

# 高等工程數學 (12)



廈門大學  
XIAMEN UNIVERSITY



信息学院  
(国家示范性软件学院)  
School of Informatics

黃 煒  
博士·副教授  
Dr. Wei Huang

# 方阵特征值与特征向量的 数值估算

## 矩阵论 (11)



廈門大學  
XIAMEN UNIVERSITY



信息学院 黃 燁  
(国家示范性软件学院) 博士·副教授  
School of Informatics Dr. Wei Huang

### 3 方阵特征值与特征向量的数值估算

机械、结构或电磁振荡问题,系统稳定性问题,以及其他一些工程技术问题,都需要数值求解方阵的特征值,即要求用数值方法求得方阵的全部或部分特征值及对应的特征向量. 由于在相似变换下,方阵的特征值是不变的,所以解方阵特征值问题的一般方法是,对给定的方阵进行相似变换,化为可简单地求出其特征值的特殊的方阵,例如上三角矩阵或块上三角矩阵. 常用的方法都具有迭代的特点,即按某种确定的规则产生收敛于特征值的序列,或构造收敛于特征向量的向量序列,从而得到近似的特征值及对应的特征向量.

# 3.1 特征值的估计

在许多应用中,常常并不一定要求算出方阵的特征值的数值大小,而只需要估计特征值所在的范围就够了.另外,用迭代法求特征值也需要对特征值所在范围有个估计,以便选取初始值.因此,由方阵的元素用较简便的方法给出特征值的估计有重要意义.

在矩阵论中已经指出,  $\rho(A) \leq \|A\|$ , 即  $A$  的谱半径不大于  $A$  的任何一种范数. 因而  $A$  的特征值  $\lambda$  的一个粗略上界是  $A$  的任何一种范数. 从几何上说, 方阵  $A$  的特征值必位于复平面上以原点为中心, 半径为  $\|A\|$  的圆上.

下面介绍特征值估计的一些基本方法.

**定义 3.1-1** 对于  $n$  阶方阵  $A = [a_{ij}]$ , 由不等式

$$|z - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.1-1)$$

所确定的复平面  $z$  上的圆域称为  $A$  的第  $i$  个 **Gerschgorin** 圆, 简称**盖氏圆**, 并记为  $G_i$ .

**定理 3.1-1** 方阵  $A$  的任何特征值  $\lambda$  都在它的  $n$  个盖氏圆的并集  $\bigcup_{i=1}^n G_i$  上.

**证** 设  $\lambda$  为  $A$  的任一个特征值,  $x \neq 0$  是对应于  $\lambda$  的特征向量. 不失一般性, 令  $k$  是满足

$$|x_k| = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| = \|x\|_{\infty}$$

的最小下标, 则由  $Ax = \lambda x$  的第  $k$  个等式给出

$$\sum_{j=1}^n a_{kj} x_j = \lambda x_k,$$

## 3.1

从而有

$$(\lambda - a_{kk})x_k = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n a_{kj}x_j.$$

由于  $x_k \neq 0$ , 故有

$$|\lambda - a_{kk}| = \left| \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n a_{kj} \frac{x_j}{x_k} \right| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n |a_{kj}| \frac{|x_j|}{|x_k|} \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n |a_{kj}|,$$

也就是说,  $\lambda \in G_k \subseteq \bigcup_{i=1}^n G_i$ .

### 例 1 估计方阵

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0.1 & 0.2 & 0.3 \\ 0.5 & 3 & 0.1 & 0.2 \\ 1 & 0.3 & -1 & 0.5 \\ 0.2 & -0.3 & -0.1 & -4 \end{bmatrix}$$

的特征值范围.

解  $G_1 = \{z \mid |z-1| \leq 0.6\}$ ,  $G_2 = \{z \mid |z-3| \leq 0.8\}$ ,  $G_3 = \{z \mid |z+1| \leq 1.8\}$ ,  $G_4 = \{z \mid |z+4| \leq 0.6\}$ . 根据上述定理,  $A$  的所有特征值都在这四个盖氏圆的并集中, 如图 3.1-1 所示.

# 3.1 特征值的估计

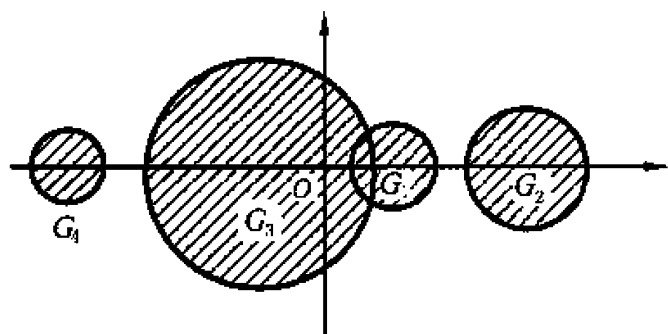


图 3.1-1

从图 3.1-1 看出,  $G_1$  与  $G_3$  是相交的, 它们的并集是一个连通域. 相交的盖氏圆所构成的最大连通域, 称为一个连通部分. 孤立的一个盖氏圆也作为一个连通部分. 因而, 图 3.1-1 有三个连通部分.

**定理 3.1-2** 在方阵  $A$  的盖氏圆构成的所有连通部分中任取一个, 如果这个连通部分由  $k$  个盖氏圆构成, 则它含且仅含  $A$  的  $k$  个特征值.

证 令  $D = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn})$ ,  $M = A - D$ . 记  $A(\epsilon) = D + \epsilon M$ , 其中  $0 \leq \epsilon \leq 1$ , 并用  $\lambda_1(\epsilon), \lambda_2(\epsilon), \dots, \lambda_n(\epsilon)$  表示方阵  $A(\epsilon)$  的  $n$  个特征值. 显然,  $A(1) = A$ ,  $A(0) = D$ , 并且  $D$  的  $n$  个特征值为  $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}$ , 亦即位于  $A$  的盖氏圆的圆心. 由于  $\lambda_1(\epsilon), \lambda_2(\epsilon), \dots, \lambda_n(\epsilon)$  是  $\epsilon$  的连续函数, 而  $A(\epsilon)$  的盖氏圆是

$$G_i(\epsilon) = \{z \mid |z - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |\epsilon a_{ij}| = \epsilon \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|\}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

因为  $0 \leq \epsilon \leq 1$ , 所以  $G_i(\epsilon) \subseteq G_i$ . 故当  $\epsilon$  由  $\epsilon=0$  增大到  $\epsilon=1$  时,  $\lambda_i(\epsilon)$  画出一条以  $\lambda_i(0) = a_{ii}$  为始点,  $\lambda_i(1) = \lambda_i$  ( $\lambda_i$  是  $A$  的特征值) 为终点的连续曲线, 且始终不会越出  $G_i$ .

因此, 若连通部分  $S$  是由  $k$  个盖氏圆构成的, 则在  $\epsilon=0$  时,  $S$  含且仅含  $k$  个特征值, 从而当  $\epsilon$  由  $\epsilon=0$  变到  $\epsilon=1$  时,  $S$  中也含且仅含  $A$  的  $k$  个特征值. ■

# 3.1 特征值的估计

由这个定理知,例 1 的  $G_2$ 、 $G_4$  是仅由一盖氏圆构成的连通部分,故它们各有一个特征值,而由  $G_1$  与  $G_3$  构成的连通部分应有两个特征值.

因为数值计算方法这部分只涉及实方阵  $A$ ,所以若复数  $\lambda$  是  $A$  的特征值,则  $\lambda$  的共轭  $\bar{\lambda}$  也是  $A$  的特征值,据此可知,例 1 的  $G_2$ 、 $G_4$  各有一个实特征值.

从盖氏圆的定义知,盖氏圆的半径越小,特征值的估计越好.因此可用相似变换使盖氏圆的半径变小.为明确简单起见,相似变换矩阵一般取为对角矩阵.例如,取

$$P = \text{diag}(b_1, b_2, \dots, b_n),$$

其中  $b_i > 0 (i=1, 2, \dots, n)$ , 则

$$B = P^{-1}AP = \text{diag}\left(\frac{1}{b_1}, \frac{1}{b_2}, \dots, \frac{1}{b_n}\right)A \text{diag}(b_1, b_2, \dots, b_n) \quad (3.1-2)$$

与  $A$  有相同的特征值,而  $B$  的第  $i$  个盖氏圆为

$$|z - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| \frac{b_j}{b_i}. \quad (3.1-3)$$

因此适当选取  $b_1, b_2, \dots, b_n$ , 就有可能使  $B$  的某些盖氏圆的半径比  $A$  的相应盖氏圆的半径小.

**例 2** 估计

$$A = \begin{bmatrix} 0.9 & 0.01 & 0.12 \\ 0.01 & 0.8 & 0.13 \\ 0.01 & 0.02 & 0.4 \end{bmatrix}$$

的特征值范围.

