. 从而得到

$$z^{(m)} = V_m y^{(m)} = V_m (W_m^T A V_m)^{-1} W_m^T r^{(0)}.$$

伽辽金原理和克雷洛夫子空间

其矩阵形式为$W_m^T(r^{(0)} - AV_m y^{(m)}) = 0$, 即

$$(W_m^T A V_m) y^{(m)} = W_m^T r^{(0)}.$$

若$W_m^T A V_m$可逆, 则$y^{(m)} = (W_m^T A V_m)^{-1} W_m^T r^{(0)}$. 从而得到

$$z^{(m)} = V_m y^{(m)} = V_m (W_m^T A V_m)^{-1} W_m^T r^{(0)}.$$

选取不同的子空间K_m和L_m及它们的基$\{v_i\}_{i=1}^m$、$\{w_i\}_{i=1}^m$, 便得到基于伽辽金原理求解方程组的不同算法.

$Span\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\}$ 称为由矩阵A与向量$r^{(0)}$生成的**克雷洛夫子空间**. 若取

$$K_m = Span\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\}$$

时, 则基于伽辽金原理构成的算法称为**克雷洛夫子空间法(Krylov Subspace Method)**.

在克雷洛夫子空间法中的两个问题：

（1） 如何选取子空间L_m使得矩阵$W_m^T A V_m$可逆；

伽辽金原理和克雷洛夫子空间

在克雷洛夫子空间法中的两个问题：

（1） 如何选取子空间L_m使得矩阵$W_m^T AV_m$可逆；

（2） 当$m = n$时，$z^{(m)}$是方程组$Az = r^{(0)}$的准确解z^*；

而当$m < n$时如何估计误差$\|z^{(m)} - z^*\|$.

在克雷洛夫子空间法中的两个问题：

（1）　如何选取子空间L_m使得矩阵$W_m^T AV_m$可逆；

（2）　当$m = n$时，$z^{(m)}$是方程组$Az = r^{(0)}$的准确解z^*；

而当$m < n$时如何估计误差$\|z^{(m)} - z^*\|$.

就一般情况而言，这两个问题的难度较大，目前在理论上尚未解决. 本节介绍两个实用有效的、具有代表性的克雷洛夫子空间法–阿诺尔德算法和广义极小残余算法.

阿诺尔德过程

阿诺尔德(Arnoldi)过程是利用格拉姆-施密特(Gram-Schmidt)正交化方法，由向量组$r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2 r^{(0)}, \cdots, A^{m-1} r^{(0)}$ 构造克雷洛夫子空间K_m的一组标准正交基的方法.

阿诺尔德(Arnoldi)过程是利用格拉姆-施密特(Gram-Schmidt)正交化方法，由向量组$r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 构造克雷洛夫子空间K_m的一组标准正交基的方法.

1. 阿诺尔德过程

设$r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$线性无关，由这组向量构造$K_m$的一组标准正交基$\{v_i\}_{i=1}^m$，其过程如下：

（1）令$v_1 = r^{(0)}/\|r^{(0)}\|$;

阿诺尔德(Arnoldi)过程是利用格拉姆-施密特(Gram-Schmidt)正交化方法，由向量组$r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 构造克雷洛夫子空间K_m的一组标准正交基的方法.

1. 阿诺尔德过程

设$r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$线性无关，由这组向量构造$K_m$的一组标准正交基$\{v_i\}_{i=1}^m$，其过程如下：

（1）令$v_1 = r^{(0)}/\|r^{(0)}\|$；

（2）取$\tilde{v}_2 = Av_1 - h_{11}v_1$，要求$\tilde{v}_2 \perp v_1$.
由$(\tilde{v}_2, v_1) = 0$ 得$h_{11} = (Av_1, v_1)$. 记$h_{21} = \|\tilde{v}_2\|$,
令$v_2 = \frac{\tilde{v}_2}{\|\tilde{v}_2\|} = \frac{\tilde{v}_2}{\|h_{21}\|}$.

（3）取$\tilde{v}_3 = Av_2 - h_{22}v_2 - h_{12}v_1$, 要求$\tilde{v}_3 \perp v_1, \tilde{v}_3 \perp v_2$.

由$(\tilde{v}_3, v_1) = 0, \quad (\tilde{v}_3, v_2) = 0$,

得$h_{12} = (Av_2, v_1), \quad h_{22} = (Av_2, v_2)$.

记$h_{32} = \|\tilde{v}_3\|$, 令$v_3 = \frac{\tilde{v}_3}{\|\tilde{v}_3\|} = \frac{\tilde{v}_3}{h_{32}}$.

（3）取$\tilde{v}_3 = Av_2 - h_{22}v_2 - h_{12}v_1$, 要求$\tilde{v}_3 \perp v_1, \tilde{v}_3 \perp v_2$.

由$(\tilde{v}_3, v_1) = 0, \quad (\tilde{v}_3, v_2) = 0$,

得$h_{12} = (Av_2, v_1), \quad h_{22} = (Av_2, v_2)$.

记$h_{32} = \|\tilde{v}_3\|$, 令$v_3 = \frac{\tilde{v}_3}{\|\tilde{v}_3\|} = \frac{\tilde{v}_3}{h_{32}}$.

$\cdots \quad \cdots \quad \cdots$

（4）一般地, 对于$k = 1, 2, \cdots, m-1$ 取

$\tilde{v}_{k+1} = Av_k - \sum_{i=1}^{k} h_{ik} v_i$, 要求$\tilde{v}_{k+1} \perp v_i \quad (i = 1, 2, \cdots, k)$.

由$(\tilde{v}_{k+1}, v_i) = 0$ 得$h_{ik} = (Av_k, v_i) \quad (i = 1, 2, \cdots, k)$.

记$h_{k+1,k} = \|\tilde{v}_{k+1}\|$, 令$v_{k+1} = \frac{\tilde{v}_{k+1}}{\|\tilde{v}_{k+1}\|} = \frac{\tilde{v}_{k+1}}{h_{k+1,k}}$.

（5）当$k=m$时，取$\tilde{v}_{m+1}=Av_m-\sum\limits_{i=1}^{m}h_{im}v_i$，要求$\tilde{v}_{m+1}\perp v_i \quad (i=1,2,\cdots,m)$.

由$(\tilde{v}_{m+1},v_i)=0$ 得，$h_{im}=(Av_m,v_i) \quad (i=1,2,\cdots,m)$.

记$h_{m+1,m}=\|\tilde{v}_{m+1}\|$，当$h_{m+1,m}\neq 0$ 时，令$v_{m+1}=\frac{\tilde{v}_{m+1}}{\|\tilde{v}_{m+1}\|}=\frac{\tilde{v}_{m+1}}{h_{m+1,m}}$.

当$h_{m+1,m}=0$时，则令$v_{m+1}=0$.

Theorem

设$m<n$，向量组$r^{(0)},Ar^{(0)},A^2r^{(0)},\cdots,A^{m-1}r^{(0)}$线性无关，则由阿诺尔德过程产生的向量组$\{v_i\}_{i=1}^m$是克雷洛夫子空间$K_m$的一组标准正交基，且有

$$v_{m+1}\perp K_m=Span\{r^{(0)},Ar^{(0)},A^2r^{(0)},\cdots,A^{m-1}r^{(0)}\}.$$

由 $\tilde{v}_{k+1} = Av_k - \sum\limits_{i=1}^{k} h_{ik} v_i \quad (k = 1, 2, \cdots, m)$
及 $v_{k+1} = \tilde{v}_{k+1}/h_{k+1,k}$，得

$$Av_k = \sum_{i=1}^{k+1} h_{ik} v_i, \quad k = 1, 2, \cdots, m.$$

即

$$\begin{aligned}
Av_1 &= h_{11} v_1 + h_{21} v_2, \\
Av_2 &= h_{12} v_1 + h_{22} v_2 + h_{32} v_3, \\
&\cdots\cdots\cdots \\
Av_m &= h_{1m} v_1 + h_{2m} v_2 + \cdots + h_{mm} v_m + h_{m+1,m} v_{m+1}.
\end{aligned}$$

阿诺尔德过程的矩阵表示

则有

$$AV_m = V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T,$$

矩阵

$$H_m = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1,m-1} & h_{1m} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2,m-1} & h_{2m} \\ & h_{32} & \cdots & h_{3,m-1} & h_{3m} \\ & & \ddots & \cdots & \cdots \\ & & & h_{m,m-1} & h_{mm} \end{pmatrix},$$

其中$e_m = (0, 0, \cdots, 1)^T \in R^m$. 像$H$这样的下次对角线下方元素全是零的矩阵称为**上海森伯格（Hessenberg）矩阵**.

阿诺尔德算法

阿诺尔德算法是给定适当的初始点$x^{(0)}$和正整数m, 使得向量组

$$r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$$

线性无关, 取子空间$L_m = K_m = Span\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\}$, 由阿诺尔德过程构造子空间$Span\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\}$ 的一组标准正交基$\{v_i\}_{i=1}^{m}$, 利用伽辽金原理建立起来的求方程组的一种方法.

阿诺尔德算法

阿诺尔德算法是给定适当的初始点$x^{(0)}$和正整数m, 使得向量组

$$r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$$

线性无关, 取子空间$L_m = K_m = Span\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\}$,
由阿诺尔德过程构造子空
间$Span\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\}$ 的一组标准正交
基$\{v_i\}_{i=1}^m$, 利用伽辽金原理建立起来的求方程组的一种方法.
由$L_m = K_m$ 知矩阵$W_m = V_m$.
在$AV_m = V_mH_m + h_{m+1,m}v_{m+1}e_m^T$两端左乘矩阵$V_m^T$, 并注意
到$V_m^TV_m = I$ 及v_{m+1} 与V_m 的列向量正交, 则得

$$V_m^TAV_m = H_m.$$

又

$$V_m^T r^{(0)} = \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_m^T \end{pmatrix} \left(\|r^{(0)}\| \, v_1\right) = \|r^{(0)}\| e_1 = \beta e_1,$$

其中$\beta = \|r^{(0)}\|$, $e_1 = (1, 0, \cdots, 0)^T \in R^m$.于是在$L_m = K_m$的标准正交基$\{v_i\}_{i=1}^m$下，有

$$H_m y^{(m)} = \beta e_1.$$

如果H_m非奇异，则可解出唯一的$y^{(m)}$，于是便求得了方程组的近似解$z^{(m)} = V_m y^{(m)}$. 如果H_m 奇异，则说算法发生了恶性中断，这正是阿诺尔德算法的缺陷.

对于给定的整数$m > 0$，下面的定理给出了阿诺尔德算法求出的近似解$z^{(m)}$的残向量$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|$的大小.

阿诺尔德算法

Theorem

对于给定的$m > 0$, 设$y^{(m)}$是方程组$H_m y^{(m)} = \beta e_1$的唯一解, $z^{(m)} = V_m y^{(m)}$, 则

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| = h_{m+1,m}|e_m^T y^{(m)}|.$$

Theorem

对于给定的$m > 0$, 设$y^{(m)}$是方程组$H_m y^{(m)} = \beta e_1$的唯一解, $z^{(m)} = V_m y^{(m)}$, 则

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| = h_{m+1,m}|e_m^T y^{(m)}|.$$

证明

原理型阿诺尔德算法

原理型阿诺尔德算法是给定误差限$\epsilon > 0$, 通过不断的增大m, 确定$z^{(m)}$ 使得$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| < \epsilon$. 其计算步骤如下:

（1） 给定误差限$\epsilon > 0$, 初始点$x^{(0)} \in R^n$, 取$m = 1$;

原理型阿诺尔德算法

原理型阿诺尔德算法是给定误差限$\epsilon > 0$, 通过不断的增大m, 确定$z^{(m)}$ 使得$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| < \epsilon$. 其计算步骤如下:

（1） 给定误差限$\epsilon > 0$, 初始点$x^{(0)} \in R^n$, 取$m = 1$;

（2） 计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$;

原理型阿诺尔德算法是给定误差限$\epsilon > 0$, 通过不断的增大m, 确定$z^{(m)}$ 使得$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| < \epsilon$. 其计算步骤如下：

（1） 给定误差限$\epsilon > 0$, 初始点$x^{(0)} \in R^n$, 取$m = 1$;

（2） 计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$;

（3） 由阿诺尔德过程求出$\{v_i\}_{i=1}^m$及v_{m+1}; 若H_m为奇异矩阵, 则算法产生恶性中断, 更换$x^{(0)}$, 转（2）;

若H_m 为非奇异矩阵, 解方程$H_m y = \beta e_1$, 得解$y^{(m)}$,

$z^{(m)} = V_m y^{(m)}$;

原理型阿诺尔德算法

原理型阿诺尔德算法是给定误差限$\epsilon > 0$, 通过不断的增大m, 确定$z^{(m)}$ 使得$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| < \epsilon$. 其计算步骤如下：

（1） 给定误差限$\epsilon > 0$, 初始点$x^{(0)} \in R^n$, 取$m = 1$;

（2） 计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$;

（3） 由阿诺尔德过程求出$\{v_i\}_{i=1}^m$及v_{m+1}; 若H_m为奇异矩阵, 则算法产生恶性中断, 更换$x^{(0)}$, 转（2）；

若H_m 为非奇异矩阵, 解方程$H_m y = \beta e_1$, 得解$y^{(m)}$,

$z^{(m)} = V_m y^{(m)}$;

（4） 若$v_{m+1} = 0$, 则原方程的解为$x^* = x^{(0)} + z^{(m)}$, 停;

当$v_{m+1} \neq 0$时, 若$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| = h_{m+1,m}|e_m^T y^{(m)}| < \epsilon$,

取$x^* \approx x^{(0)} + z^{(m)}$, 停;

若$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| \geq \epsilon$, $\quad m := m + 1$, 转（3）.