# 3.1 特征值的估计

解  $A$  的三个盖氏圆分别为

$$G_1 = \{z \mid |z - 0.9| \leq 0.13\},$$

$$G_2 = \{z \mid |z - 0.8| \leq 0.14\},$$

$$G_3 = \{z \mid |z - 0.4| \leq 0.03\},$$

如图 3.1-2 所示.

由于  $G_3$  是一个连通部分, 所以恰有一个实特征值, 且  $G_3$  的半径比  $G_1$ 、 $G_2$  的半径小

4~5倍. 为了更好地估计另外两个特征值, 从数据上看, 应缩小  $A$  的第三列前两个数, 据此取  $b_1 = b_2 = 1, b_3 = 0.1$ , 从而由(3.1-2)式得

$$B = \begin{bmatrix} 0.9 & 0.01 & 0.012 \\ 0.01 & 0.8 & 0.013 \\ 0.1 & 0.2 & 0.4 \end{bmatrix}.$$

$B$  的三个盖氏圆分别是  $G'_1 = \{z \mid |z - 0.9| \leq 0.022\}, G'_2 = \{z \mid |z - 0.8| \leq 0.023\}, G'_3 = \{z \mid |z - 0.4| \leq 0.3\}$ . 由于这三个盖氏圆都是孤立的, 所以各个圆中恰有一个实特征值. 又因  $G_3 \subset G'_3$ , 故  $A$  的三个实特征值分别位于  $G'_1$ 、 $G'_2$  及  $G_3$  中, 即

$$|\lambda_1 - 0.9| \leq 0.022, |\lambda_2 - 0.8| \leq 0.023, |\lambda_3 - 0.4| \leq 0.03.$$

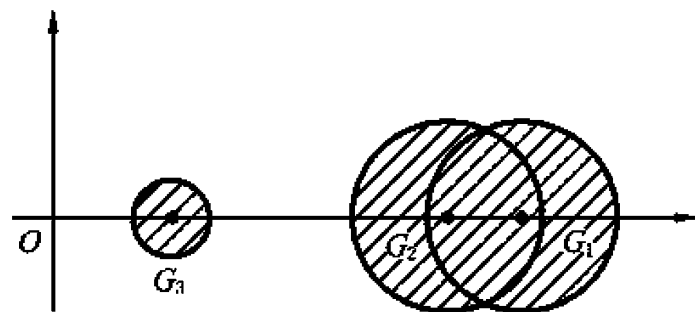


图 3.1-2



## 3.2 幂法和反幂法

### 3.2.1 幂法

幂法是求方阵的模最大的特征值及对应特征向量的一种向量迭代法。

设  $n$  阶方阵  $A$  有  $n$  个线性无关的特征向量  $v_1, v_2, \dots, v_n$ , 对应的特征值依次为  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ , 且满足不等式

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|. \quad (3.2-1)$$

由于  $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$  构成  $C^n$  的一个基, 故对于任给的非零向量  $x^{(0)}$ , 可以把  $x^{(0)}$  表示为

$$x^{(0)} = a_1 v_1 + a_2 v_2 + \dots + a_n v_n,$$

从而

$$A^k x^{(0)} = A^k \left( \sum_{i=1}^n a_i v_i \right) = \sum_{i=1}^n a_i A^k v_i = \sum_{i=1}^n a_i \lambda_i^k v_i = \lambda_1^k \left[ a_1 v_1 + \sum_{i=2}^n \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k a_i v_i \right]. \quad (3.2-2)$$

若  $a_1 \neq 0$ , 则由(3.2-1)式知  $\left| \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right| < 1 (i=2, 3, \dots, n)$ , 故当  $k$  充分大时,

$$A^k x^{(0)} \approx \lambda_1^k a_1 v_1.$$

这就是说, 当  $k$  充分大时,  $A^k x^{(0)}$  可以近似地作为  $A$  的属于  $\lambda_1$  的特征向量. 为了求得  $\lambda_1$  的近似值, 记  $\max(x)$  为  $x$  的按模最大的分量, 则当  $k$  充分大时, 有

$$\frac{\max(A^k x^{(0)})}{\max(A^{k-1} x^{(0)})} \approx \frac{\max(\lambda_1^k a_1 v_1)}{\max(\lambda_1^{k-1} a_1 v_1)} = \lambda_1.$$

这就是幂法的基本思想, 并且由此可得出如下迭代公式:

$$x^{(k+1)} = A x^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots. \quad (3.2-3)$$

## 3.2 幂法和反幂法

取定一个非零向量  $\mathbf{x}^{(0)}$ , (3.2-3) 式产生一个向量序列  $\{\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{A}^k \mathbf{x}^{(0)}\}$ . 当  $k$  充分大时,  $\mathbf{x}^{(k)}$  可作为  $\mathbf{A}$  的属于特征值  $\lambda_1$  的特征向量的近似向量, 而  $\frac{\max(\mathbf{x}^{(k)})}{\max(\mathbf{x}^{(k-1)})}$  是  $\lambda_1$  的近似值.

如果选取的  $\mathbf{x}^{(0)}$  使  $a_1 \neq 0$ , 那么由于计算过程中舍入误差的影响, 必然在迭代的某一步产生这样一个向量, 它在  $\mathbf{v}_1$  方向上的分量不为零, 从而迭代进行下去仍可求得  $\lambda_1$  及对应于  $\lambda_1$  的特征向量  $\mathbf{v}_1$  (带有常数因子) 的近似值.

在实际计算中, 常数因子  $a_1 \lambda_1^k$  会随着  $k \rightarrow +\infty$  而无限增大或无限减小. 事实上, 若  $|\lambda_1| > 1$ , 则  $|\lambda_1^k|$  随  $k \rightarrow +\infty$  而无限增大以至产生溢出停机; 而若  $|\lambda_1| < 1$ , 则  $|\lambda_1^k|$  随  $k \rightarrow +\infty$  而无限减小, 又有可能出现机器零而停机. 因此在迭代法的每一步都要采用规范化的运算, 即用  $\max(\mathbf{x}^{(k)})$  去除  $\mathbf{x}^{(k)}$  的各个分量, 从而得到规范化的向量  $\mathbf{y}^{(k)} = \frac{\mathbf{x}^{(k)}}{\max(\mathbf{x}^{(k)})}$ , 然后用  $\mathbf{A}$  左乘  $\mathbf{y}^{(k)}$  得到  $\mathbf{x}^{(k+1)}$ . 这样幂法的迭代公式为

$$\begin{cases} \mathbf{y}^{(k)} = \frac{\mathbf{x}^{(k)}}{\max(\mathbf{x}^{(k)})}, \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{A} \mathbf{y}^{(k)}, \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.2-4)$$

**定理 3.2-1** 从任一非零向量  $\mathbf{x}^{(0)}$  ( $a_1 \neq 0$ ) 出发, 按公式 (3.2-4) 产生向量序列  $\{\mathbf{y}^{(k)}\}$  和数列  $\{\max(\mathbf{x}^{(k)})\}$ , 则有

$$\begin{cases} \lim_{k \rightarrow +\infty} \mathbf{y}^{(k)} = \frac{\mathbf{v}_1}{\max(\mathbf{v}_1)}, \\ \lim_{k \rightarrow +\infty} \max(\mathbf{x}^{(k)}) = \lambda_1. \end{cases} \quad (3.2-5)$$

## 3.2 幂法和反幂法

$$\begin{aligned}
 \text{证 } \mathbf{y}^{(k)} &= \frac{\mathbf{x}^{(k)}}{\max(\mathbf{x}^{(k)})} = \frac{\mathbf{A}\mathbf{y}^{(k-1)}}{\max(\mathbf{A}\mathbf{y}^{(k-1)})} = \frac{\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k-1)}}{\max(\mathbf{x}^{(k-1)})} \bigg/ \max\left(\frac{\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k-1)}}{\max(\mathbf{x}^{(k-1)})}\right) \\
 &= \frac{\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k-1)}}{\max(\mathbf{x}^{(k-1)})} \bigg/ \frac{\max(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k-1)})}{\max(\mathbf{x}^{(k-1)})} = \frac{\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k-1)}}{\max(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k-1)})} = \dots = \frac{\mathbf{A}^k \mathbf{x}^{(0)}}{\max(\mathbf{A}^k \mathbf{x}^{(0)})} \\
 &= \frac{\lambda_1^k \left[ a_1 \mathbf{v}_1 + \sum_{i=2}^n a_i \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}_i \right]}{\max \left[ \lambda_1^k \left( a_1 \mathbf{v}_1 + \sum_{i=2}^n a_i \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}_i \right) \right]} = \frac{a_1 \mathbf{v}_1 + \sum_{i=2}^n a_i \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}_i}{\max \left[ a_1 \mathbf{v}_1 + \sum_{i=2}^n a_i \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}_i \right]} \\
 &\rightarrow \frac{\mathbf{v}_1}{\max(\mathbf{v}_1)} \quad (k \rightarrow +\infty),
 \end{aligned}$$

$$\max(\mathbf{x}^{(k)}) = \max(\mathbf{A}\mathbf{y}^{(k-1)}) \rightarrow \max\left(\frac{\mathbf{A}\mathbf{v}_1}{\max(\mathbf{v}_1)}\right) = \frac{\max(\lambda_1 \mathbf{v}_1)}{\max(\mathbf{v}_1)} = \lambda_1 \quad (k \rightarrow +\infty).$$

## 3.2 幂法和反幂法

例 1 用幂法求方阵  $A$  的模最大的特征值及对应于其特征向量, 其中

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 \\ 3 & 9 & 15 \\ 4 & 16 & 36 \end{bmatrix}.$$

解 取  $x^{(0)} = [1, 1, 1]^T$ , 按(3.2-4)式计算, 迭代五次的结果见表 3.2-1.

表 3.2-1

$k$	$x^{(k)}$			$y^{(k)}$		
0	1	1	1	1	1	1
1	12.00	27.00	56.00	0.2143	0.4821	1
2	8.357	19.98	44.57	0.1875	0.4483	1
3	8.168	19.60	43.92	0.1860	0.4463	1
4	8.157	19.57	43.88	0.1859	0.4460	1
5	8.156	19.57	43.88	0.1859	0.4460	1

模最大的特征值  $\lambda_1 \approx 43.88$ , 相应的特征向量为

$$v_1 = [0.1859, 0.4460, 1]^T.$$

[注] 如果  $A$  的特征值不满足条件(3.2-1), 幂法收敛性的分析比较复杂, 读者可参阅参考书[9], 这里不详细讨论. 但若  $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_r$ , 且  $|\lambda_1| > |\lambda_{r+1}| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$ , 则定理 3.2-1 的结论仍然成立, 不过对于不同的初始向量, 迭代得出的向量序列一般趋向于属于  $\lambda_1$  的不同的特征向量.

## 3.2 幂法和反幂法

从(3.2-2)式可知,幂法的收敛速度与比值  $\left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|$  有关,这个比值越小,收敛越快.

### 3.2.2 加速方法

如上所述,幂法的收敛速度取决于比值  $\left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|$ ,当它接近于 1 时,收敛很慢.因此要考虑加速收敛的问题.

#### 1. 特征值的 Aitken 加速法

从定理 3.2-1 的证明过程可知

$$\begin{aligned} \max(\mathbf{x}^{(k)}) &= \max(\mathbf{A}\mathbf{y}^{(k-1)}) \\ &= \frac{\max\left[\mathbf{A}\left(a_1\mathbf{v}_1 + \sum_{i=2}^n a_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{k-1} \mathbf{v}_i\right)\right]}{\max\left(a_1\mathbf{v}_1 + \sum_{i=2}^n a_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{k-1} \mathbf{v}_i\right)} = \lambda_1 \frac{\max\left(a_1\mathbf{v}_1 + \sum_{i=2}^n a_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k \mathbf{v}_i\right)}{\max\left(a_1\mathbf{v}_1 + \sum_{i=2}^n a_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{k-1} \mathbf{v}_i\right)}. \end{aligned}$$

当  $k$  充分大时,

$$\max(\mathbf{x}^{(k)}) - \lambda_1 \approx \lambda_1 M \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{k-1}, \quad (3.2-6)$$

其中  $M$  是某个与  $k$  无关的数.因此,由(3.2-6)式得到

$$\frac{\max(\mathbf{x}^{(k+2)}) - \lambda_1}{\max(\mathbf{x}^{(k+1)}) - \lambda_1} \approx \frac{\max(\mathbf{x}^{(k+1)}) - \lambda_1}{\max(\mathbf{x}^{(k)}) - \lambda_1}.$$

## 3.2 幂法和反幂法

于是有

$$\lambda_1 \approx \lambda_1^{(k+2)} \triangleq \frac{\max(\mathbf{x}^{(k+2)}) \cdot \max(\mathbf{x}^{(k)}) - [\max(\mathbf{x}^{(k+1)})]^2}{\max(\mathbf{x}^{(k+2)}) - 2\max(\mathbf{x}^{(k+1)}) + \max(\mathbf{x}^{(k)})}$$

$$= \max(\mathbf{x}^{(k+2)}) - \frac{[\max(\mathbf{x}^{(k+2)}) - \max(\mathbf{x}^{(k+1)})]^2}{\max(\mathbf{x}^{(k+2)}) - 2\max(\mathbf{x}^{(k+1)}) + \max(\mathbf{x}^{(k)})}. \quad (3.2-7)$$

(3.2-7)式表明,在计算出  $\max(\mathbf{x}^{(k)})$ 、 $\max(\mathbf{x}^{(k+1)})$  和  $\max(\mathbf{x}^{(k+2)})$  之后,可按此式计算  $\lambda_1^{(k+2)}$  作为  $\lambda_1$  的一个更好的近似值. 这种利用前后相邻的三个近似值经过简单的代数运算得到更好近似值的方法称为 **Aitken 加速法**.

**例 2** 用幂法求方阵  $A$  的模最大的特征值,并用 Aitken 法加速,其中

$$A = \begin{bmatrix} -4 & 14 & 0 \\ -5 & 13 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

**解** 取  $\mathbf{x}^{(0)} = [1, 1, 1]^T$ , 按幂法和 Aitken 加速法计算的前 4 次结果见表 3.2-2.

表 3.2-2

$k$	$\mathbf{x}^{(k)}$			$\mathbf{y}^{(k)}$			$\max(\mathbf{x}^{(k)})$	$\lambda_1^{(k)}$
0	1	1	1	1	1	1	1	
1	10	8	1	1	0.8	0.1	10	
2	7.2	5.4	-0.8	1	0.75	-0.1111	7.2	7.8644
3	6.5	4.75	-1.2222	1	0.7308	-0.1880	6.5	6.2667
4	6.2312	4.5004	-1.3760	1	0.7222	-0.2208	6.2312	6.0636

本题  $A$  的特征值是 6, 3, 2.

## 3.2 幂法和反幂法

### 2. 原点平移法

从矩阵论知,当方阵  $A$  的特征值为  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  时,方阵  $A - aI$  的特征值对应为  $\lambda_1 - a, \lambda_2 - a, \dots, \lambda_n - a$ , 且特征向量不变. 如果适当地选取数  $a$ , 使  $\lambda_1 - a$  是  $A - aI$  的模最大的特征值, 且  $A - aI$  的模次大的特征值(不妨设为  $\lambda_k - a$ )与  $\lambda_1 - a$  的比值  $\left| \frac{\lambda_k - a}{\lambda_1 - a} \right| < \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|$ , 那么对  $A - aI$  使用幂法计算  $\lambda_1 - a$  及对应于其特征向量要比对  $A$  使用幂法计算相应量收敛得快. 这种加速收敛的方法称为原点平移法.

根据定理 3.2-1 知,按迭代公式

$$\begin{cases} \mathbf{y}^{(k)} = \frac{\mathbf{x}^{(k)}}{\max(\mathbf{x}^{(k)})}, \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = (A - aI)\mathbf{y}^{(k)}, \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.2-8)$$

计算,则当  $k \rightarrow \infty$  时,有

$$\mathbf{y}^{(k)} \rightarrow \frac{\mathbf{v}_1}{\max(\mathbf{v}_1)}, \max(\mathbf{x}^{(k)}) \rightarrow \lambda_1 - a. \quad (3.2-9)$$

因此,当  $k$  充分大时,  $a + \max(\mathbf{x}^{(k)})$  可作为  $\lambda_1$  的近似值.

原点平移法的缺点是没有自动选择  $a$  的程序.  $a$  的选取要依赖于对  $A$  的特征值的分布有一定的了解. 例如  $A$  是对称正定矩阵, 则  $A$  的特征值全为正实数, 不妨设  $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n > 0$ , 则不难看出, 求  $\lambda_1$  时应选取  $a = \frac{\lambda_2 + \lambda_n}{2}$ , 而求  $\lambda_n$  时应选取  $a = \frac{\lambda_1 + \lambda_{n-1}}{2}$ .

## 3.2 幂法和反幂法

例 3 设  $A = \begin{bmatrix} -3 & 1 & 0 \\ 1 & -3 & -3 \\ 0 & -3 & 4 \end{bmatrix}$ ,  $\mathbf{x}^{(0)} = [0, 0, 1]^T$ . 如果对  $A$  使用幂法求它的一个特征

值及对应于其特征向量, 则前 6 次的迭代结果如表 3.2-3 所示.  $\max(\mathbf{x}^{(k)})$  有波动, 是否收敛难以断定.