循环型阿诺尔德算法

原理型阿诺尔德算法用于求解大型方程组（$n \gg 1$）时，一般需要相当大的m. 从计算过程可以看到m 越大，不仅$z^{(m)}$的计算量越大，而且保存V_m 所占用的存贮量就越大. 这两点使得算法失去了实用价值，为克服这一缺陷，对阿诺尔德算法改进的一个方法是循环型阿诺尔德算法.

循环型阿诺尔德算法

原理型阿诺尔德算法用于求解大型方程组（$n \gg 1$）时，一般需要相当大的m. 从计算过程可以看到m 越大，不仅$z^{(m)}$的计算量越大，而且保存V_m 所占用的存贮量就越大. 这两点使得算法失去了实用价值，为克服这一缺陷，对阿诺尔德算法改进的一个方法是循环型阿诺尔德算法.循环型阿诺尔德算法是固定m，周期性地重新开始的迭代方法. 计算步骤如下：

（1） 给定$m \ll n$，选取$x^{(0)} \in R^n$，计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, k := 0$ ；

（2） 用阿诺尔德算法求出$z^{(m)} = V_m y^{(m)}$，令

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + z^{(m)}.$$

（3） 若$\|b - Ax^{(k+1)}\| < \epsilon$, 则取$x^* \approx x^{(k+1)}$, 停；否则，令$r^{(0)} = b - Ax^{(k+1)}$，$k := k + 1$ ，转（2）.

循环型阿诺尔德算法

在循环型阿诺尔德算法中，由于$m \ll n$，$z^{(m)}$ 的计算量和V_m存储量相对较小.

但是，当$k \geq 1$ 时，如果原理型阿诺尔德算法中产生恶性中断，则前面所有计算完全作废，须另取$x^{(0)}$重新计算.

阿诺尔德算法存在两个问题：

其一，事先无法知道什么时候会发生恶性中断；

其二，对于一般矩阵而言，它的收敛性目前尚未证明.
尽管如此，大量的数值计算表明循环型阿诺尔德算法确实有效，它的收敛速度有时会超过共轭梯度法.

若用阿诺尔德算法求解系数矩阵A是对称矩阵的线性方程组，则由$V_m^T A V_m = H_m$ 知H_m 是对称矩阵，这时阿诺尔德算法就简化为**对称兰乔斯算法（Symmetric Lanczos Algorithm）**. 再由H_m是上海森伯格矩阵知H_m 是对称的三对角矩阵

$$H_m = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & & & \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & h_{m-1,m-2} & h_{m-1,m-1} & h_{m-1,m} \\ & & & h_{m,m-1} & h_{mm} \end{pmatrix}.$$

注意到 $h_{jk} = h_{kj}$，记$\alpha_k = h_{kk}$，$\beta_k = h_{k,k-1} = h_{k-1,k}$，

对称兰乔斯(Lanczos)算法

用T_m 表示H_m，则有

$$T_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{m-1} & \alpha_{m-1} & \beta_m \\ & & & \beta_m & \alpha_m \end{pmatrix}.$$

对称兰乔斯(Lanczos)算法

用T_m 表示H_m，则有

$$T_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{m-1} & \alpha_{m-1} & \beta_m \\ & & & \beta_m & \alpha_m \end{pmatrix}.$$

这时阿诺尔德过程

$$Av_k = \sum_{i=1}^{k+1} h_{ik} v_i, \quad k = 1, 2, \cdots, m.$$

可以简化为三项递推公式：

$$\beta_1 = 0,$$
$$\beta_{k+1} v_{k+1} = Av_k - \alpha_k v_k - \beta_k v_{k-1}, \quad k = 1, 2, \cdots, m.$$

对称兰乔斯(Lanczos)算法

阿诺尔德算法简化为对称兰乔斯算法. 其计算步骤如下:

(1) 给定误差限$\epsilon > 0$, 初始点$x^{(0)} \in R^n$;

阿诺尔德算法简化为对称兰乔斯算法. 其计算步骤如下:

(1) 给定误差限$\epsilon > 0$, 初始点$x^{(0)} \in R^n$;

(2) 计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r^{(0)}\|$, $v_1 = r^{(0)}/\beta$;

对称兰乔斯(Lanczos)算法

阿诺尔德算法简化为对称兰乔斯算法. 其计算步骤如下：

(1) 给定误差限$\epsilon > 0$, 初始点$x^{(0)} \in R^n$;

(2) 计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r^{(0)}\|$, $v_1 = r^{(0)}/\beta$;

(3) *for* $m = 1$ *to* n *do*

$\beta_1 := 0$

for $k = 1$ *to* m *do*

$\alpha_k := (Av_k, v_k)$

$\tilde{v}_{k+1} := Av_k - \alpha_k v_k - \beta_k v_{k-1}$

$\beta_{k+1} := \|\tilde{v}_{k+1}\|$, 如果 $\beta_{k+1} = 0$, 则 $m := k$, 转（4）

否则 $v_{k+1} := \tilde{v}_{k+1}/\beta_{k+1}$

end do

如果$T_m = Tridiag(\beta_i, \alpha_i, \beta_{i+1})$为奇异矩阵，更换$x^{(0)}$, 转（2）；
否则，转（4）；

阿诺尔德算法简化为对称兰乔斯算法. 其计算步骤如下：

(1) 给定误差限$\epsilon > 0$, 初始点$x^{(0)} \in R^n$;

(2) 计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r^{(0)}\|$, $v_1 = r^{(0)}/\beta$;

(3) *for* $m = 1$ *to* n *do*

$\beta_1 := 0$

for $k = 1$ *to* m *do*

$\alpha_k := (Av_k, v_k)$

$\tilde{v}_{k+1} := Av_k - \alpha_k v_k - \beta_k v_{k-1}$

$\beta_{k+1} := \|\tilde{v}_{k+1}\|$, 如果 $\beta_{k+1} = 0$, 则 $m := k$, 转（4）

否则 $v_{k+1} := \tilde{v}_{k+1}/\beta_{k+1}$

end do

如果$T_m = Tridiag(\beta_i, \alpha_i, \beta_{i+1})$为奇异矩阵, 更换$x^{(0)}$, 转（2）；

否则, 转（4）；

(4) 用追赶法解三对角方程组$T_m y = \beta e_1$, 得解$y^{(m)}$,

计算$z^{(m)} = V_m y^{(m)}$;

对称兰乔斯(Lanczos)算法

阿诺尔德算法简化为对称兰乔斯算法. 其计算步骤如下：

(1) 给定误差限$\epsilon > 0$, 初始点$x^{(0)} \in R^n$;

(2) 计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r^{(0)}\|$, $v_1 = r^{(0)}/\beta$;

(3) *for* $m = 1$ *to* n *do*

$\beta_1 := 0$

for $k = 1$ *to* m *do*

$\alpha_k := (Av_k, v_k)$

$\tilde{v}_{k+1} := Av_k - \alpha_k v_k - \beta_k v_{k-1}$

$\beta_{k+1} := \|\tilde{v}_{k+1}\|$, 如果 $\beta_{k+1} = 0$, 则 $m := k$, 转（4）

否则 $v_{k+1} := \tilde{v}_{k+1}/\beta_{k+1}$

end do

如果$T_m = Tridiag(\beta_i, \alpha_i, \beta_{i+1})$为奇异矩阵，更换$x^{(0)}$, 转（2）；否则，转（4）；

(4) 用追赶法解三对角方程组$T_m y = \beta e_1$，得解$y^{(m)}$，计算$z^{(m)} = V_m y^{(m)}$;

(5) 如果$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| < \epsilon$, 取$x^* = x^{(0)} + z^{(m)}$, 停；否则*end do*

广义极小残余算法

广义极小残余算法(Generalized Minimal RESidual algorithm， 缩写为 GMRES)是基于伽辽金原理建立的一个有效算法，它是当前求解大型非对称（稀疏）线性方程组的主要方法.

选取正整数m，$x^{(0)} \in R^n$ 使得$r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 线性无关.
由于矩阵A 非奇异，故$Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^m r^{(0)}$ 也线性无关.

广义极小残余算法(Generalized Minimal RESidual algorithm, 缩写为 GMRES)是基于伽辽金原理建立的一个有效算法，它是当前求解大型非对称（稀疏）线性方程组的主要方法.

选取正整数m，$x^{(0)} \in R^n$ 使得$r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 线性无关. 由于矩阵A 非奇异，故$Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^mr^{(0)}$ 也线性无关. 取

$$K_m = Span\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\},$$

$$L_m = Span\{Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^mr^{(0)}\}.$$

简记$L_m = AK_m$. 利用伽辽金原理求方程组的近似解$z^{(m)}$，即取$z^{(m)} \in K_m$ 使得$(r^{(0)} - Az^{(m)}) \perp L_m$.

Theorem

对于给定的$x^{(0)} \in R^n$ 和固定的正整数m, $z^{(m)} \in K_m$ 使得$(r^{(0)} - Az^{(m)}) \perp L_m$ 的充分必要条件是

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| = \min_{z \in K_m} \|r^{(0)} - Az\|.$$

Theorem

对于给定的$x^{(0)} \in R^n$ 和固定的正整数m, $z^{(m)} \in K_m$ 使得$(r^{(0)} - Az^{(m)}) \perp L_m$ 的充分必要条件是

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| = \min_{z \in K_m} \|r^{(0)} - Az\|.$$

证明　必要性　设$z^{(m)} \in K_m$ 使得$(r^{(0)} - Az^{(m)}) \perp L_m$ ，则对任意的$z \in K_m$ 有

$$\begin{aligned}\|r^{(0)} - Az\|^2 &= \|(r^{(0)} - Az^{(m)}) - A(z - z^{(m)})\|^2 \\ &= \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|^2 - 2\big(r^{(0)} - Az^{(m)}, A(z - z^{(m)})\big) \\ &\quad + \|A(z - z^{(m)})\|^2.\end{aligned}$$

广义极小残余算法

由$z^{(m)}, z \in K_m$ 知$z - z^{(m)} \in K_m$, $A(z - z^{(m)}) \in AK_m = L_m$. 又由$(r^{(0)} - Az^{(m)}) \perp L_m$ 知$\left(r^{(0)} - Az^{(m)}, A(z - z^{(m)})\right) = 0$.

$$\|r^{(0)} - Az\|^2 = \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|^2 + \|A(z - z^{(m)})\|^2 \geq \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|^2.$$

由$z^{(m)}, z \in K_m$ 知$z - z^{(m)} \in K_m$, $A(z - z^{(m)}) \in AK_m = L_m$. 又由$(r^{(0)} - Az^{(m)}) \perp L_m$ 知$\left(r^{(0)} - Az^{(m)}, A(z - z^{(m)})\right) = 0$.

$$\|r^{(0)} - Az\|^2 = \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|^2 + \|A(z - z^{(m)})\|^2 \geq \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|^2.$$

充分性　若$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| = \min\limits_{z \in K_m} \|r^{(0)} - Az\|$, 则对任意的$v \in K_m, \alpha \in R$ 都有

$$\|r^{(0)} - A(z^{(m)} + \alpha v)\|^2 \geq \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|^2.$$

记

$$\begin{aligned} q(\alpha) = \|r^{(0)} - A(z^{(m)} + \alpha v)\|^2 &= \|(r^{(0)} - Az^{(m)}) - \alpha Av\|^2 \\ = \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|^2 - 2\alpha(r^{(0)} - &Az^{(m)}, Av) + \alpha^2\|Av\|^2. \end{aligned}$$

显然，当$\alpha = 0$ 时$q(\alpha)$ 达到最小值$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|^2$.

令$q'(\alpha)=0$, 得

$$\alpha=\frac{(r^{(0)}-Az^{(m)},Av)}{\|Av\|^2}.$$

由$\alpha=0$ 知$(r^{(0)}-Az^{(m)},Av)=0$. 再由$v\in K_m$ 的任意性

及$Av\in L_m$.故得$(r^{(0)}-Az^{(m)})\perp L_m$.

广义极小残余算法

令$q'(\alpha)=0$, 得

$$\alpha=\frac{(r^{(0)}-Az^{(m)},Av)}{\|Av\|^2}.$$

由$\alpha=0$ 知$(r^{(0)}-Az^{(m)},Av)=0$. 再由$v\in K_m$ 的任意性及$Av\in L_m$.故得$(r^{(0)}-Az^{(m)})\perp L_m$.

定理表明求$z^{(m)}$ 等价于在K_m 中极小化残向量$r^{(0)}-Az$ 的2-范数，它给出了求$z^{(m)}$ 一个的方法，命名为广义极小残余算法.

令$q'(\alpha)=0$, 得
$$\alpha=\frac{(r^{(0)}-Az^{(m)},Av)}{\|Av\|^2}.$$
由$\alpha=0$ 知$(r^{(0)}-Az^{(m)},Av)=0$. 再由$v\in K_m$ 的任意性及$Av\in L_m$.故得$(r^{(0)}-Az^{(m)})\perp L_m$.