表 3.2-3

$k$	0	1	2	3	4	5	6
$\mathbf{x}^{(k)}$	0	0	-0.75	0.24	-0.798	0.2286	-0.7257
	0	-3	-0.75	-2.76	-1.046	-2.6034	-1.2261
	1	4	6.25	4.36	5.899	4.5319	5.7235
$\mathbf{y}^{(k)}$	0	0	-0.12	0.055	-0.1353	0.0504	-0.1286
	0	-0.75	-0.12	0.633	-0.1773	-0.5745	-0.2142
	1	1	1	1	1	1	1
$\max(\mathbf{x}^{(k)})$	1	4	6.25	4.36	5.899	4.5319	5.7235

现取  $a = -4$ , 考虑对  $A + 4I$  使用幂法, 则从表 3.2-4 看出, 只迭代了 6 次,  $\max(\mathbf{x}^{(6)})$  与  $\max(\mathbf{x}^{(5)})$  相差就不大了. 由于  $\max(\mathbf{x}^{(6)}) = 9.1247$ , 所以  $A$  的一个特征值约是  $9.1247 - 4 = 5.1247$ , 对应的特征向量近似值为  $[-0.0461, -0.3749, 1]^T$ .



## 3.2 幂法和反幂法

表 3.2-4

$k$	0	1	2	3	4	5	6
$x^{(k)}$	0	0	-0.375	-0.411	-0.4195	-0.4208	-0.4210
	0	-3	-3.375	-3.411	-3.4195	-3.4208	-3.4210
	1	8	9.125	9.1097	9.1232	9.1244	9.1247
$y^{(k)}$	0	0	-0.0411	-0.0451	-0.0460	-0.0461	-0.0461
	0	-0.375	-0.3699	-0.3744	-0.3748	-0.3749	-0.3749
	1	1	1	1	1	1	1
$\max(x^{(k)})$	1	8	9.125	9.1097	9.1232	9.1244	9.1247

### 3. 对称矩阵的 Rayleigh 商加速法

设  $A$  是对称矩阵,  $x$  是非零向量, 则

$$R(x) = \frac{x^T A x}{x^T x}$$

称为  $x$  关于  $A$  的 Rayleigh 商.

由于  $n$  阶对称矩阵  $A$  的特征值均为实数, 且有  $n$  个相互正交的单位特征向量  $v_1$ ,

$v_2, \dots, v_n$ , 所以如果  $x^{(0)} = \sum_{i=1}^n a_i v_i (a_1 \neq 0)$ , 则有

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k a_i v_i,$$

## 3.2 幂法和反幂法

$$\begin{aligned}
 R(\mathbf{x}^{(k)}) &= \frac{(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{A}(\mathbf{x}^{(k)})}{(\mathbf{x}^{(k)})^T (\mathbf{x}^{(k)})} = \frac{\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^k a_i v_i\right)^T \left(\sum_{j=1}^n \lambda_j^{k+1} a_j v_j\right)}{\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^k a_i v_i\right)^T \left(\sum_{j=1}^n \lambda_j^k a_j v_j\right)} \\
 &= \frac{\sum_{i=1}^n \lambda_i^{2k+1} a_i^2}{\sum_{i=1}^n \lambda_i^{2k} a_i^2} = \lambda_1 \frac{1 + \sum_{i=2}^n \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{2k+1} \left(\frac{a_i}{a_1}\right)^2}{1 + \sum_{i=2}^n \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{2k} \left(\frac{a_i}{a_1}\right)^2}.
 \end{aligned}$$

当  $k$  充分大时,

$$R(\mathbf{x}^{(k)}) - \lambda_1 \approx \lambda_1 M' \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{2k}, \quad (3.2-10)$$

其中  $M'$  是某个与  $k$  无关的数. 将(3.2-10)式与(3.2-6)式比较, 可见  $\frac{\lambda_2}{\lambda_1}$  的幂次增大了一倍多, 从而收敛速度加快了.

Rayleigh 商加速法的迭代公式是

$$\begin{cases} \mathbf{y}^{(k)} = \frac{\mathbf{x}^{(k)}}{\max(\mathbf{x}^{(k)})}, \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{A} \mathbf{y}^{(k)}, \\ R(\mathbf{y}^{(k)}) = \frac{(\mathbf{y}^{(k)})^T \mathbf{A}(\mathbf{y}^{(k)})}{(\mathbf{y}^{(k)})^T (\mathbf{y}^{(k)})} = \frac{(\mathbf{y}^{(k)})^T \mathbf{x}^{(k+1)}}{(\mathbf{y}^{(k)})^T \mathbf{y}^{(k)}}. \end{cases} \quad (3.2-11)$$

值得注意的是, 由(3.2-10)式看出, 有了  $R(\mathbf{x}^{(k)})$ 、 $R(\mathbf{x}^{(k+1)})$ 、 $R(\mathbf{x}^{(k+2)})$  的值, 也可用 Aitken 加速法得到  $\lambda_1$  的一个更好的近似值.

## 3.2 幂法和反幂法

例 4 设  $A = \begin{bmatrix} 6 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ , 用 Rayleigh 商加速法求  $A$  的模最大的特征值及对应于它的特征向量, 并与幂法比较. 取  $\mathbf{x}^{(0)} = [1, 1, 1]^T$ .

解 由  $\mathbf{x}^{(0)} = [1, 1, 1]^T$  得  $\mathbf{y}^{(0)} = [1, 1, 1]^T$ . 从而由 (3.2-11) 式得

$$\mathbf{x}^{(1)} = [9, 6, 3]^T, \quad R(\mathbf{y}^{(0)}) = \frac{(\mathbf{y}^{(0)})^T \mathbf{x}^{(1)}}{(\mathbf{y}^{(0)})^T (\mathbf{y}^{(0)})} = 6.$$

其余的  $R(\mathbf{y}^{(k)})$  类似计算, 表 3.2-5 给出了前 4 次迭代结果. 为了与幂法比较, 表中列出对应的  $\max(\mathbf{x}^{(k)})$ .

表 3.2-5

$k$	$\mathbf{x}^{(k)}$			$\mathbf{y}^{(k)}$			$\max(\mathbf{x}^{(k)})$	$R(\mathbf{y}^{(k-1)})$
0	1	1	1	1	1	1	1	
1	9	6	3	1	0.66667	0.33333	9	6
2	7.66664	4.33334	2	1	0.56522	0.26082	7.66664	7.21427
3	7.39131	3.95648	1.82604	1	0.53529	0.24705	7.39131	7.28206
4	7.31763	3.85292	1.78234	1	0.52653	0.24357	7.31763	7.28748

## 3.2 幂法和反幂法

### 3.2.3 反幂法

反幂法是用来求方阵  $A$  的模最小的特征值及对应于它的特征向量的向量迭代法。

若  $A$  可逆, 则  $A^{-1}$  存在, 用  $A^{-1}$  替代  $A$  作上述的幂法就是所谓的反幂法. 由于  $A^{-1}$  的特征值是  $A$  的特征值的倒数, 且相应的特征向量相同, 故由 (3.2-1) 式知,  $\frac{1}{\lambda_n}$  是  $A^{-1}$  的模最大的特征值.

任取一初始向量  $x^{(0)}$ , 则迭代公式

$$x^{(k+1)} = A^{-1} x^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots$$

产生向量序列  $\{x^{(k)}\}$ . 但因  $A^{-1}$  不易计算, 所以通常由解线性方程组  $Ax^{(k+1)} = x^{(k)}$  来得到  $x^{(k+1)}$ .

因此, 实际使用的反幂法的计算公式是

$$\begin{cases} y^{(k)} = \frac{x^{(k)}}{\max(x^{(k)})}, \\ Ax^{(k+1)} = y^{(k)}, \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots, \quad (3.2-12)$$

并且当  $k \rightarrow +\infty$  时, 有

## 3.2 幂法和反幂法

$$\begin{cases} \mathbf{y}^{(k)} \rightarrow \frac{\mathbf{v}_n}{\max(\mathbf{v}_n)}, \\ \max(\mathbf{x}^{(k)}) \rightarrow \frac{1}{\lambda_n} \text{ 或 } \frac{1}{\max(\mathbf{x}^{(k)})} \rightarrow \lambda_n. \end{cases} \quad (3.2-13)$$

反幂法与上述原点平移法结合起来,便可求任一特征值  $\lambda_j$  及对应于  $\lambda_j$  的特征向量  $\mathbf{v}_j$  (实际是  $\frac{\mathbf{v}_j}{\max(\mathbf{v}_j)}$ ), 只要已知  $\lambda_j$  的较好近似值  $\hat{\lambda}_j$ . 事实上, 由于  $(\mathbf{A} - \hat{\lambda}_j \mathbf{I})^{-1}$  的特征值是  $\frac{1}{\lambda_1 - \hat{\lambda}_j}, \dots, \frac{1}{\lambda_j - \hat{\lambda}_j}, \dots, \frac{1}{\lambda_n - \hat{\lambda}_j}$ , 而  $\lambda_j - \hat{\lambda}_j$  很小, 故  $\frac{1}{\lambda_j - \hat{\lambda}_j}$  非常大, 而其余的  $\frac{1}{\lambda_i - \hat{\lambda}_j} (i \neq j)$  不会很大, 所以比值  $\left| \frac{\lambda_j - \hat{\lambda}_j}{\lambda_i - \hat{\lambda}_j} \right| (i \neq j)$  很小. 因此, 对  $\mathbf{A} - \hat{\lambda}_j \mathbf{I}$  使用反幂法, 则收敛非常快. 其计算公式是

$$\begin{cases} \mathbf{y}^{(k)} = \frac{\mathbf{x}^{(k)}}{\max(\mathbf{x}^{(k)})}, & k = 0, 1, \dots, \\ (\mathbf{A} - \hat{\lambda}_j \mathbf{I}) \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{y}^{(k)}, \end{cases} \quad (3.2-14)$$

并且当  $k \rightarrow +\infty$  时,

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^{(k)} &\rightarrow \frac{\mathbf{v}_j}{\max(\mathbf{v}_j)}, \\ \max(\mathbf{x}^{(k)}) &\rightarrow \frac{1}{\lambda_j - \hat{\lambda}_j} \quad \text{或} \quad \hat{\lambda}_j + \frac{1}{\max(\mathbf{x}^{(k)})} \rightarrow \lambda_j. \end{aligned} \quad (3.2-15)$$

## 3.2 幂法和反幂法

为了节省工作量和数值稳定性好,应用选主元的 LR 分解求解(3.2-14)式中的线性方程组,即对方阵  $A - \hat{\lambda}_j I$  作带行交换的 LR 分解:

$$P(A - \hat{\lambda}_j I) = LR,$$

其中  $P$  是置换矩阵,  $L$  为单位下三角矩阵,  $R$  为上三角矩阵. 于是, (3.2-14) 式改写为

$$\begin{cases} y^{(k)} = \frac{x^{(k)}}{\max(x^{(k)})}, \\ Lz^{(k+1)} = Py^{(k)}, \\ Rx^{(k+1)} = z^{(k+1)}, \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots. \quad (3.2-16)$$

经验表明, 计算开始时, 可以不给出  $x^{(0)}$ , 而直接取  $z^{(1)} = [1, 1, \dots, 1]^T$ . 这种选取初始向量的方法称为半次迭代法.

## 3.2 幂法和反幂法

例 5 已知方阵

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -1 & 2 & 1 \\ 2 & -4 & 1 \\ 1 & 1 & -6 \end{bmatrix}$$

的一个特征值  $\lambda$  的近似值  $\hat{\lambda} = -6.42$ , 用带原点平移的反幂法求  $\lambda$  及对应于  $\lambda$  的特征向量.

解 在方阵  $\mathbf{A} + 6.42\mathbf{I}$  的 LR 分解式中

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 0.369004 & 1 & \\ 0.184502 & 0.375148 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R} = \begin{bmatrix} 5.42 & 2 & 1 \\ & 1.681993 & 0.630996 \\ & & -1.218848 \times 10^{-3} \end{bmatrix}.$$

用半次迭代法, 取  $\mathbf{z}^{(1)} = [1, 1, 1]^T$ . 由(3.2-16)式得

$$\mathbf{x}^{(1)} = [37.764395, 308.381912, -820.446848]^T,$$

从而  $\mathbf{y}^{(1)} = [-0.0460291, -0.375871, 1]^T$ .

第二次迭代时, 先解  $\mathbf{L}\mathbf{z}^{(2)} = \mathbf{y}^{(1)}$ , 得

$$\mathbf{z}^{(2)} = [-0.0460291, -0.358886, 1.143128]^T,$$

再解  $\mathbf{R}\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{z}^{(2)}$ , 得  $\mathbf{x}^{(2)} = [43.279655, 351.627002, -937.875765]^T$ .

于是,  $\mathbf{y}^{(2)} = [-0.0461465, -0.374919, 1]^T$ .

因此, 
$$\lambda \approx -6.42 - \frac{1}{937.875765} = -6.421066,$$

对应特征向量为  $\mathbf{y}^{(2)} = [-0.0461465, -0.374919, 1]^T$ .

## 3.3 QR方法

QR 方法是目前求一般方阵全部特征值的最有效并广泛应用的方法之一. 这里着重介绍它的基本思想和方法. 在实际应用中, 经常先把一般方阵经过正交相似变换化成上 Hessenberg 矩阵, 再用 QR 方法求其特征值及对应的特征向量.

### 3.3.1 QR 方法的计算公式

QR 方法是一种矩阵迭代法, 从  $A_1 = A$  出发, 通过一系列正交相似变换得出方阵序列  $\{A_k\}$ . 在一定条件下可以证明, 当  $k \rightarrow +\infty$  时,  $A_k$  本质收敛于一个块对角矩阵, 其对角子块是 1 阶或 2 阶方阵, 因而容易求出它们的特征值. 具体做法如下.

对  $A_1$  进行 QR 分解:  $A_1 = Q_1 R_1$ , 然后将  $Q_1, R_1$  反序相乘得  $A_2 = R_1 Q_1$ ; 再以  $A_2$  替代  $A_1$  重复上述步骤得  $A_3$ ; 如此继续下去得到方阵序列  $\{A_k\}$ . 因此, QR 方法的计算公式是

$$\begin{cases} A_k = Q_k R_k, \\ A_{k+1} = R_k Q_k, \quad k = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (3.3-1)$$

这样产生的方阵序列  $\{A_k\}$  有两个基本性质:

1) 每个  $A_k$  都与  $A$  相似. 事实上,

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k = \dots = (Q_1 \cdots Q_k)^{-1} A_1 (Q_1 \cdots Q_k), \quad (3.3-2)$$

其中  $Q_1 \cdots Q_k = G_k$  是正交矩阵, 所以  $A_{k+1}$  与  $A_1 = A$  相似, 从而有相同的特征值.



## 3.3 QR方法

2) 若令  $H_k = R_k \cdots R_1$ , 则有

$$\begin{aligned}
 G_k H_k &= (Q_1 \cdots Q_k)(R_k \cdots R_1) = G_{k-1} Q_k R_k H_{k-1} \\
 &= G_{k-1} A_k H_{k-1} = A_1 G_{k-1} H_{k-1} = \cdots = A_1^k = A^k.
 \end{aligned} \tag{3.3-3}$$

事实上, 由(3.3-2)式得

$$A_{k+1} = G_k^{-1} A_1 G_k, \quad \text{即} \quad G_k A_{k+1} = A_1 G_k,$$

从而  $G_{k-1} A_k = A_1 G_{k-1}$ , 于是(3.3-3)式成立. (3.3-3)式表明,  $A^k$  的一个 QR 分解是  $A^k = G_k H_k$ .

显然, 为了求得  $A$  的特征值, 只需序列  $\{A_k\}$  能够趋向子块上三角矩阵, 且  $A_k$  的对角子块在  $k \rightarrow +\infty$  时收敛到 1 阶或 2 阶的方阵即可, 与非对角子块的元素是否收敛无关. 矩阵的这种收敛性称为本质收敛.

我们不加证明地给出 QR 方法的一个收敛定理.

**定理 3.3-1<sup>①</sup>** 设  $n$  阶方阵  $A$  的  $n$  个特征值  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  满足条件:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n| > 0,$$

记  $X$  为对应于这些特征值的特征向量组成的方阵, 且  $X^{-1}$  可直接三角分解为  $X^{-1} = LR$ , 则由 QR 方法(3.3-1)产生的方阵序列  $\{A_k\}$  本质收敛于上三角矩阵, 其主对角线元素均为  $A$  的特征值. ■

如果  $A$  不满足定理 3.3-1 的假设, 则方阵序列  $\{A_k\}$  不一定本质收敛于上三角矩阵.

## 3.3 QR方法

例 1 用 QR 方法求矩阵  $A$  的特征值, 其中

$$A = \begin{bmatrix} 5 & -2 & -5 & -1 \\ 1 & 0 & -3 & 2 \\ 0 & 2 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}.$$

解  $A$  的特征值是  $-1, 4, 1 \pm 2i$ .

现用 Schmidt 正交化方法进行 QR 分解, 得

$$\begin{aligned} A_1 = A = Q_1 R_1 &= \begin{bmatrix} 0.9806 & -0.0377 & 0.6923 & -0.1038 \\ 0.1961 & 0.1887 & -0.8804 & -0.4192 \\ 0 & 0.9813 & 0.1761 & 0.0740 \\ 0 & 0 & 0.3962 & -0.8989 \end{bmatrix} \\ &= Q_k^{-1} H_k Q_k = \cdots = (Q_1 \cdots Q_k)^{-1} H_1 (Q_1 \cdots Q_k), \end{aligned}$$

即任一  $H_k$  都与  $H_1$  正交相似.

由于当  $H_k$  的元素  $h_{n,n-1}^{(k)} \approx 0$  时,  $h_{m_i}^{(k)} \approx \lambda_n$ , 所以可以选取  $s_k = h_{m_i}^{(k)}$ . 平移量  $s_k$  的另一种

选法是, 在  $\begin{bmatrix} h_{n-1,n-1}^{(k)} & h_{n-1,n}^{(k)} \\ h_{n,n-1}^{(k)} & h_{n,n}^{(k)} \end{bmatrix}$  的两个特征值中选最接近于  $h_{m_i}^{(k)}$  的一个.