定理表明求$z^{(m)}$ 等价于在K_m 中极小化残向量$r^{(0)}-Az$ 的2-范数，它给出了求$z^{(m)}$ 一个的方法，命名为**广义极小残余算法**.

首先利用阿诺尔德过程建立K_m 中一组标准正交基$\{v_i\}_{i=1}^m$ 及v_{m+1} ，记矩阵
$$\bar{H}_m=\begin{pmatrix} H_m \\ h_{m+1,m}e_m^T \end{pmatrix},$$
其中$e_m=(0,\cdots,0,1)^T\in R^m$.

则

$$AV_m = V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T = (V_m, v_{m+1}) \begin{pmatrix} H_m \\ h_{m+1,m} e_m^T \end{pmatrix} = V_{m+1} \bar{H}$$

其中矩阵$V_{m+1} = (V_m, v_{m+1})$.

则

$$AV_m = V_mH_m + h_{m+1,m}v_{m+1}e_m^T = (V_m, v_{m+1})\begin{pmatrix} H_m \\ h_{m+1,m}e_m^T \end{pmatrix} = V_{m+1}\bar{H}$$

其中矩阵$V_{m+1} = (V_m, v_{m+1})$.

设$z \in K_m$ ，则存在唯一的$y \in R^m$，使$z = V_m y$.

1) 当$v_{m+1} \neq 0$时，注意到$V_{m+1}^T V_{m+1} = I$. 因此

$$\|r^{(0)} - Az\| = \|r^{(0)} - AV_m y\| = \|r^{(0)} - V_{m+1}\bar{H}_m y\|$$
$$= \|V_{m+1}(\beta\bar{e}_1 - \bar{H}_m y)\| = \|\beta\bar{e}_1 - \bar{H}_m y\|,$$

其中$\bar{e}_1 = (1, 0, \cdots, 0)^T \in R^{m+1}$.

2) 当 $v_{m+1} = 0$ 时，$h_{m+1,m} = 0$ ，$AV_m = V_m H_m$ ，且有

$$\begin{aligned}&\|r^{(0)} - Az\| = \|r^{(0)} - AV_m y\| = \|r^{(0)} - V_m H_m y\| \\ &= \|V_m(\beta e_1 - H_m y)\| = \|\beta e_1 - H_m y\| = \|\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m y\|,\end{aligned}$$

其中 $e_1 = (1, 0, \cdots, 0)^T \in R^m$. 由以上讨论可得

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| = \min_{z \in K_m} \|r^{(0)} - Az\| = \min_{y \in R^m} \|\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m y\|.$$

2) 当 $v_{m+1}=0$ 时，$h_{m+1,m}=0$ ，$AV_m=V_mH_m$ ，且有

$$\begin{aligned}&\|r^{(0)}-Az\|=\|r^{(0)}-AV_my\|=\|r^{(0)}-V_mH_my\|\\&=\|V_m(\beta e_1-H_my)\|=\|\beta e_1-H_my\|=\|\beta\bar{e}_1-\bar{H}_my\|,\end{aligned}$$

其中 $e_1=(1,0,\cdots,0)^T\in R^m$. 由以上讨论可得

$$\|r^{(0)}-Az^{(m)}\|=\min_{z\in K_m}\|r^{(0)}-Az\|=\min_{y\in R^m}\|\beta\bar{e}_1-\bar{H}_my\|.$$

于是，将求解 $\min\limits_{z\in K_m}\|r^{(0)}-Az\|$ 的问题转化为求解一个与之等价的最小二乘问题：

$$\min_{y\in R^m}\|\beta e_1-\bar{H}_my\|\ (e_1\in R^{m+1}).$$

显然，它的理论解为 $y^{(m)}=\beta(\bar{H}_m^T\bar{H}_m)^{-1}\bar{H}_m^Te_1$. 由此可知GMRES算法不会发生恶性中断现象.

1. 原理型GMRES算法

原理型GMRES算法是通过不断的增大m来确定$z^{(m)}$, 使得$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| < \epsilon$. 其计算步骤如下：

（1）给定误差限$\epsilon > 0$，初始点$x^{(0)} \in R^n$ ，取$m = 1$ ；

1. 原理型GMRES算法

原理型GMRES算法是通过不断的增大m来确定$z^{(m)}$, 使得$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| < \epsilon$. 其计算步骤如下:

（1）给定误差限$\epsilon > 0$，初始点$x^{(0)} \in R^n$ ，取$m = 1$ ；

（2）计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r^{(0)}\|$ ；

1. 原理型GMRES算法

原理型GMRES算法是通过不断的增大m来确定$z^{(m)}$, 使得$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| < \epsilon$. 其计算步骤如下:

（1）给定误差限$\epsilon > 0$，初始点$x^{(0)} \in R^n$ ，取$m = 1$ ；

（2）计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r^{(0)}\|$ ；

（3）由阿诺尔德过程求出$\{v_i\}_{i=1}^m$，v_{m+1} 及$\bar{H}_m$;

1. 原理型GMRES算法

原理型GMRES算法是通过不断的增大m来确定$z^{(m)}$, 使得$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| < \epsilon$. 其计算步骤如下：

（1）给定误差限$\epsilon > 0$，初始点$x^{(0)} \in R^n$，取$m = 1$；

（2）计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r^{(0)}\|$；

（3）由阿诺尔德过程求出$\{v_i\}_{i=1}^m$，v_{m+1} 及$\bar{H}_m$;

（4）求解最小二乘问题 $\min\limits_{y \in R^m} \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|$（其中$e_1 \in R^{m+1}$），设其解为$y^{(m)}$.

1. 原理型GMRES算法

原理型GMRES算法是通过不断的增大m来确定$z^{(m)}$, 使得$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| < \epsilon$. 其计算步骤如下：

（1）给定误差限$\epsilon > 0$，初始点$x^{(0)} \in R^n$ ，取$m = 1$ ；

（2）计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$，$\beta = \|r^{(0)}\|$ ；

（3）由阿诺尔德过程求出$\{v_i\}_{i=1}^{m}$，v_{m+1} 及$\bar{H}_m$;

（4）求解最小二乘问题 $\min\limits_{y \in R^m} \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|$ （其中$e_1 \in R^{m+1}$），设其解为$y^{(m)}$.

（5）计算$z^{(m)} = V_m y^{(m)}$ ，若$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| < \epsilon$ ，取$x^* \approx x^{(0)} + z^{(m)}$，停；
若$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\| \geq \epsilon$，$m := m + 1$ ，转（3）.

理论上，当$m = n$ 时，由$(r^{(0)} - Az^{(n)}) \perp L_n$，可知$r^{(0)} - Az^{(n)} = 0$，即原理型GMRES算法求出的$z^{(n)}$ 是方程组(**??**)的准确解z^* .

由此可得方程组的准确解$x^* = x^{(0)} + z^* = x^{(0)} + z^{(n)}$.

然而，对于$n \gg 1$的大型方程组，当m 很大时，V_m 的存贮量和$z^{(m)}$ 的计算量都很大，这使算法失去了实用价值.

为使*GMRES*算法实用，对其改进，得到下述循环型*GMRES*算法.

循环型$GMRES$算法

（1）给定误差限$\epsilon > 0$, 选取适当的$m(m \ll n)$ 及初始点$x^{(0)} \in R^n$;

广义极小残余算法

循环型$GMRES$算法

（1）给定误差限$\epsilon > 0$, 选取适当的$m(m \ll n)$ 及初始点$x^{(0)} \in R^n$;

（2）计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, \beta = \|r^{(0)}\|$;

循环型*GMRES*算法

（1）给定误差限$\epsilon > 0$, 选取适当的$m(m \ll n)$ 及初始点$x^{(0)} \in R^n$;

（2）计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, \beta = \|r^{(0)}\|$;

（3）由阿诺尔德过程求出$\{v_i\}_{i=1}^{m}$，v_{m+1} 及$\bar{H}_m$;

循环型*GMRES*算法

（1）给定误差限$\epsilon > 0$, 选取适当的$m(m \ll n)$ 及初始点$x^{(0)} \in R^n$;

（2）计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, \beta = \|r^{(0)}\|$;

（3）由阿诺尔德过程求出$\{v_i\}_{i=1}^m$，v_{m+1} 及$\bar{H}_m$;

（4）求解$\min\limits_{y \in R^m} \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|$（其中$e_1 \in R^{m+1}$），设其解为$y^{(m)}$;

循环型$GMRES$算法

（1）给定误差限$\epsilon > 0$, 选取适当的$m(m \ll n)$ 及初始点$x^{(0)} \in R^n$;

（2）计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, \beta = \|r^{(0)}\|$;

（3）由阿诺尔德过程求出$\{v_i\}_{i=1}^m$，v_{m+1} 及$\bar{H}_m$;

（4）求解$\min\limits_{y \in R^m} \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|$（其中$e_1 \in R^{m+1}$），设其解为$y^{(m)}$;

（5）计算$z^{(m)} = V_m y^{(m)}$, 令$x^{(m)} = x^{(0)} + z^{(m)}$;

循环型$GMRES$算法

（1）给定误差限$\epsilon > 0$, 选取适当的$m(m \ll n)$ 及初始点$x^{(0)} \in R^n$;

（2）计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, \beta = \|r^{(0)}\|$;

（3）由阿诺尔德过程求出$\{v_i\}_{i=1}^{m}$，v_{m+1} 及$\bar{H}_m$;

（4）求解$\min\limits_{y \in R^m} \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|$（其中$e_1 \in R^{m+1}$），设其解为$y^{(m)}$;

（5）计算$z^{(m)} = V_m y^{(m)}$, 令$x^{(m)} = x^{(0)} + z^{(m)}$;

（6）令$r^{(m)} = b - Ax^{(m)}$;

循环型*GMRES*算法

（1）给定误差限$\epsilon > 0$, 选取适当的$m(m \ll n)$ 及初始点$x^{(0)} \in R^n$;

（2）计算$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, \beta = \|r^{(0)}\|$;

（3）由阿诺尔德过程求出$\{v_i\}_{i=1}^m$，v_{m+1} 及$\bar{H}_m$;

（4）求解$\min\limits_{y \in R^m} \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|$（其中$e_1 \in R^{m+1}$ ），设其解为$y^{(m)}$;

（5）计算$z^{(m)} = V_m y^{(m)}$, 令$x^{(m)} = x^{(0)} + z^{(m)}$;

（6）令$r^{(m)} = b - Ax^{(m)}$;

（7）若$\|r^{(m)}\| < \epsilon$, 取$x^* \approx x^{(m)}$, 停；
否则，$x^{(0)} := x^{(m)}$，$r^{(0)} := r^{(m)}$，$\beta = \|r^{(0)}\|$ 转（3）.

Theorem

设线性方程组$Ax = b$ 的系数矩阵A 是对称正定矩阵，则对于任意的整数$m \geq 1$ 和任意的初始点$x^{(0)}$, $GMRES(m)$ 算法收敛.

Theorem

设线性方程组$Ax = b$ 的系数矩阵A 是对称正定矩阵，则对于任意的整数$m \geq 1$ 和任意的初始点$x^{(0)}$, $GMRES(m)$ 算法收敛.

Theorem

设线性方程组$Ax = b$的系数矩阵A可对角化，即存在非奇异矩阵X，使得$A = X\Lambda X^{-1}$，其中$\Lambda = diag(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$，$\lambda_i$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$是矩阵A的特征值，则当m充分大时，对任意的初始点$x^{(0)}$, $GMRES(m)$ 算法收敛.

3. 最小二乘问题 $\min\limits_{y\in R^m}\|\beta e_1-\bar{H}_m y\|$ 的求解

在 $GMRES(m)$ 算法中，每一次迭代都要解一个最小二乘问题

$$\min_{y\in R^m}\|\beta e_1-\bar{H}_m y\|,\quad (e_1\in R^{m+1}).$$

3.　最小二乘问题 $\min\limits_{y\in R^m}\|\beta e_1-\bar{H}_m y\|$ 的求解

在 $GMRES(m)$ 算法中，每一次迭代都要解一个最小二乘问题

$$\min_{y\in R^m}\|\beta e_1-\bar{H}_m y\|,\quad (e_1\in R^{m+1}).$$

由 $rank(V_m)=m$ 及 A 是可逆矩阵知，$rank(AV_m)=m$. 再由 $AV_m=V_{m+1}\bar{H}_m$ 知，$rank(\bar{H}_m)=m$.

3. 最小二乘问题 $\min\limits_{y\in R^m}\|\beta e_1-\bar{H}_m y\|$ 的求解

在 $GMRES(m)$ 算法中，每一次迭代都要解一个最小二乘问题

$$\min_{y\in R^m}\|\beta e_1-\bar{H}_m y\|,\quad (e_1\in R^{m+1}).$$

由 $rank(V_m)=m$ 及 A 是可逆矩阵知，$rank(AV_m)=m$. 再由 $AV_m=V_{m+1}\bar{H}_m$ 知，$rank(\bar{H}_m)=m$.针对 $\bar{H}_m$ 是 $(m+1)\times m$ 阶上海森伯格矩阵的特征，对矩阵 $\bar{H}_m$ 和向量 βe_1 同时作吉文斯变换，则有

$$P\bar{H}_m=\begin{pmatrix} R\\ 0^T\end{pmatrix},\ P(\beta e_1)=(c_1,\cdots,c_m,c_{m+1})^T,$$

其中 P 是 $m+1$ 阶正交阵，R 是 m 阶可逆的上三角阵.

因此

$$\|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|^2 = \|P(\beta e_1 - \bar{H}_m y)\|^2 = \left\| \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \\ c_{m+1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} R \\ 0^T \end{pmatrix} y \right\|^2$$

$$= \left\| \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix} - Ry \right\|^2 + c_{m+1}^2 .$$

因此

$$\|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|^2 = \|P(\beta e_1 - \bar{H}_m y)\|^2 = \left\| \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \\ c_{m+1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} R \\ 0^T \end{pmatrix} y \right\|^2$$

$$= \left\| \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix} - Ry \right\|^2 + c_{m+1}^2 .$$

由此可知，最小二乘问题 $\min\limits_{y \in R^m} \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|$ 的解$y^{(m)}$ 是上三角方程组

$$Ry = (c_1, c_2, \cdots, c_m)^T$$

的唯一解，且$\|\beta e_1 - \bar{H}_m y^{(m)}\| = |c_{m+1}|$.

广义极小残余算法

由以上讨论，对于$GMRES(m)$算法，则有

$$\|b - Ax^{(m)}\| = \|r^{(0)} - Az^{(m)}\| = \min_{y \in R^m} \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|$$

$$= \|\beta e_1 - \bar{H}_m y^{(m)}\| = |c_{m+1}|.$$

因此，可将其计算过程中的迭代终止准则$\|b - Ax^{(m)}\| < \epsilon$ 改为$|c_{m+1}| < \epsilon$ ，使用更为简便.

小　结

- 迭代法利用了线性方程组系数矩阵具有大量零元素的特点，它具有占用存储空间小，程序简单等优点，是求解大型稀疏线性方程组的有效方法.

小　结

- 迭代法利用了线性方程组系数矩阵具有大量零元素的特点，它具有占用存储空间小，程序简单等优点，是求解大型稀疏线性方程组的有效方法.
- 高斯—赛德尔迭代法比雅可比迭代法收敛的快，最为常用.

小　结

- 迭代法利用了线性方程组系数矩阵具有大量零元素的特点，它具有占用存储空间小，程序简单等优点，是求解大型稀疏线性方程组的有效方法.
- 高斯—赛德尔迭代法比雅可比迭代法收敛的快，最为常用.
- 共轭梯度法计算只涉及矩阵与向量的乘法和向量的内积运算. 在理论上对于n阶线性方程组最多n次迭代就可求得方程组的准确解. 从这点上看，共轭梯度法是一种直接法. 对于良态问题，共轭梯度法所需的迭代次数远小于方程组的阶数n. 共轭梯度法是求解高阶稀疏线性方程组的一个常用有效方法.

基于伽辽金原理的迭代法

- 基于伽辽金原理**克雷洛夫子空间法**. Arnoldi算法和GMRES算法是两个实用有效的具有代表性的克雷洛夫子空间法.

基于伽辽金原理的迭代法

- 基于伽辽金原理**克雷洛夫子空间法**. Arnoldi算法和GMRES算法是两个实用有效的具有代表性的克雷洛夫子空间法.
- **Arnoldi**过程是利用Gram-Schmidt正交化方法, 由向量组$r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 构造克雷洛夫子空间K_m的一组标准正交基的方法.

基于伽辽金原理的迭代法

- 基于伽辽金原理**克雷洛夫子空间法**. Arnoldi算法和GMRES算法是两个实用有效的具有代表性的克雷洛夫子空间法.
- **Arnoldi**过程是利用Gram-Schmidt正交化方法, 由向量组$r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$构造克雷洛夫子空间$K_m$的一组标准正交基的方法.
- 当求解的线性方程组系数矩阵A是对称矩阵时阿诺尔德算法就简化为**对称Lanczos算法**.

基于伽辽金原理的迭代法

- 基于伽辽金原理**克雷洛夫子空间法**. Arnoldi算法和GMRES算法是两个实用有效的具有代表性的克雷洛夫子空间法.
- **Arnoldi**过程是利用Gram-Schmidt正交化方法, 由向量组$r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 构造克雷洛夫子空间K_m的一组标准正交基的方法.
- 当求解的线性方程组系数矩阵A是对称矩阵时阿诺尔德算法就简化为**对称Lanczos算法**.
- **Generalized Minimal Residual algorithm, GMRES**）是当前求解大型非对称（稀疏）线性方程组的主要方法. **原理型GMRES算法** 对原理型$GMRES$算法进行改进, 得到**循环型**$GMRES$**算法**—$GMRES(m)$. 在一定的条件下$GMRES(m)$算法是收敛的.

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

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

要求

1 掌握拉格朗日插值多项式

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

要求

1. 掌握拉格朗日插值多项式
2. 掌握差商的定义、牛顿插值多项式

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

要求

1. 掌握拉格朗日插值多项式
2. 掌握差商的定义、牛顿插值多项式
3. 熟练掌握分段低次插值多项式

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

要求

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

插值法

Definition

在区间$[a,b]$上给定$n+1$个互不相同的点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ $(a\le x_0<x_1<\cdots<x_n\le b)$，及其在$x_i$处的函数值$y_i=f(x_i)$ $(i=0,1,\cdots,n)$，构造一个不超过n次数的多项式

$$p_n(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_nx^n\ ,$$

使其满足

$$p_n(x_i)=y_i,\qquad i=0,1,\cdots,n.$$

则$p_n(x)$称为$f(x)$的**插值多项式**，$f(x)$称为**被插函数**，区间$[a,b]$ 称为**插值区间**，点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 称为**插值节点**(插值节点x_i 不一定按大小顺序排列），$R_n(x)=f(x)-p_n(x)$称为**截断误差或插值余项**，求插值多项式的方法称为**插值法**.

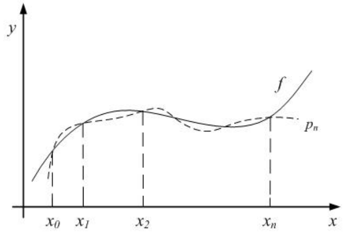
插值法

为计算其他点$x(x \neq x_i)$处的函数值，可用$p_n(x)$的值作为$f(x)$的近似值，称其为**插值**，x称为**插值点**．若插值点位于插值区间内部，则称为**内插**；若插值点位于插值区间外部，但接近插值区间端点，称为**外插或外推**．

插值法

为计算其他点$x(x \neq x_i)$处的函数值，可用$p_n(x)$的值作为$f(x)$的近似值，称其为**插值**，x称为**插值点**．若插值点位于插值区间内部，则称为**内插**；若插值点位于插值区间外部，但接近插值区间端点，称为**外插或外推**．

从几何上看，插值法是求通过给定的$n+1$个点(x_i, y_i) $(i = 0, 1, \cdots, n)$的曲线$y = p_n(x)$，并用它近似已知曲线$y = f(x)$，其几何意义如图所示．



Theorem

在区间$[a, b]$上给定$n+1$个互不相同的点x_i, 则满足插值条件$p_n(x_i) = y_i$, $i = 0, 1, \cdots, n$式的n次插值多项式$p_n(x)$存在且唯一.

插值法

Theorem

在区间$[a,b]$上给定$n+1$个互不相同的点x_i, 则满足插值条件$p_n(x_i)=y_i$, $i=0,1,\cdots,n$式的n次插值多项式$p_n(x)$存在且唯一.

证明　设$p_n(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_nx^n$. 由插值条件得

$$\left\{\begin{array}{ccccccccccc} a_0 & + & a_1x_0 & + & a_2x_0^2 & + & \cdots & + & a_nx_0^n & = & y_0, \\ a_0 & + & a_1x_1 & + & a_2x_1^2 & + & \cdots & + & a_nx_1^n & = & y_1, \\ \multicolumn{11}{c}{\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots} \\ a_0 & + & a_1x_n & + & a_2x_n^2 & + & \cdots & + & a_nx_n^n & = & y_n. \end{array}\right.$$

由于插值节点$x_i\,(i=0,1,\cdots,n)$互异, 它的系数矩阵行列式

$$\left|\begin{array}{ccccc} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{array}\right| = \prod_{0\le j<i\le n}(x_i-x_j)\neq 0.$$

Theorem

截断误差估计式 设$f^{(n)}(x)$在区间$[a,b]$上连续，$f^{(n+1)}(x)$在(a,b)内存在，插值节点$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$，$p_n(x)$是满足插值条件的$n$次插值多项式，则对任意$x \in [a,b]$，存在$\xi = \xi(x) \in (a,b)$，使得

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n).$$

证明 由插值条件知$R_n(x_i)=0, i=0,1,\cdots,n$. 于是对任意$x$,

$$R_n(x)=k(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n).$$

其中$k(x)$是与x有关的待定函数。

证明 由插值条件知$R_n(x_i)=0, i=0,1,\cdots,n.$ 于是对任意x,

$$R_n(x)=k(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n).$$

其中$k(x)$是与x有关的待定函数。

作辅助函数

$$\phi(t)=R_n(t)-k(x)(t-x_0)(t-x_1)\cdots(t-x_n)$$

显然, $\phi(x_i)=0\ (i=0,1,\cdots,n), \phi(x)=0.$ 即$\phi(x)$在区间$[a,b]$内有$n+2$个零点$x, x_i(i=0,1,\cdots,n).$

插值法

据定理条件可知$\phi^{(n)}(t)$在区间$[a,b]$连续，$\phi^{(n+1)}(t)$在区间(a,b)存在．由罗尔定理知$\phi'(t)$在两个零点之间至少有一个零点．于是在$\phi'(t)$在区间$[a,b]$内至少有$n+1$个零点，$\phi''(t)$在$[a,b]$内至少有n个零点．反复应用罗尔定理可知，$\phi^{(n+1)}(t)$在(a,b)内至少存在一个零点$\xi\in(a,b)$，使得$\phi^{(n+1)}(\xi)=0$．即

$$\begin{aligned}
\phi^{(n+1)}(\xi) &= R_n^{(n+1)}(\xi)-(n+1)!\,k(x)\\
&= f^{(n+1)}(\xi)-p_n^{(n+1)}(\xi)-(n+1)!\,k(x)\\
&= f^{(n+1)}(\xi)-(n+1)!\,k(x)=0.
\end{aligned}$$

由上式得

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

据定理条件可知$\phi^{(n)}(t)$在区间$[a,b]$连续，

$$|R_n(x)| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|x-x_0||x-x_1|\cdots|x-x_n| \ .$$

误差与M_{n+1}（**难估计**）有关，还与节点的选择有关。

插值法

据定理条件可知$\phi^{(n)}(t)$在区间$[a,b]$连续,

$$|R_n(x)| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|x-x_0||x-x_1|\cdots|x-x_n| \ .$$

误差与M_{n+1}（**难估计**）有关，还与节点的选择有关。

实用估计法. 设$p_n(x)$和$\tilde{p}_n(x)$分别是以$x_0,x_1,\cdots,x_n$和$x_1,x_2,\cdots,x_{n+1}$构成的n次插值多项式，则

$$f(x)-p_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n),$$

$$f(x)-\tilde{p}_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\tilde{\xi})}{(n+1)!}(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_{n+1}).$$

插值法

由于构造$p_n(x)$和$\tilde{p}_n(x)$只相差一个插值节点，可以设想$f^{(n+1)}(\xi) \approx f^{(n+1)}(\tilde{\xi})$．以上两式相减得

$$\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n) \approx \frac{\tilde{p}_n(x)-p_n(x)}{x_{n+1}-x_0}.$$

插值法

由于构造$p_n(x)$和$\tilde{p}_n(x)$只相差一个插值节点，可以设想$f^{(n+1)}(\xi) \approx f^{(n+1)}(\tilde{\xi})$. 以上两式相减得

$$\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n) \approx \frac{\tilde{p}_n(x)-p_n(x)}{x_{n+1}-x_0}.$$

从而得到截断误差的实用估计式

$$\begin{cases} f(x)-p_n(x) \approx \frac{\tilde{p}_n(x)-p_n(x)}{x_{n+1}-x_0}(x-x_0), \\ f(x)-\tilde{p}_n(x) \approx \frac{\tilde{p}_n(x)-p_n(x)}{x_{n+1}-x_0}(x-x_{n+1}). \end{cases}$$

拉格朗日插值多项式

给定$n+1$个互不相同的插值节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$和在x_i处的函数值$y_i=f(x_i)$ $(i=0,1,\cdots,n)$，设

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} l_i(x)y_i.$$

其中$l_i(x)$ $(i=1,2,\cdots,n)$是n次多项式，称为**拉格朗日插值基函数**.

$$l_i(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}.$$

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}\frac{\pi_{n+1}(x)}{(x-x_i)\pi'_{n+1}(x_i)}y_i.$$

Lagrange基函数满足

$$l_i(x_j) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & j \neq i \end{cases}$$

由上式知$x_j, j = 0, 1, \cdot, i-1, i+1, \cdot, n$是$l_i(x)$的零点，故

$$l_i(x) = c_i(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\cdots(x - x_n)$$

再由$l_i(x_i) = 1$得$c_i = \frac{1}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\cdots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_n)}$ 故

$$l_i(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\cdots(x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\cdots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_n)}.$$