当  $A$  有复特征值时, (3.3-4) 式作实数运算是不能收敛于特征值的. Francis 提出一种二重 QR 方法, 以便能用实数运算求得实矩阵的复特征值. 有兴趣的读者请参考有关文献<sup>①</sup>.

# 作业

## 习题 3

1. 利用 Gerschgorin 定理确定方阵

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 5 & 1 \\ -2 & -1 & 9 \end{bmatrix}$$

的特征值的范围. 判断  $\mathbf{A}$  的特征值是否都是实数?

# 计算函数零点和极值点的 迭代法

矩阵论 (11)



廈門大學  
XIAMEN UNIVERSITY



信息学院 黃 燁  
(国家示范性软件学院) 博士·副教授  
School of Informatics Dr. Wei Huang

## 4 计算函数零点和极值点的迭代法

求函数  $f(x)$  的零点, 即方程  $f(x)=0$  的根是一个经典的问题, 特别是确定多项式

$$p(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \cdots + a_{n-1} x + a_n \quad (a_0 \neq 0)$$

的零点, 长期以来是数学工作者关心的问题之一. 在高等数学课程中, 已经讲过一些用导数求函数零点的方法. 这里主要讨论  $f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$  的零点问题, 即解非线性方程组

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$

的问题.

求解上述非线性方程组的问题是与函数的极值问题

$$\min_{x \in \mathbf{R}^n} F(x)$$

密切相关的. 事实上, 如果  $F$  可微, 记

$$f(x) = \left[ \frac{\partial F(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial F(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial F(x)}{\partial x_n} \right]^T,$$

即  $f(x)$  表示函数  $F(x)$  的梯度, 那么  $F(x)$  的极值点是  $f(x)$  的零点. 反过来,  $f(x)$  的零点也是某个函数的最小值点, 例如取  $F(x) = [f(x)]^T f(x)$ .

## 4 计算函数零点和极值点的迭代法

这种极值问题称为无约束优化问题. 更一般也是更重要的是约束最优化问题:  
在约束

$$\begin{cases} h_i(\mathbf{x}) \leq 0, & i = 1, 2, \dots, m, \\ s_j(\mathbf{x}) = 0, & j = 1, 2, \dots, k \ (k < n) \end{cases}$$

下求函数  $F(\mathbf{x})$  的最小值点或最大值点.

解这类约束最优化问题有重要的理论和实际意义, 目前已发展为应用数学重点研究的领域之一, 称为最优化理论与方法.

本章着重讨论解非线性方程组和函数极值问题的迭代法. 至于约束最优化问题的数值解法留待最优化方法课程解决.

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

迭代法是数值计算中一类典型的方法,前面讨论过求解线性方程组和方阵特征值问题的迭代法.但实际问题中更多的是非线性问题,它们又常常归结为非线性方程或非线性方程组的求解问题.

与求解线性方程组的迭代法一样,对于非线性方程组

$$f(x) = 0, \quad (4.1-1)$$

若用迭代法求解,也需要先将方程组(4.1-1)化为便于迭代的等价方程组

$$x = \Phi(x). \quad (4.1-2)$$

例如取  $\Phi(x) = x + \omega f(x)$ , 其中  $\omega \neq 0$  是参数.于是,选择一个初始向量  $x^{(0)}$ ,按迭代公式

$$x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots \quad (4.1-3)$$

产生一个向量序列  $\{x^{(k)}\}$ .如果  $\Phi(\cdot)$  是连续函数,且  $\{x^{(k)}\}$  收敛于  $x^*$ ,则在(4.1-3)式两边取极限,便得  $x^* = \Phi(x^*)$ ,即  $x^*$  满足方程组(4.1-2),从而  $x^*$  也满足方程组(4.1-1),即  $x^*$  是  $f(x)$  的零点.这样的  $x^*$  称为  $\Phi(\cdot)$  的不动点,于是求  $f(x)$  的零点问题等价于求  $\Phi(x)$  的不动点问题.

(4.1-2)式右边的  $\Phi(\cdot)$  称为迭代函数,(4.1-3)式产生的向量序列  $\{x^{(k)}\}$  称为迭代序列.用不同的方法构造迭代函数,便得到不同的迭代法.

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

迭代法的基本问题是：

- 1) 如何构造适当的迭代函数  $\Phi(\cdot)$ , 使得按(4.1-3)式产生的向量序列  $\{x^{(k)}\}$  是收敛的;
- 2) 收敛速度和误差估计;
- 3) 当收敛速度不够快时, 如何加速收敛?

为了叙述清楚和便于理解, 首先讨论一元非线性方程的求解问题.

## 4.1.1 解一元方程的迭代法

对于一元非线性方程  $f(x)=0$ , 其中  $f(x)$  是连续函数, 它的实根可能有多, 因而要把方程的根隔离开, 使  $f(x)$  在区间  $[a, b]$  内有且仅有一个零点. 例如,  $f(x) \in C[a, b]$ ,  $f(a)f(b) < 0$ , 且  $f(x)$  在  $[a, b]$  上是单调增加或单调减小的, 则由高等数学知识,  $f(x)$  在  $[a, b]$  内有且仅有一个根. 为了求出这个根, 按不动点迭代法的要求, 需将  $f(x)=0$  等价地化为  $x=\varphi(x)$ , 但这有多种办法. 例如, 对方程  $f(x)=x^3-x-1=0$ , 就有下列几种等价方程

$$x = \sqrt[3]{1+x}, \quad x = x^3 - 1, \quad x = \frac{x^3 + x - 1}{2}, \quad x = \sqrt{1 + \frac{1}{x}}.$$

我们还可写出其他的等价形式.

由于把  $f(x)=0$  改写成  $x=\varphi(x)$  的形式不唯一, 从而迭代的情况就不同, 按  $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$  产生的序列  $\{x^{(k)}\}$ , 有的收敛较快, 有的收敛较慢, 有的可能不收敛.



# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

**例 1** 用迭代法求方程  $f(x) = x^3 - x - 1 = 0$  在 1.5 附近的根, 初始值取为  $x^{(0)} = 1.5$ .

**解** 取  $\varphi(x) = \sqrt[3]{1+x}$ , 由迭代公式

$$x^{(k+1)} = \sqrt[3]{1+x^{(k)}}$$

得  $x^{(1)} = 1.35721, x^{(2)} = 1.33086, \dots, x^{(9)} = x^{(8)} = 1.32472$ .

因此迭代序列  $\{x^{(k)}\}$  收敛, 且根的近似值为 1.32472.

但若取  $\varphi(x) = x^3 - 1$ , 则由迭代公式

$$x^{(k+1)} = [x^{(k)}]^3 - 1$$

得  $x^{(1)} = 2.375, x^{(2)} = 12.3965, x^{(3)} = 1904.01, \dots$

显然, 迭代序列  $\{x^{(k)}\}$  不收敛.

那么迭代函数  $\varphi(x)$  满足什么样的条件, 才能保证迭代公式  $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$  产生的序列  $\{x^{(k)}\}$  收敛呢? 下述定理回答了这个问题.

**定理 4.1-1** 设  $\varphi(x) \in C[a, b]$ , 且对任意  $x \in [a, b]$  均有  $a \leq \varphi(x) \leq b$ , 则  $\varphi(\cdot)$  在  $[a, b]$  上必有不动点. 进一步设  $\varphi(x) \in C^1[a, b]$ , 且存在正常数  $L < 1$ , 使

$$|\varphi'(x)| \leq L < 1, \quad \forall x \in [a, b], \quad (4.1-4)$$

则迭代法  $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$  对任意  $x^{(0)} \in [a, b]$  均收敛于唯一的不动点  $x^*$ , 并有估计式

$$\begin{cases} |x^{(k)} - x^*| \leq \frac{L}{1-L} |x^{(k)} - x^{(k-1)}|, \\ |x^{(k)} - x^*| \leq \frac{L^k}{1-L} |x^{(1)} - x^{(0)}|. \end{cases} \quad (4.1-5)$$

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

证 若  $\varphi(a)=a$  或  $\varphi(b)=b$ , 则显然  $\varphi(\cdot)$  在  $[a, b]$  上存在不动点. 现设  $\varphi(a)>a$  及  $\varphi(b)<b$ , 定义

$$\psi(x) = \varphi(x) - x,$$

则  $\psi(\cdot) \in C[a, b]$ , 且  $\psi(a) = \varphi(a) - a > 0$ ,  $\psi(b) = \varphi(b) - b < 0$ . 故由连续函数性质知, 一定存在  $x^* \in (a, b)$  使  $\psi(x^*) = \varphi(x^*) - x^* = 0$ , 即  $x^* = \varphi(x^*)$ .

进一步设  $\varphi(\cdot) \in C^1[a, b]$  且满足条件(4.1-4), 若  $\varphi(\cdot)$  有两个不动点  $x_1^*, x_2^* \in [a, b]$ , 则由微分中值定理, 得

$$\begin{aligned} |x_1^* - x_2^*| &= |\varphi(x_1^*) - \varphi(x_2^*)| = |\varphi'(\xi)| |x_1^* - x_2^*| \\ &\leq L |x_1^* - x_2^*| < |x_1^* - x_2^*|. \end{aligned}$$

但这是不可能的, 因此  $\varphi(\cdot)$  只有唯一不动点  $x^*$ .

由  $|x^{(k)} - x^*| = |\varphi(x^{(k-1)}) - \varphi(x^*)| \leq L |x^{(k-1)} - x^*| \leq \dots \leq L^k |x^{(0)} - x^*|$   
及  $0 < L < 1$  知,

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

即  $\{x^{(k)}\}$  收敛于  $x^*$ .

并且由  $|x^{(k)} - x^*| \leq L |x^{(k-1)} - x^*|$  得

$$\begin{aligned} |x^{(k)} - x^*| &\leq L |x^{(k-1)} - x^{(k)} + x^{(k)} - x^*| \\ &\leq L |x^{(k)} - x^{(k-1)}| + L |x^{(k)} - x^*|, \end{aligned}$$

从而有估计式(4.1-5)中的第一个不等式.

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

$$\begin{aligned} \text{又因} \quad |x^{(k)} - x^{(k-1)}| &= |\varphi(x^{(k-1)}) - \varphi(x^{(k-2)})| \leq L |x^{(k-1)} - x^{(k-2)}| \\ &\leq \cdots \leq L^{k-1} |x^{(1)} - x^{(0)}|, \end{aligned}$$

将此代入(4.1-5)式的第一个不等式的右边,即得其中的第二个不等式.

从(4.1-5)式看到,若  $L \approx 1$ ,则收敛是很慢的,这时需要考虑加速收敛的问题.再则,对于给定的  $x^{(0)}$  和绝对误差限  $\epsilon$ , (4.1-5)式中的第一个估计式给出迭代停止的准则,它是后验估计,而(4.1-5)式中的第二个估计式给出达到精度所需的迭代次数,它是先验估计.当然,这样的估计与所确定的  $L$  有关.

一般来说,要构造一个在较大区间上满足定理 4.1-1 条件的迭代函数  $\varphi(\cdot)$  是相当困难的.这种形式的收敛性定理是在  $[a, b]$  上任取一点  $x^{(0)}$  作为初值,迭代都收敛,故称它为全局收敛.若能设法使初值  $x^{(0)}$  充分接近  $x^*$ ,只要迭代函数在  $x^*$  的一个邻域内满足定理 4.1-1 的条件就够了,这就是下述的局部收敛性定理.

**定理 4.1-2** 设  $x^*$  为  $\varphi(\cdot)$  的不动点,  $\varphi'(\cdot)$  在  $x^*$  的某个邻域内连续,且  $|\varphi'(x^*)| < 1$ , 则存在  $\delta > 0$ , 只要  $x^{(0)} \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$ , 迭代法  $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$  收敛.

**证** 由于  $|\varphi'(x^*)| < 1$  及  $\varphi'(x)$  在  $x^*$  的某个邻域内连续,所以存在  $\delta > 0$  使  $[x^* - \delta, x^* + \delta]$  被包含在该邻域内,且对任意  $x \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$  均有  $|\varphi'(x)| \leq q < 1$ . 因此,对任意  $x \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$ ,

$$|\varphi(x) - x^*| = |\varphi(x) - \varphi(x^*)| = |\varphi'(\xi)| |x - x^*| \leq q |x - x^*| < \delta,$$

即对任意  $x \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$ , 有  $x^* - \delta \leq \varphi(x) \leq x^* + \delta$ . 于是,根据定理 4.1-1 知,迭代法  $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$  对任意  $x^{(0)} \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$  收敛.

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

定理 4.1-2 表明,只要  $x^{(0)}$  充分接近  $x^*$ , 且  $|\varphi'(x^{(0)})|$  明显地小于 1, 则迭代法产生的序列  $\{x^{(k)}\}$  就收敛于  $x^*$ .

**例 2** 求方程  $x=e^{-x}$  在 0.5 附近的根.

**解**  $\varphi(x)=e^{-x}$ ,  $|\varphi'(0.5)|=e^{-0.5}\approx 0.61$  明显地小于 1, 所以迭代算式

$$x^{(k+1)} = e^{-x^{(k)}} \quad (k = 0, 1, \dots)$$

应该是收敛的. 事实上计算结果如表 4.1-1 所示.

表 4.1-1

$k$	0	1	2	3	4	...
$x^{(k)}$	0.5	0.60653	0.54524	0.57970	0.56007	...
$k$	0	12	13	14	15	
$x^{(k)}$	0.5	0.56707	0.56718	0.56712	0.56712	

为了刻画迭代序列  $\{x^{(k)}\}$  收敛速度, 引进收敛阶的概念. 它是衡量迭代法优劣的重要标志之一.

**定义 4.1-1** 设迭代序列  $\{x^{(k)}\}$  收敛于  $x^*$ , 记  $e_k = x^{(k)} - x^*$ , 如果存在数  $p \geq 1$  和非零正数  $c$ , 使

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p} = c,$$

则称序列  $\{x^{(k)}\}$  是  $p$  阶收敛的 (或收敛阶是  $p$ ).

当  $p=1, 0 < c < 1$  时, 称为线性收敛; 当  $p > 1$  时称为超线性收敛, 而  $p=2$  时又叫做平方收敛.

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

由于  $|x^{(k+1)} - x^*| = |\varphi(x^{(k)}) - \varphi(x^*)| = |\varphi'(\xi)| \cdot |x^{(k)} - x^*|$ , 其中  $\xi$  在  $x^{(k)}$  与  $x^*$  之间, 因此

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|} = |\varphi'(x^*)|.$$

所以如果  $\varphi'(x^*) \neq 0$ , 则迭代法  $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$  只可能是线性收敛的. 要想得到更高的收敛阶,  $\varphi(\cdot)$  必须满足  $\varphi'(x^*) = 0$ . 这就启发我们可以利用  $\varphi(\cdot)$  在点  $x^*$  处的 Taylor 展开式来判断不动点迭代法局部收敛的阶.

**定理 4.1-3** 设  $x^*$  是  $\varphi(\cdot)$  的不动点,  $p$  是  $\geq 2$  的正整数. 如果  $\varphi^{(p)}(x)$  在  $x^*$  的某个邻域上连续, 且满足

$$\begin{cases} \varphi^{(k)}(x^*) = 0, & k = 1, 2, \dots, p-1, \\ \varphi^{(p)}(x^*) \neq 0, \end{cases} \quad (4.1-6)$$

则迭代序列  $\{x^{(k)}\}$  是  $p$  阶局部收敛的.

**证** 由于  $\varphi'(x^*) = 0$ , 所以迭代序列  $\{x^{(k)}\}$  局部收敛. 现取充分接近  $x^*$  的初始值  $x^{(0)} \neq x^*$ , 则有  $x^{(1)} = \varphi(x^{(0)}) \neq x^*$ . 类似地可知  $x^{(k)} \neq x^*, k=2, 3, \dots$ .

由 Taylor 展开式得

$$\begin{aligned} \varphi(x^{(k)}) &= \varphi(x^*) + \varphi'(x^*)(x^{(k)} - x^*) + \dots \\ &\quad + \frac{\varphi^{(p-1)}(x^*)}{(p-1)!}(x^{(k)} - x^*)^{p-1} + \frac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!}(x^{(k)} - x^*)^p, \end{aligned}$$

其中  $\xi$  在  $x^{(k)}$  与  $x^*$  之间. 从而由 (4.1-6) 式得

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

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

由  $\varphi^{(p)}(x)$  的连续性知, 当  $k \rightarrow +\infty$  时,  $\varphi^{(p)}(\xi) \rightarrow \varphi^{(p)}(x^*) \neq 0$ , 所以  $\{x^{(k)}\}$  是  $p$  阶局部收敛的. ■

**例 3** 用迭代法  $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$  求函数  $f(x)$  的单重零点, 其中  $\varphi(x) = x - r_1(x)f(x) - r_2(x)f^2(x)$ ,  $f(x)$  具有连续二阶导数. 确定未知函数  $r_1(x)$ 、 $r_2(x)$ , 使该迭代法至少是三阶局部收敛的.