拉格朗日插值多项式的误差

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n).$$

拉格朗日插值多项式的误差

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n).$$

$n=1$时，$L_1(x)$为过$(x_0, y_0), (x_1, y_1)$的直线

$$L_1(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0 + \frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1$$

y_0与y_1的线性组合，组合系数为一次式。

$$R_1(x) = \frac{1}{2}f''(\xi)(x-x_0)(x-x_1)$$

拉格朗日插值多项式

拉格朗日插值多项式的误差

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n).$$

$n=1$时，$L_1(x)$为过$(x_0, y_0), (x_1, y_1)$的直线

$$L_1(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0 + \frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1$$

y_0与y_1的线性组合，组合系数为一次式。

$$R_1(x) = \frac{1}{2}f''(\xi)(x-x_0)(x-x_1)$$

$n=2$时，$L_2(x)$为过$(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$的抛物插值。

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0))(x_1-x_2}y_1 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}y$$

$$R_2(x) = \frac{1}{6}f'''(\xi)(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$$

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

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

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

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

解

$$L_3(x) = y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) + y_2 l_2(x) + y_3 l_3(x)$$

$$= 3\frac{(x+1)(x-0)(x-1)}{(-2+1)(-2-0)(-2-1)} + 1\frac{(x+2)(x-0)(x-1)}{(-1+2)(-1-0)(-1-1)}$$

$$+1\frac{(x+2)(x+1)(x-1)}{(0+2)(0+1)(0-1)} + 6\frac{(x+2)(x+1)(x-0)}{(1+2)(1+1)(1-0)}$$

$$= \frac{1}{2}x^3 + \frac{5}{2}x^2 + 2x + 1$$

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

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

例 已知$\sin\frac{\pi}{6}=\frac{1}{2}$, $\sin\frac{\pi}{4}=\frac{\sqrt{2}}{2}$, $\sin\frac{\pi}{3}=\frac{\sqrt{3}}{2}$, 求$\sin 50^0$, 估计误差

例 已知$\boxed{\sin\frac{\pi}{6}=\frac{1}{2},\ \sin\frac{\pi}{4}=\frac{\sqrt{2}}{2},\ \sin\frac{\pi}{3}=\frac{\sqrt{3}}{2},}$ 求$\sin 50^0$，估计误差

解

$$\sin\frac{5\pi}{18}\approx L_1(\frac{5\pi}{18})=\cdots\approx 0.7761$$

$$|R_1(\frac{5\pi}{18})|=\frac{1}{2}|(-\sin\xi)(\frac{5\pi}{18}-\frac{\pi}{6})(\frac{5\pi}{18}-\frac{\pi}{4})|\leq 0.0118$$

$$\sin\frac{5\pi}{18}\approx L_1(\frac{5\pi}{18})=\cdots\approx 0.7601$$

$$|R_1(\frac{5\pi}{18})|=\frac{1}{2}|(-\sin\xi)\boxed{(\frac{5\pi}{18}-\frac{\pi}{4})(\frac{5\pi}{18}-\frac{\pi}{3})}\leq 0.006595$$

$$\sin\frac{5\pi}{18}\approx L_2(\frac{5\pi}{18})=\cdots\approx 0.7654$$

牛顿插值多项式-差商的定义

拉格朗日插值多项式的优点：简单易实现；缺点：1)乘除法计算量大；2)当增加一个插值节点时，插值基函数$l_i(x)$随之变化.

拉格朗日插值多项式的优点：简单易实现；缺点：1)乘除法计算量大；2)当增加一个插值节点时，插值基函数$l_i(x)$随之变化.

零阶差商： $f[x_i] = y_i = f(x_i)$;

牛顿插值多项式-差商的定义

拉格朗日插值多项式的优点：简单易实现；缺点：1)乘除法计算量大；2)当增加一个插值节点时，插值基函数$l_i(x)$随之变化.

零阶差商： $f[x_i] = y_i = f(x_i)$;

一阶差商： $f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f[x_{i+1}] - f[x_i]}{x_{i+1} - x_i}$;

牛顿插值多项式-差商的定义

拉格朗日插值多项式的优点：简单易实现；缺点：1)乘除法计算量大；2)当增加一个插值节点时，插值基函数$l_i(x)$随之变化.

零阶差商： $f[x_i] = y_i = f(x_i)$;

一阶差商： $f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f[x_{i+1}]-f[x_i]}{x_{i+1}-x_i}$;

二阶差商： $f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{f[x_{i+1},x_{i+2}]-f[x_i,x_{i+1}]}{x_{i+2}-x_i}$;

拉格朗日插值多项式的优点：简单易实现；缺点：1)乘除法计算量大；2)当增加一个插值节点时，插值基函数$l_i(x)$随之变化.

零阶差商： $f[x_i]=y_i=f(x_i)$;

一阶差商： $f[x_i,x_{i+1}]=\frac{f[x_{i+1}]-f[x_i]}{x_{i+1}-x_i}$;

二阶差商： $f[x_i,x_{i+1},x_{i+2}]=\frac{f[x_{i+1},x_{i+2}]-f[x_i,x_{i+1}]}{x_{i+2}-x_i}$;

... ...

n阶差商 $f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\frac{f[x_1,x_2,\cdots,x_n]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{n-1}]}{x_n-x_0}$.

牛顿插值多项式-差商的定义

拉格朗日插值多项式的优点：简单易实现；缺点：1)乘除法计算量大；2)当增加一个插值节点时，插值基函数$l_i(x)$随之变化.

零阶差商： $f[x_i] = y_i = f(x_i)$;

一阶差商： $f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f[x_{i+1}]-f[x_i]}{x_{i+1}-x_i}$;

二阶差商： $f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{f[x_{i+1},x_{i+2}]-f[x_i,x_{i+1}]}{x_{i+2}-x_i}$;

$\cdots \quad \cdots \quad \cdots$

n阶差商 $f[x_0, x_1, \cdots, x_n] = \frac{f[x_1,x_2,\cdots,x_n]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{n-1}]}{x_n-x_0}$.

计算差商可列成差商表. 以$n=4$为例, 列差商表如下：

x_i	$f[x_i]$	$f[x_i, x_{i+1}]$	$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$	$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$
x_0	$\underline{f[x_0]}$				
x_1	$f[x_1]$	$\underline{f[x_0, x_1]}$			
x_2	$f[x_2]$	$f[x_1, x_2]$	$\underline{f[x_0, x_1, x_2]}$		
x_3	$f[x_3]$	$f[x_2, x_3]$	$f[x_1, x_2, x_3]$	$\underline{f[x_0, x_1, x_2, x_3]}$	
x_4	$f[x_4]$	$f[x_3, x_4]$	$f[x_2, x_3, x_4]$	$f[x_1, x_2, x_3, x_4]$	$\underline{f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]}$

牛顿插值多项式

过平面上两点$(x_0, y_0), (x_1, y_1)$作线性插值,

牛顿插值多项式

过平面上两点$(x_0, y_0), (x_1, y_1)$作线性插值, 则有

$$p_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1 = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0)$$

$$= f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0).$$

上式可以写为$p_1(x) = c_0 + c_1(x - x_0)$.

牛顿插值多项式

过平面上两点$(x_0, y_0), (x_1, y_1)$作线性插值，则有

$$p_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1 = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0)$$

$$= f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0).$$

上式可以写为$p_1(x) = c_0 + c_1(x - x_0)$.
由此设想n次插值多项式$p_n(x)$可以写为

$$N_n(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots +$$
$$+ c_n(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})$$

为使$N_n(x)$是插值多项式，选择系数c_i使它满足插值条件

牛顿插值多项式

$$
\begin{aligned}
y_0 &= N_n(x_0) = c_0, \\
y_1 &= N_n(x_1) = c_0 + c_1(x_1 - x_0), \\
y_2 &= N_n(x_2) = c_0 + c_1(x_2 - x_0) + c_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1),
\end{aligned}
$$

牛顿插值多项式

$$y_0 = N_n(x_0) = c_0,$$

$$y_1 = N_n(x_1) = c_0 + c_1(x_1 - x_0),$$

$$y_2 = N_n(x_2) = c_0 + c_1(x_2 - x_0) + c_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1),$$

$$\Downarrow$$

$$c_0 = y_0 = f(x_0) = f[x_0],$$

牛顿插值多项式

$$
\begin{aligned}
y_0 &= N_n(x_0) = c_0, \\
y_1 &= N_n(x_1) = c_0 + c_1(x_1 - x_0), \\
y_2 &= N_n(x_2) = c_0 + c_1(x_2 - x_0) + c_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1),
\end{aligned}
$$

$\Downarrow$

$$
\begin{aligned}
c_0 &= y_0 = f(x_0) = f[x_0], \\
c_1 &= \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = f[x_0, x_1],
\end{aligned}
$$

牛顿插值多项式

$$
\begin{aligned}
y_0 &= N_n(x_0) = c_0, \\
y_1 &= N_n(x_1) = c_0 + c_1(x_1 - x_0), \\
y_2 &= N_n(x_2) = c_0 + c_1(x_2 - x_0) + c_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1),
\end{aligned}
$$

$$\Downarrow$$

$$
\begin{aligned}
c_0 &= y_0 = f(x_0) = f[x_0], \\
c_1 &= \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = f[x_0, x_1], \\
c_2 &= \frac{y_2 - y_0 - c_1(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{y_2 - y_1 + y_1 - y_0 - c_1(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\
&= \frac{y_2 - y_1 - c_1(x_2 - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - c_1}{x_2 - x_0} = f[x_0, x_1, x_2].
\end{aligned}
$$

牛顿插值多项式

$$y_0 = N_n(x_0) = c_0,$$
$$y_1 = N_n(x_1) = c_0 + c_1(x_1 - x_0),$$
$$y_2 = N_n(x_2) = c_0 + c_1(x_2 - x_0) + c_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1),$$
$$\Downarrow$$
$$c_0 = y_0 = f(x_0) = f[x_0],$$
$$c_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = f[x_0, x_1],$$
$$c_2 = \frac{y_2 - y_0 - c_1(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{y_2 - y_1 + y_1 - y_0 - c_1(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$
$$= \frac{y_2 - y_1 - c_1(x_2 - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - c_1}{x_2 - x_0} = f[x_0, x_1, x_2].$$

同理可得 $c_k = f[x_0, x_1, \cdots, x_k]\ (k = 0, 1, \cdots, n).$

牛顿插值多项式

$$
\begin{aligned}
N_n(x) = f[x_0] &+ f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) \\
&+ \cdots + f[x_0, x_1, \cdots, x_k](x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1}) + \cdots \\
&+ f[x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1}).
\end{aligned}
$$

牛顿插值多项式

$$N_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$
$$+ \cdots + f[x_0, x_1, \cdots, x_k](x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1}) + \cdots$$
$$+ f[x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1}).$$

取x_{n+1}为区间$[a, b]$上不等于x_i $(i = 0, 1, \cdots, n)$的任意一点，以$x_0, x_1, \cdots, x_n, x_{n+1}$为插值节点构造的$n+1$次牛顿插值多项式

$$N_{n+1}(x) = N_n(x) + f[x_0, x_1, \cdots, x_{n+1}](x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n).$$

据插值条件知

$$f(x_{n+1}) = N_{n+1}(x_{n+1})$$
$$= N_n(x_{n+1}) + f[x_0, x_1, \cdots, x_{n+1}](x_{n+1} - x_0)(x_{n+1} - x_1)\cdots(x_{n+1} - x$$

由x_{n+1}的任意性，将上式中的x_{n+1}改为x，则得

$$f(x)=N_n(x)+f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n).$$

误差估计式

$$R_n(x)=f(x)-N_n(x)=f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n).$$

由$N_{n+1}(x)=N_n(x)+f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x_{n+1}]\pi_{n+1}(x)$知，当增加一个插值节点构造$n+1$次牛顿插值多项式$N_{n+1}(x)$时，只需在$n$次牛顿插值多项式$N_n(x)$后加一项$f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x_{n+1}]\pi_{n+1}(x)$即可. 另外，若用秦九韶算法计算多项式，还可减少乘法运算次数，这就克服了拉格朗日插值多项式的缺点.

牛顿插值多项式截断误差的实用估计法

假定　$f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x] \approx f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x_{n+1}]$, 由
$N_{n+1}(x) = N_n(x) + f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x_{n+1}]\pi_{n+1}(x)$，可得截断误差的实用估计式

$$R_n(x) \approx f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}]\pi_{n+1}(x) = N_{n+1}(x) - N_n(x).$$

n次牛顿插值多项式$N_n(x)$的截断误差大约等于$n+1$次牛顿插值多项式的最后一项.

构造牛顿插值多项式只要计算各节点间的各阶差商，首先应列出差商表，然后由差商表写出插值多项式.

例 给定数据如下，求其Newton插值多项式及截断误差估计式.

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

例 给定数据如下，求其Newton插值多项式及截断误差估计式.

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

解　先列差商表

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

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

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

差商的性质

Property

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_n] = \sum_{i=0}^{n} \frac{f(x_i)}{\pi'_{n+1}(x_i)}$$

差商的性质

Property

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\sum_{i=0}^{n}\frac{f(x_i)}{\pi'_{n+1}(x_i)}$$

Property

差商与节点的次序无关, 即对于任意的自然数k,

$$f[x_i,x_{i+1},\cdots,x_{i+k}]=f[x_{i_0},x_{i_1},\cdots,x_{i_k}],$$

其中$i_0,i_1,\cdots,i_k$是$i,i+1,\cdots,i+k$的任意一种排列. 如

$$\begin{aligned}&f[x_0,x_1]=f[x_1,x_0],\\&f[x_0,x_1,x_2]=f[x_0,x_2,x_1]=f[x_1,x_0,x_2]\\&=f[x_1,x_2,x_0]=f[x_2,x_0,x_1]=f[x_2,x_1,x_0].\end{aligned}$$

差商的性质

Property

（差商与导数的关系）

$$f[x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+k}] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!},$$

其中ξ介于$x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+k}$之间.

差商的性质

Property

（差商与导数的关系）

$$f[x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+k}] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!},$$

其中ξ介于$x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+k}$之间.

证明 由插值多项式的唯一性知，拉格朗日插值多项式与牛顿插值多项式的误差项相等，故有

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}.$$

由此知$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$,其中$\xi$介于$x_0, x_1, \cdots, x_k$之间.

差商的性质

Property

$$f[\underbrace{x_i, x_i, \cdots, x_i}_{k+1\text{个}x_i}] = \frac{f^{(k)}(x_i)}{k!}.$$

差商的性质

Property

$$f[\underbrace{x_i, x_i, \cdots, x_i}_{k+1\text{个}x_i}] = \frac{f^{(k)}(x_i)}{k!}.$$

Property

（差商的导数）

$$\frac{\mathrm{d}f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x]}{\mathrm{d}x} = \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!},$$

其中ξ介于$x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x$之间.

证明

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1},x]}{\mathrm{d}x}\\
&=\lim_{x_k\to x}\frac{f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1},x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1},x]}{x_k-x}
\end{aligned}
$$

差商的性质

证明

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x]}{\mathrm{d}x} \\
&= \lim_{x_k \to x} \frac{f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x_k] - f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x]}{x_k - x} \\
&= \lim_{x_k \to x} f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x_k, x]
\end{aligned}
$$

差商的性质

证明

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1},x]}{\mathrm{d}x}\\
&=\lim_{x_k\to x}\frac{f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1},x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1},x]}{x_k-x}\\
&=\lim_{x_k\to x} f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1},x_k,x]\\
&=\lim_{x_k\to x}\frac{f^{(k+1)}(\tilde{\xi})}{(k+1)!}=\frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}.
\end{aligned}
$$

差商的性质

由性质4.3.3和性质4.3.5可得

$$\frac{\mathrm{d}(\frac{f^{(k)}(\tilde{\xi})}{k!})}{\mathrm{d}x} = \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}.$$

差商的性质

由性质4.3.3和性质4.3.5可得

$$\frac{\mathrm{d}(\frac{f^{(k)}(\tilde{\xi})}{k!})}{\mathrm{d}x} = \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}.$$

Property

设$f(x)$是n次多项式，则一阶差商$f[x_0, x]$是x的$n-1$次多项式，二阶差商$f[x_0, x_1, x]$是x 的$n-2$次多项式.
一般地，$k \le n$时$f(x)$的k阶差商$f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x]$是$x$的$n-k$次多项式，当$k > n$时，$k$阶差商$f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x] \equiv 0$.

埃尔米特插值多项式

格朗日插值多项式和牛顿插值多项式, 只要求在插值节点上插值多项式的值等于函数值.

埃尔米特(Hermite) 插值多项式或带导数的插值多项式还要求在某些插值节点上插值多项式的若干阶导数值等于函数的相应阶导数值. 记为$H_n(x)$.

格朗日插值多项式和牛顿插值多项式, 只要求在插值节点上插值多项式的值等于函数值.
埃尔米特(Hermite) 插值多项式或带导数的插值多项式还要求在某些插值节点上插值多项式的若干阶导数值等于函数的相应阶导数值. 记为$H_n(x)$.
两种构造埃尔米特插值多项式的方法: 牛顿型方法和拉格朗日型方法.

埃尔米特插值多项式

格朗日插值多项式和牛顿插值多项式，只要求在插值节点上插值多项式的值等于函数值.

埃尔米特(Hermite) 插值多项式或带导数的插值多项式还要求在某些插值节点上插值多项式的若干阶导数值等于函数的相应阶导数值. 记为$H_n(x)$.

两种构造埃尔米特插值多项式的方法：牛顿型方法和拉格朗日型方法.

1. 方法（牛顿型）：当插值节点x_i处的函数值、各阶导数值$y_i, y_i', y_i'', \cdots, y_i^{(k)}$已知时，把$x_i$视为$k+1$ 重节点，利用差商与导数的关系4.3.6式，由牛顿插值法构造之.

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

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

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

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

解 由4.3.6式知

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

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

所以,

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

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

方法2（拉格朗日型） 下面只讨论含一阶导数的情况.

设已知函数$f(x)$在$n+1$个互异的插值节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 处的函数值和导数值$f(x_i)$、 $f'(x_i)$ $(i=0,1,\cdots,n)$，要求构造一个不超过$2n+1$次的多项式$H_{2n+1}(x)$，使其满足条件：

$$\begin{cases} H_{2n+1}(x_i)=f(x_i), \\ H'_{2n+1}(x_i)=f'(x_i). \end{cases} \qquad i=0,1,\cdots,n.$$

方法2（拉格朗日型） 下面只讨论含一阶导数的情况.

设已知函数$f(x)$在$n+1$个互异的插值节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 处的函数值和导数值$f(x_i)$、 $f'(x_i)$ $(i=0,1,\cdots,n)$，要求构造一个不超过$2n+1$次的多项式$H_{2n+1}(x)$，使其满足条件：

$$\begin{cases} H_{2n+1}(x_i)=f(x_i), \\ H'_{2n+1}(x_i)=f'(x_i). \end{cases} \qquad i=0,1,\cdots,n.$$

仿照拉格朗日插值多项式的构造方法，令

$$H_{2n+1}=\sum_{i=0}^{n}h_i(x)f(x_i)+\sum_{i=0}^{n}\bar{h}_i(x)f'(x_i),$$

其中$h_i(x)$，$\bar{h}_i(x)(i=0,1,\cdots,n)$均是$2n+1$次多项式，称为插值基函数.

插值基函数分别满足条件：

$$h_i(x_j) = \begin{cases} 1, & j = i, \\ 0, & j \neq i. \end{cases} \quad i, j = 0, 1, \cdots, n.$$

$$h_i'(x_j) = 0, \quad i, j = 0, 1, \cdots, n.$$

$$\bar{h}_i(x_j) = 0, \ i, j = 0, 1, \cdots, n.$$

$$\bar{h}_i'(x_j) = \begin{cases} 1, j = i, \\ 0, j \neq i. \end{cases} \quad i, j = 0, 1, \cdots, n.$$

则$H_{2n+1}(x)$满足插值条件(4.4.1)式，$H_{2n+1}(x)$就是所要求的埃尔米特插值多项式.

埃尔米特插值多项式

下面构造$h_i(x)$和$\bar{h}_i(x)$.

先构造$h_i(x)$，由条件(4.4.3)知$x_0, x_1, \cdots, x_{i-1}, x_{i+1}, \cdots, x_n$是$h_i(x)$的二重零点，则$h_i(x)$含有因子

$$(x-x_0)^2(x-x_1)^2\cdots(x-x_{i-1})^2(x-x_{i+1})^2\cdots(x-x_n)^2.$$

下面构造$h_i(x)$和$\bar{h}_i(x)$.

先构造$h_i(x)$，由条件(4.4.3)知$x_0, x_1, \cdots, x_{i-1}, x_{i+1}, \cdots, x_n$是$h_i(x)$的二重零点，则$h_i(x)$含有因子

$$(x-x_0)^2(x-x_1)^2\cdots(x-x_{i-1})^2(x-x_{i+1})^2\cdots(x-x_n)^2.$$

这是$2n$次多项式，因此可设

$$h_i(x) = (ax+b)l_i^2(x),$$

其中$l_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$.

埃尔米特插值多项式

由条件$h_i(x_i)=1,\quad h_i'(x_i)=0$ 得

$$
\begin{aligned}
&(ax_i+b)l_i^2(x_i)=1,\\
&al_i^2(x_i)+2(ax_i+b)l_i(x_i)l_i'(x_i)=0.
\end{aligned}
$$

即

$$
\begin{aligned}
&ax_i+b=1,\\
&a+2(ax_i+b)\sum_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{1}{x_i-x_j}=0.
\end{aligned}
$$

由此解得

$$
a=-2\sum_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{1}{x_i-x_j},\quad b=1+2x_i\sum_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{1}{x_i-x_j}.
$$

埃尔米特插值多项式

将a,b代入(4.4.5)式得

$$h_i(x)=\left[1-2(x-x_i)\sum_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n}\frac{1}{x_i-x_j}\right]l_i^2(x)\ .$$

将a,b代入(4.4.5)式得

$$h_i(x)=\left[1-2(x-x_i)\sum_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n}\frac{1}{x_i-x_j}\right]l_i^2(x)\ .$$

现在构造$\bar{h}_i(x)$，由条件(4.4.4)知x_i是$\bar{h}_i(x)$的一重零点，$x_0,x_1,\cdots,x_{i-1},x_{i+1},\cdots,x_n$是$\bar{h}_i(x)$的二重零点，故$\bar{h}_i(x)=c(x-x_i)l_i^2(x)$. 而 $\bar{h}_i'(x)=c\left[l_i^2(x)+2(x-x_i)l_i(x)l_i'(x)\right]$. 由$\bar{h}_i'(x_i)=1$可得常数$c=1$. 于是

$$\bar{h}_i(x)=(x-x_i)l_i^2(x).$$

得埃尔米特插值多项式

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n}\left[1-2(x-x_i)\sum_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{1}{x_i-x_j}\right]l_i^2(x)f(x_i) + \sum_{i=0}^{n}(x-x_i)l_i^2(x)f'(x_i)$$

得埃尔米特插值多项式

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n}\left[1 - 2(x - x_i)\sum_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{1}{x_i - x_j}\right] l_i^2(x) f(x_i) + \sum_{i=0}^{n}(x - x_i) l_i^2(x) f'(x_i)$$

截断误差估计式

$$\begin{aligned} R_{2n+1}(x) = & \; f(x) - H_{2n+1}(x) \\ = & \; \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}(x - x_0)^2(x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2. \end{aligned}$$

埃尔米特插值多项式

当$n=1$时，有如下的三次埃尔米特插值多项式及其截断误差估计式：

$$
\begin{aligned}
H_3(x) = \quad & \left(1+2\frac{x_0-x}{x_0-x_1}\right)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2 f(x_0) \\
& +\left(1+2\frac{x_1-x}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2 f(x_1) \\
& +(x-x_0)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2 f'(x_0)+(x-x_1)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2 f'(x_1) \\
R_3(x) = \quad & \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_0)^2(x-x_1)^2
\end{aligned}
$$

高次插值多项式的缺陷

从插值多项式的误差估计式

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\pi_{n+1}(x)$$

高次插值多项式的缺陷

从插值多项式的误差估计式

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\pi_{n+1}(x)$$

可以看到，误差与$f^{(n+1)}(x)$及$\pi_{n+1}(x)$有关．随着n的增大，不能保证插值多项式$p_n(x)$充分逼近被插函数$f(x)$.

高次插值多项式的缺陷

从插值多项式的误差估计式

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\pi_{n+1}(x)$$

可以看到，误差与$f^{(n+1)}(x)$及$\pi_{n+1}(x)$有关．随着n的增大，不能保证插值多项式$p_n(x)$充分逼近被插函数$f(x)$.

例： 给定被插函数

$$f(x) = \frac{1}{1+25x^2}, \quad -1 \le x \le 1 \ .$$

在区间$[-1,1]$上等距地取$n+1$个节点$x_i = -1 + i\frac{2}{n}$,
$(i = 0, 1, \cdots, n)$，构造拉格朗日插值多项式$L_n(x)$．例如取$n = 10$,
插值多项式$y = L_{10}(x)$及被插函数$y = f(x)$的图形

高次插值多项式的缺陷

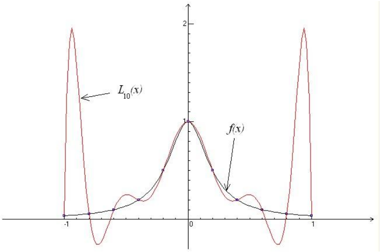


图4.2

由上图可见，在区间$[-0.2, 0.2]$上$L_{10}(x)$逼近$f(x)$的效果较好，但在靠近区间$[-1, 1]$的两端，二者相差甚远．随着插值节点个数的增多，构造的插值多项式的次数越高，这种现象更为严重，

高次插值多项式的缺陷

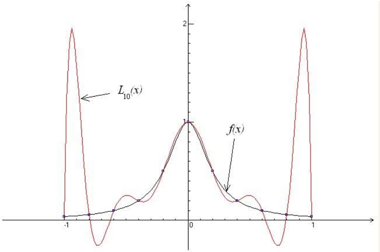


图4.2

由上图可见，在区间$[-0.2, 0.2]$上$L_{10}(x)$逼近$f(x)$的效果较好，但在靠近区间$[-1, 1]$的两端，二者相差甚远. 随着插值节点个数的增多，构造的插值多项式的次数越高，这种现象更为严重，这种现象称为**龙格现象**.

高次插值多项式的缺陷

另一方面，设最大误差限为 ϵ，则拉格朗日插值多项式的计算值 $\tilde{L}_n(x)$ 舍入误差.

$$\left|L_n(x)-\tilde{L}_n(x)\right| = \left|\sum_{i=0}^{n} l_i(x)f(x_i) - \sum_{i=0}^{n} l_i(x)\tilde{f}(x_i)\right|$$
$$\le \sum_{i=0}^{n} \left|l_i(x)\right|\left|f(x_i)-\tilde{f}(x_i)\right| \le \epsilon \sum_{i=0}^{n} \left|l_i(x)\right| .$$

而且很可能接近误差限 $\epsilon\sum_{i=0}^{n}\left|l_i(x)\right|$，当 n 很大时 $\sum_{i=0}^{n}\left|l_i(x)\right| >> 1$，$\tilde{L}_n(x)$ 的误差就可能很大. 也就是说当 n 很大时插值多项式不稳定.

高次插值多项式的缺陷

另一方面，设最大误差限为 ϵ，则拉格朗日插值多项式的计算值$\tilde{L_n}(x)$舍入误差.

$$\begin{aligned} \left|L_n(x)-\tilde{L_n}(x)\right| &= \left|\sum_{i=0}^{n} l_i(x)f(x_i)-\sum_{i=0}^{n} l_i(x)\tilde{f}(x_i)\right| \\ &\le \sum_{i=0}^{n}\left|l_i(x)\right|\left|f(x_i)-\tilde{f}(x_i)\right| \le \epsilon\sum_{i=0}^{n}\left|l_i(x)\right| . \end{aligned}$$

而且很可能接近误差限$\epsilon\sum\limits_{i=0}^{n}\left|l_i(x)\right|$，当$n$很大时$\sum\limits_{i=0}^{n}\left|l_i(x)\right|>>1$，$\tilde{L_n}(x)$的误差就可能很大. 也就是说当$n$很大时插值多项式不稳定. 鉴于以上两个原因，不宜采用高次插值多项式，一般限定插值多项式的次数$n<7$.

分段低次插值法

为了避免高次插值多项式的缺陷，得到$f(x)$的较好近似式，一般采用分段插值法，即把插值区间$[a,b]$分为若干个子区间，在每个子区间上构造低次插值多项式，

设 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b.$

为了避免高次插值多项式的缺陷，得到$f(x)$的较好近似式，一般采用分段插值法，即把插值区间$[a, b]$分为若干个子区间，在每个子区间上构造低次插值多项式，

设 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$.

1. 分段线性插值多项式

在每个子区间$[x_{i-1}, x_i](i = 1, 2, \cdots, n)$上作线性插值. 即取

$$f(x) \approx N_{1,i}(x) = f(x_{i-1}) + f[x_{i-1}, x_i](x - x_{i-1}), x_{i-1} \leq x \leq x_i.$$

分段低次插值法

为了避免高次插值多项式的缺陷，得到$f(x)$的较好近似式，一般采用分段插值法，即把插值区间$[a,b]$分为若干个子区间，在每个子区间上构造低次插值多项式，

设 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$.

1. 分段线性插值多项式

在每个子区间$[x_{i-1}, x_i](i = 1, 2, \cdots, n)$上作线性插值. 即取

$$f(x) \approx N_{1,i}(x) = f(x_{i-1}) + f[x_{i-1}, x_i](x - x_{i-1}), x_{i-1} \le x \le x_i.$$

从几何上看, **分段线性插值**就是用折线来近似曲线 $y = f(x)$. 截断误差

$$R_{1,i} = \frac{f''(\xi_i)}{2!}(x - x_{i-1})(x - x_i),$$

$\xi_i \in (x_{i-1}, x_i)$且与x有关.

分段低次插值法

记$h_i = x_i - x_{i-1} (i = 1, 2, \cdots, n)$, $h = \max\limits_{1 \le i \le n} h_i$,
$M_2 = \max\limits_{a \le x \le b} |f''(x)|$, 则

$$|R_{1,i}(x)| \le \frac{h^2}{8} M_2.$$

记$h_i = x_i - x_{i-1}(i = 1, 2, \cdots, n)$, $h = \max\limits_{1\le i\le n} h_i$,
$M_2 = \max\limits_{a\le x\le b} |f''(x)|$, 则

$$|R_{1,i}(x)| \le \frac{h^2}{8} M_2.$$

2. 分段二次插值多项式

设n为偶数, 在每个子区间$[x_{i-1}, x_{i+1}]$
$(i = 2k-1, k = 1, \cdots, n/2)$上作二次插值, 取

$$N_{2,i}(x) = f(x_{i-1}) + f[x_{i-1}, x_i](x - x_{i-1}) + f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}](x - x_{i-1})(x - x_i),$$

$x_{i-1} \le x \le x_{i+1}$.

记$h_i = x_i - x_{i-1}(i = 1, 2, \cdots, n)$, $h = \max\limits_{1 \le i \le n} h_i$,
$M_2 = \max\limits_{a \le x \le b} |f''(x)|$, 则

$$|R_{1,i}(x)| \le \frac{h^2}{8} M_2.$$

2. 分段二次插值多项式

设n为偶数, 在每个子区间$[x_{i-1}, x_{i+1}]$
$(i = 2k-1, k = 1, \cdots, n/2)$上作二次插值, 取

$$N_{2,i}(x) = f(x_{i-1}) + f[x_{i-1}, x_i](x - x_{i-1}) + f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}](x - x_{i-1})(x - x_i),$$

$$x_{i-1} \le x \le x_{i+1}.$$

分段低次插值法

$$
\begin{aligned}
f(x) \approx L_{2,i}(x) = {} & \frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} f(x_{i-1}) \\
& + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} f(x_i) \\
& + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} f(x_{i+1}), \quad x_{i-1} \le x \le x_{i+1}.
\end{aligned}
$$

$$f(x) \approx L_{2,i}(x) = \frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} f(x_{i-1})$$
$$+\frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} f(x_i)$$
$$+\frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} f(x_{i+1}), \quad x_{i-1} \le x \le x_{i+1}.$$

截断误差

$$R_{2,i}(x) = \frac{f'''(\xi_i)}{3!}(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1}),\ \xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

ξ_i与x有关. 且

$$|R_{2,i}(x)| \le \frac{h^3}{12} M_3,$$

其中$M_3 = \max\limits_{a \le x \le b} |f'''(x)|$.

分段三次Hermite插值多项式 若已知函数$y=f(x)$在节点x_i上的函数值$f(x_i)$与导数值$f'(x_i)$, $(i=0,1,\cdots,n)$可在子区间$[x_{i-1},x_i]$上构造三次插值多项式.

$$H_{3,i}(x)=(1+2\frac{x-x_{i-1}}{h_i})(\frac{x-x_i}{h_i})^2 f(x_{i-1})+(1+2\frac{x_i-x}{h_i})(\frac{x-x_{i-1}}{h_i})^2 f(x_i)$$
$$+(x-x_{i-1})(\frac{x-x_i}{h_i})^2 f'(x_{i-1})+(x-x_i)(\frac{x-x_{i-1}}{h_i})^2 f'(x_i),\quad x_{i-1}\le x\le x_i.$$

分段三次Hermite插值多项式 若已知函数$y=f(x)$在节点x_i上的函数值$f(x_i)$与导数值$f'(x_i)$, $(i=0,1,\cdots,n)$可在子区间$[x_{i-1},x_i]$上构造三次插值多项式.

$$H_{3,i}(x)=(1+2\frac{x-x_{i-1}}{h_i})(\frac{x-x_i}{h_i})^2f(x_{i-1})+(1+2\frac{x_i-x}{h_i})(\frac{x-x_{i-1}}{h_i})^2f(x_i)$$
$$+(x-x_{i-1})(\frac{x-x_i}{h_i})^2f'(x_{i-1})+(x-x_i)(\frac{x-x_{i-1}}{h_i})^2f'(x_i),\quad x_{i-1}\le x\le x_i.$$

$R_{3,i}(x)=\frac{f^{(4)}(\xi_i)}{4!}(x-x_{i-1})^2(x-x_i)^2,\quad \xi_i\in(x_{i-1},x_i)$ 且与x有关. 则

$$|R_{3,i}(x)|\le\frac{h^4}{384}M_4.$$

分段低次插值法

分段三次Hermite插值多项式 若已知函数$y=f(x)$在节点x_i上的函数值$f(x_i)$与导数值$f'(x_i)$, $(i=0,1,\cdots,n)$可在子区间$[x_{i-1},x_i]$上构造三次插值多项式.

$$H_{3,i}(x)=(1+2\frac{x-x_{i-1}}{h_i})(\frac{x-x_i}{h_i})^2 f(x_{i-1})+(1+2\frac{x_i-x}{h_i})(\frac{x-x_{i-1}}{h_i})^2 f(x_i)$$
$$+(x-x_{i-1})(\frac{x-x_i}{h_i})^2 f'(x_{i-1})+(x-x_i)(\frac{x-x_{i-1}}{h_i})^2 f'(x_i),\quad x_{i-1}\le x\le x_i.$$

$R_{3,i}(x)=\frac{f^{(4)}(\xi_i)}{4!}(x-x_{i-1})^2(x-x_i)^2,\quad \xi_i\in(x_{i-1},x_i)$ 且与x有关. 则

$$|R_{3,i}(x)|\le\frac{h^4}{384}M_4.$$

分段插值多项式具有公式简单, 计算量小, 稳定性好, 一致收敛等优点.

三次样条插值函数

分段低次插值多项式，它的一阶或二阶导数不连续，不满足许多实际问题的要求. 样条曲线由分段三次曲线拼接而成，在连接点处二阶导数连续.

分段低次插值多项式，它的一阶或二阶导数不连续，不满足许多实际问题的要求. 样条曲线由分段三次曲线拼接而成，在连接点处二阶导数连续.

Definition

设在区间$[a,b]$上给定$n+1$个节点x_i $(a \le x_0 < \cdots < x_n \le b)$. 在节点$x_i$处的函数值为$y_i = f(x_i)$ $(i = 0, 1, \cdots, n)$. 若函数$S(x)$满足以下三条：

1）在每个子区间$[x_{i-1}, x_i]$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$上$S(x)$ 是三次多项式

2）$S(x_i) = y_i$，$i = 0, 1, \cdots, n$;

3）在区间$[a,b]$上$S(x)$的二阶导函数$S''(x)$连续;

则称$S(x)$为函数$y = f(x)$在区间$[a,b]$上的三次样条插值函数.

$S(x)$是分段三次多项式，故在每个子区间$[x_{i-1}, x_i]\,(i=1,2,\cdots,n)$上，
$S(x)$有4个待定参数；共有n个子区间，所以$S(x)$共有$4n$个待定参数. 根据定义中条件3)知

$$\begin{cases} S_-(x_i) = S_+(x_i), \\ S'_-(x_i) = S'_+(x_i), & \qquad i = 1,2,\cdots,n-1. \\ S''_-(x_i) = S''_+(x_i). \end{cases}$$

上式共有$3n-3$个条件，在加上定义中条件（2）中的$n+1$个条件，共有$4n-2$个条件. 还需要增加两个条件才能确定$4n$个待定参数，即才能确定$S(x)$.

所增加的条件称为边界条件或端点条件. 几种常用的边界条件:

- 已知$f(x)$在区间$[a, b]$的两端点a、b处的二阶导数值$f''(a)$、$f''(b)$;

所增加的条件称为边界条件或端点条件. 几种常用的边界条件:

- 已知$f(x)$在区间$[a,b]$的两端点a、b处的二阶导数值$f''(a)$、$f''(b)$;
- 已知$f(x)$在区间$[a,b]$的两端点a、b处的一阶导数值$f'(a)$、$f'(b)$;

所增加的条件称为边界条件或端点条件. 几种常用的边界条件:

- 已知$f(x)$在区间$[a, b]$的两端点a、b处的二阶导数值$f''(a)$、$f''(b)$;
- 已知$f(x)$在区间$[a, b]$的两端点a、b处的一阶导数值$f'(a)$、$f'(b)$;
- 已知函数$f(x)$是以$T = b - a$为周期的周期函数.

三次样条插值函数的导出

$S(x)$是分段三次多项式；由于$S(x)$的二阶导数连续，设$S(x)$在节点x_i处的二阶导数值$S''(x_i) = M_i \ (i = 0, 1, \cdots, n)$, M_i 是未知的特定参数. 由$S(x)$是分段三次多项式知，$S''(x)$是分段线性函数，

三次样条插值函数的导出

$S(x)$是分段三次多项式；由于$S(x)$的二阶导数连续，设$S(x)$在节点x_i处的二阶导数值$S''(x_i) = M_i \ (i = 0, 1, \cdots, n)$, M_i 是未知的特定参数. 由$S(x)$是分段三次多项式知，$S''(x)$是分段线性函数,$S''(x)$在子区间$[x_{i-1}, x_i]$上可以表示为

$$\begin{aligned} S''(x) &= \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} M_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} M_i \\ &= \frac{x_i - x}{h_i} M_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{h_i} M_i, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i. \end{aligned}$$

其中$h_i = x_i - x_{i-1}$.

三次样条插值函数的导出

$S(x)$是分段三次多项式；由于$S(x)$的二阶导数连续，设$S(x)$在节点x_i处的二阶导数值$S''(x_i) = M_i$ $(i = 0, 1, \cdots, n)$, M_i 是未知的特定参数. 由$S(x)$是分段三次多项式知, $S''(x)$是分段线性函数,$S''(x)$在子区间$[x_{i-1}, x_i]$上可以表示为

$$\begin{aligned} S''(x) &= \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} M_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} M_i \\ &= \frac{x_i - x}{h_i} M_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{h_i} M_i, \quad x_{i-1} \le x \le x_i. \end{aligned}$$

其中$h_i = x_i - x_{i-1}$.对上式两端积分两次得

$$S(x) = \frac{(x_i - x)^3}{6h_i} M_{i-1} + \frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} M_i + b_i(x_i - x) + c_i(x - x_{i-1}),$$

$x_{i-1} \le x \le x_i$.

其中b_i, c_i是积分常数. 现在确定b_i, c_i. 由插值条件$S(x_{i-1}) = y_{i-1}$, $S(x_i) = y_i$, 得

$$\frac{h_i^2}{6} M_{i-1} + b_i h_i = y_{i-1}, \quad \frac{h_i^2}{6} M_i + c_i h_i = y_i \ .$$

由此解得

$$b_i = \left(y_{i-1} - \frac{h_i^2}{6} M_{i-1} \right) / h_i, \quad c_i = \left(y_i - \frac{h_i^2}{6} M_i \right) / h_i \ .$$

将b_i, c_i代入, 则得$S(x)$在子区间$[x_{i-1}, x_i]$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$上的表达式:

$$S(x) = \frac{(x_i - x)^3}{6h_i} M_{i-1} + \frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} M_i + (y_{i-1} - \frac{h_i^2}{6} M_{i-1}) \frac{x_i - x}{h_i}$$
$$+ (y_i - \frac{h_i^2}{6} M_i) \frac{x - x_{i-1}}{h_i}, \quad x_{i-1} \le x \le x_i.$$

求导得

$$S'(x) = -\frac{(x_i - x)^2}{2h_i} M_{i-1} + \frac{(x - x_{i-1})^2}{2h_i} M_i + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - \frac{M_i - M_{i-1}}{6} h_i \qquad x_{i-1} \le x \le x_i \ .$$

三次样条插值函数的导出

求导得

$$S'(x) = -\frac{(x_i - x)^2}{2h_i}M_{i-1} + \frac{(x - x_{i-1})^2}{2h_i}M_i + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - \frac{M_i - M_{i-1}}{6}h_i \qquad x_{i-1} \le x \le x_i \ .$$

在上式中令$x = x_i$得$S(x)$在x_i处的左导数

$$\begin{aligned} S'_-(x_i) &= \frac{h_i}{2}M_i + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - \frac{M_i - M_{i-1}}{6}h_i \\ &= \frac{h_i}{6}M_{i-1} + \frac{h_i}{3}M_i + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \ . \end{aligned}$$

令$x = x_{i-1}$，得$S(x)$在x_{i-1}处的右导数

$$\begin{aligned} S'_+(x_{i-1}) &= -\frac{h_i}{2}M_{i-1} + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - \frac{M_i - M_{i-1}}{6}h_i \\ &= -\frac{h_i}{3}M_{i-1} - \frac{h_i}{6}M_i + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \ . \end{aligned}$$

从而,

$$S'_+(x_i) = -\frac{h_{i+1}}{3}M_i - \frac{h_{i+1}}{6}M_{i+1} + \frac{y_{i+1}-y_i}{h_{i+1}} \ .$$

由$S(x)$在内节点x_i处一阶导数的连续性知

$$S'_-(x_i) = S'_+(x_i), \quad i = 1, 2, \cdots, n-1.$$

即

$$\frac{h_i}{6}M_{i-1} + \frac{h_i + h_{i+1}}{3}M_i + \frac{h_{i+1}}{6}M_{i+1} = \frac{y_{i+1}-y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}, \quad i = 1, 2, \cdots$$

上式两端同乘$\frac{6}{h_i+h_{i+1}}$,得

$$\frac{h_i}{h_i+h_{i+1}}M_{i-1} + 2M_i + \frac{h_{i+1}}{h_i+h_{i+1}}M_{i+1} = \frac{6}{h_i+h_{i+1}}\left[\frac{y_{i+1}-y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}\right]$$

记 $\mu_i = \frac{h_i}{h_i+h_{i+1}}, \quad \lambda_i = \frac{h_{i+1}}{h_i+h_{i+1}} = 1 - \mu_i,$

$$d_i = \frac{6}{h_i + h_{i+1}}\left[\frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}\right] = 6f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}], \quad i = 1, 2, \cdots,$$

关于M_i的方程组可写为

$$\mu_i M_{i-1} + 2M_i + \lambda_i M_{i+1} = d_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n-1.$$

三次样条插值函数的导出

记 $\mu_i = \frac{h_i}{h_i+h_{i+1}}, \quad \lambda_i = \frac{h_{i+1}}{h_i+h_{i+1}} = 1 - \mu_i,$

$$d_i = \frac{6}{h_i + h_{i+1}}\left[\frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}\right] = 6f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}], \quad i = 1, 2, \cdots ,$$

关于M_i的方程组可写为

$$\mu_i M_{i-1} + 2M_i + \lambda_i M_{i+1} = d_i, \quad i = 1, 2, \cdots , n-1.$$

M_i在力学上解释为细梁在x_i截面处的弯矩, 故称为三弯矩方程组. 三弯矩方程组中只有$n-1$个方程, 不能完全确定$n+1$个未知量$M_i(i = 0, 1, \cdots , n)$, 欲解三弯矩方程组或者减少两个未知量, 或者再增加两个方程, 这由边界条件来确定.

1）第一种边界条件： 已知$f''(a), f''(b)$.

取$M_0 = f''(a), M_n = f''(b)$.

三种边界条件的三弯矩方程组

1）第一种边界条件： 已知$f''(a), f''(b)$.

取$M_0 = f''(a), M_n = f''(b)$.

这时三弯矩方程组减少了两个未知量，变成只含$n-1$个未知量$M_i(i = 1, 2, \cdots, n-1)$的$n-1$个方程的方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & \lambda_1 & & & \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ & & & \mu_{n-1} & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 - \mu_1 M_0 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1} - \lambda_{n-1} M_n \end{pmatrix}.$$

若给定$M_0 = M_n = 0$, 则相应的$S(x)$称为自然三次样条插值函数.

2）第二种边界条件： 已知$f'(a)$，$f'(b)$.

记$y_0' = f'(a)$，$y_n' = f'(b)$，则有$S_+'(x_0) = y_0'$， $S_-'(x_n) = y_n'$．得

$$-\frac{h_1}{3}M_0 - \frac{h_1}{6}M_1 + \frac{y_1 - y_0}{h_1} = y_0', \qquad \frac{h_n}{6}M_{n-1} + \frac{h_n}{3}M_n + \frac{y_n - y_{n-1}}{h_n} = y_n'.$$

2）第二种边界条件：　已知$f'(a)$，$f'(b)$.

记$y_0' = f'(a)$，$y_n' = f'(b)$，则有$S_+'(x_0) = y_0'$，　$S_-'(x_n) = y_n'$．得

$$-\frac{h_1}{3}M_0 - \frac{h_1}{6}M_1 + \frac{y_1 - y_0}{h_1} = y_0', \qquad \frac{h_n}{6}M_{n-1} + \frac{h_n}{3}M_n + \frac{y_n - y_{n-1}}{h_n} = y_n'.$$

$$2M_0 + M_1 = d_0, \qquad M_{n-1} + 2M_n = d_n.$$

$$d_0 = \frac{6}{h_1}\left(\frac{y_1 - y_0}{h_1} - y_0'\right) = 6f[x_0, x_0, x_1],$$
$$d_n = \frac{6}{h_n}\left(y_n' - \frac{y_n - y_{n-1}}{h_n}\right) = 6f[x_{n-1}, x_n, x_n].$$

2）第二种边界条件： 已知$f'(a)$，$f'(b)$.

记$y_0' = f'(a)$，$y_n' = f'(b)$，则有$S_+'(x_0) = y_0'$， $S_-'(x_n) = y_n'$．得

$$-\frac{h_1}{3}M_0 - \frac{h_1}{6}M_1 + \frac{y_1 - y_0}{h_1} = y_0', \qquad \frac{h_n}{6}M_{n-1} + \frac{h_n}{3}M_n + \frac{y_n - y_{n-1}}{h_n} = y_n'.$$

$$2M_0 + M_1 = d_0, \qquad M_{n-1} + 2M_n = d_n.$$

$$d_0 = \frac{6}{h_1}\left(\frac{y_1 - y_0}{h_1} - y_0'\right) = 6f[x_0, x_0, x_1],$$

$$d_n = \frac{6}{h_n}\left(y_n' - \frac{y_n - y_{n-1}}{h_n}\right) = 6f[x_{n-1}, x_n, x_n].$$

得到关于第二种边界条件的三弯矩方程组

$$\begin{cases} 2M_0 + M_1 = d_0, \\ \mu_i M_{i-1} + 2M_i + \lambda_i M_{i+1} = d_i \quad, i = 1, 2, \cdots, n-1. \end{cases}$$

用矩阵表示为

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & & & & \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & & \\ & \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ & & & & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_0 \\ M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}.$$

3）第三种边界条件：周期型边界条件.

已知$y=f(x)$是以$T=b-a=x_n-x_0$为周期的周期函数，则由周期性知，$y_n=y_0, y_{n+1}=y_1, M_n=M_0, M_{n+1}=M_1, h_{n+1}=h_1$．这时将点$x_n$看成内节点，则有

$$\lambda_n M_1+\mu_n M_{n-1}+2M_n=d_n,$$

其中

$$\begin{aligned} d_n &= \frac{6}{h_n+h_{n+1}}\left[\frac{y_{n+1}-y_n}{h_{n+1}}-\frac{y_n-y_{n-1}}{h_n}\right] \\ &= \frac{6}{h_n+h_1}\left[\frac{y_1-y_n}{h_1}-\frac{y_n-y_{n-1}}{h_n}\right]. \end{aligned}$$

3）第三种边界条件: 周期型边界条件.

已知$y=f(x)$是以$T=b-a=x_n-x_0$为周期的周期函数，则由周期性知，$y_n=y_0, y_{n+1}=y_1, M_n=M_0, M_{n+1}=M_1, h_{n+1}=h_1$. 这时将点x_n看成内节点，则有

$$\lambda_n M_1+\mu_n M_{n-1}+2M_n=d_n,$$

其中

$$\begin{aligned} d_n &= \frac{6}{h_n+h_{n+1}}\left[\frac{y_{n+1}-y_n}{h_{n+1}}-\frac{y_n-y_{n-1}}{h_n}\right] \\ &= \frac{6}{h_n+h_1}\left[\frac{y_1-y_n}{h_1}-\frac{y_n-y_{n-1}}{h_n}\right]. \end{aligned}$$

方程组的第1个（$i=1$）方程为

$$\mu_1 M_0+2M_1+\lambda_1 M_2=d_1,$$

即

$$2M_1 + \lambda_1 M_2 + \mu_1 M_n = d_1.$$

于是可得关于第三种边界条件的三弯矩方程组

$$\begin{cases} 2M_1 + \lambda_1 M_2 + \mu_1 M_n = d_1, \\ \mu_i M_{i-1} + 2M_i + \lambda_i M_{i+1} = d_i, \quad i = 2, 3, \cdots, n-1. \\ \lambda_n M_1 + \mu_n M_{n-1} + 2M_n = d_n. \end{cases}$$

三种边界条件的三弯矩方程组

即

$$2M_1 + \lambda_1 M_2 + \mu_1 M_n = d_1.$$

于是可得关于第三种边界条件的三弯矩方程组

$$\begin{cases} 2M_1 + \lambda_1 M_2 + \mu_1 M_n = d_1, \\ \mu_i M_{i-1} + 2M_i + \lambda_i M_{i+1} = d_i, \quad i = 2, 3, \cdots, n-1. \\ \lambda_n M_1 + \mu_n M_{n-1} + 2M_n = d_n. \end{cases}$$

用矩阵表示为

$$\begin{pmatrix} 2 & \lambda_1 & & & \mu_1 \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ \lambda_n & & & \mu_n & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}.$$

例4.3 已知函数$y = f(x)$的数值如下:

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

求它的自然三次样条插值函数$S(x)$.

例4.3 已知函数$y = f(x)$的数值如下:

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

求它的自然三次样条插值函数$S(x)$.

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

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

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

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

三次样条插值函数

对于自然三次样条函数，$M_0 = M_4 = 0$. 所以三弯矩方程组为

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

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

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

Theorem

设$f(x)\in C^4[a,b]$, $S(x)$是满足第一种或第二种边界条件的三次样条插值函数,则

$$\max_{a\le x\le b}|f^{(k)}(x)-S^{(k)}(x)|\le c_k\max_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)|h^{4-k}\le c_kM_4h^{4-k},$$

$$k=0,1,2,3.$$

其中

$$c_0=\frac{5}{384},\quad c_1=\frac{1}{24},\quad c_2=\frac{3}{8},\quad c_3=(\beta+\beta^{-1})/2,$$
$$\beta=\max h_i/\min h_i,\quad h=max h_i,\quad M_4=\max_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)|.$$

三次样条插值函数的优点：

（1）关于M_i的三弯矩方程组的系数矩阵是严格对角占优阵，解存在且唯一，求解稳定性好.

三次样条插值函数的优点：

（1）关于M_i的三弯矩方程组的系数矩阵是严格对角占优阵，解存在且唯一，求解稳定性好.

（2）定理4.6.1表明：

(i) 若要提高精度，只需增加插值节点，不需要提高插值多项式的次数.

(ii) 随节点的加密，即当$h \to 0$时，$S(x), S'(x), S''(x)$分别一致地收敛于
$f(x), f'(x), f''(x)$；当β有界时，$S'''(x)$一致地收敛于$f'''(x)$.