**解** 设  $x^*$  是  $f(x)$  的单重零点, 为使该迭代法至少是三阶局部收敛的, 根据定理 4.1-3, 应有  $\varphi'(x^*) = \varphi''(x^*) = 0$ .

$\varphi'(x) = 1 - r_1'(x)f(x) - r_1(x)f'(x) - r_2'(x)f^2(x) - 2r_2(x)f(x)f'(x)$ ,  
于是由  $\varphi'(x^*) = 0$  和  $f(x^*) = 0, f'(x^*) \neq 0$ , 得

$$1 - r_1(x^*)f'(x^*) = 0.$$

因此, 若取  $r_1(x) = \frac{1}{f'(x)}$ , 则有  $\varphi'(x^*) = 0$ .

这时,

$$\begin{aligned} \varphi'(x) &= -r_1'(x)f(x) - r_2'(x)f^2(x) - 2r_2(x)f(x)f'(x), \\ \varphi''(x) &= -r_1''(x)f(x) - r_1'(x)f'(x) - r_2''(x)f^2(x) - 4r_2'(x)f(x)f'(x) \\ &\quad - 2r_2(x)[f'(x)]^2 - 2r_2(x)f(x)f''(x), \end{aligned}$$

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

其中  $r'_1(x) = -\frac{f''(x)}{[f'(x)]^2}$ .

于是, 由  $\varphi''(x^*)=0$  和  $f(x^*)=0, f'(x^*)\neq 0$ , 得

$$\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)} - 2r_2(x^*)[f'(x^*)]^2 = 0,$$

因此若取  $r_2(x) = \frac{f''(x)}{2[f'(x)]^3}$ , 则有  $\varphi''(x^*)=0$ .

因此, 取 
$$r_1(x) = \frac{1}{f'(x)} \quad \text{和} \quad r_2(x) = \frac{f''(x)}{2[f'(x)]^3}$$

能使迭代法  $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$  至少三阶局部收敛.

一般说来, 线性收敛的速度是不够满意的, 因此要讨论加速收敛的方法.

设  $x^*$  是  $\varphi(\cdot)$  的不动点, 迭代法  $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$  产生的序列  $\{x^{(k)}\}$  收敛于  $x^*$ , 则由中值定理得

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} - x^* &= \varphi(x^{(k)}) - \varphi(x^*) = \varphi'(\xi_1)(x^{(k)} - x^*), \\ x^{(k+2)} - x^* &= \varphi(x^{(k+1)}) - \varphi(x^*) = \varphi'(\xi_2)(x^{(k+1)} - x^*), \end{aligned}$$

其中  $\xi_1$  在  $x^{(k)}$  与  $x^*$  之间,  $\xi_2$  在  $x^{(k+1)}$  与  $x^*$  之间. 由于  $\{x^{(k)}\}$  收敛于  $x^*$ , 所以当充分大时,  $\varphi'(\xi_1) \approx \varphi'(\xi_2)$ , 故有

$$\frac{x^{(k+2)} - x^*}{x^{(k+1)} - x^*} \approx \frac{x^{(k+1)} - x^*}{x^{(k)} - x^*}.$$

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

由这个近似等式可解得

$$x^* \approx x^{(k+2)} - \frac{(x^{(k+2)} - x^{(k+1)})^2}{x^{(k+2)} - 2x^{(k+1)} + x^{(k)}}. \quad (4.1-7)$$

于是,在计算了  $x^{(k)}$ 、 $x^{(k+1)}$ 、 $x^{(k+2)}$  后,可用(4.1-7)式右边作为  $x^*$  的一个新的近似值,它是  $x^{(k+2)}$  的一个修正值,记为  $\hat{x}^{(k+2)}$ . 下面证明序列  $\{\hat{x}^{(k)}\}$  比  $\{x^{(k)}\}$  收敛快.

**定理 4.1-4** 设  $\{x^{(k)}\}$  是线性收敛于  $x^*$  的序列且对任何  $k \geq 0$ , 均有  $e_k = x^{(k)} - x^* \neq 0$ , 并且  $\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{e_{k+1}}{e_k} = \lambda, |\lambda| < 1$ , 则有

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\hat{x}^{(k+2)} - x^*}{x^{(k)} - x^*} = 0.$$

证 由  $\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{e_{k+1}}{e_k} = \lambda$  得  $e_{k+1} = (\lambda + \varepsilon_k)e_k$ , 其中  $\varepsilon_k$  满足  $\lim_{k \rightarrow +\infty} \varepsilon_k = 0$ . 又因为

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} - x^{(k)} &= e_{k+1} - e_k = [(\lambda - 1) + \varepsilon_k]e_k, \\ x^{(k+2)} - 2x^{(k+1)} + x^{(k)} &= (x^{(k+2)} - x^{(k+1)}) - (x^{(k+1)} - x^{(k)}) \\ &= [(\lambda - 1) + \varepsilon_{k+1}]e_{k+1} - [(\lambda - 1) + \varepsilon_k]e_k \\ &= \{[(\lambda - 1) + \varepsilon_{k+1}](\lambda + \varepsilon_k) - (\lambda + \varepsilon_k) + 1\}e_k \\ &= [(\lambda - 1)^2 + \mu_k]e_k, \end{aligned}$$

其中  $\mu_k = \lambda\varepsilon_{k+1} + (\lambda - 2)\varepsilon_k + \varepsilon_{k+1}\varepsilon_k$ . 显然  $\lim_{k \rightarrow +\infty} \mu_k = 0$ .



## 4.1

由于

$$\begin{aligned} x^{(k+2)} - \frac{(x^{(k+2)} - x^{(k+1)})^2}{x^{(k+2)} - 2x^{(k+1)} + x^{(k)}} &= \frac{[x^{(k+2)}x^{(k)} - (x^{(k+1)})^2]}{x^{(k+2)} - 2x^{(k+1)} + x^{(k)}} \\ &= x^{(k)} - \frac{(x^{(k+1)} - x^{(k)})^2}{x^{(k+2)} - 2x^{(k+1)} + x^{(k)}}, \end{aligned}$$

所以有

$$\hat{x}^{(k+2)} - x^* = x^{(k)} - x^* - \frac{(x^{(k+1)} - x^{(k)})^2}{x^{(k+2)} - 2x^{(k+1)} + x^{(k)}} = e_k - e_k \frac{[(\lambda - 1) + \varepsilon_k]^2}{[(\lambda - 1)^2 + \mu_k]}.$$

因此

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\hat{x}^{(k+2)} - x^*}{x^{(k)} - x^*} = \lim_{k \rightarrow +\infty} \left\{ 1 - \frac{[(\lambda - 1) + \varepsilon_k]^2}{[(\lambda - 1)^2 + \mu_k]} \right\} = 0.$$

值得指出的是, (4.1-7) 式与 3.2 节中的 (3.2-7) 式完全类似, 故它是 Aitken 加速法.

如果记  $\tilde{x}^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$ ,  $\bar{x}^{(k+1)} = \varphi(\tilde{x}^{(k+1)})$ , 而把  $x^{(k)}$ 、 $\tilde{x}^{(k+1)}$ 、 $\bar{x}^{(k+1)}$  用 Aitken 加速公式 (4.1-7) 右边算得的值作为  $x^{(k+1)}$ , 那么从  $x^{(k)}$  到  $x^{(k+1)}$  算完成一次迭代, 则其计算公式为

$$\begin{cases} \tilde{x}^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)}), \\ \bar{x}^{(k+1)} = \varphi(\tilde{x}^{(k+1)}), \\ x^{(k+1)} = \bar{x}^{(k+1)} - \frac{(\bar{x}^{(k+1)} - \tilde{x}^{(k+1)})^2}{\bar{x}^{(k+1)} - 2\tilde{x}^{(k+1)} + x^{(k)}}, \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots. \quad (4.1-8)$$

这种把 Aitken 加速法与不动点迭代法相结合的方法,称为 **Steffensen 迭代法**.

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

**例 4** 用迭代法和 Steffensen 迭代法求函数  $f(x) = x - \ln x - 2$  在区间  $(2, +\infty)$  内的零点, 取  $x^{(0)} = 3$ .

**解** 将  $f(x) = 0$  化为等价的方程

$$x = 2 + \ln x.$$

由于  $\varphi(x) = 2 + \ln x$  的导数  $\varphi'(x) = \frac{1}{x}$  在  $[2, +\infty)$  上满足  $|\varphi'(x)| \leq \frac{1}{2} < 1$ , 且  $2 < \varphi(x) < +\infty$ , 所以迭代法  $x^{(k+1)} = 2 + \ln x^{(k)}$  收敛.

Steffensen 迭代法的计算公式是

$$\begin{cases} \tilde{x}^{(k+1)} = 2 + \ln(x^{(k)}), \\ \bar{x}^{(k+1)} = 2 + \ln(\tilde{x}^{(k+1)}), \\ x^{(k+1)} = \bar{x}^{(k+1)} - \frac{(\bar{x}^{(k+1)} - \tilde{x}^{(k+1)})^2}{\bar{x}^{(k+1)} - 2\tilde{x}^{(k+1)} + x^{(k)}}. \end{cases}$$

从  $x^{(0)} = 3$  出发, 它们的结果如表 4.1-2 所示. 比较所得结果可以看出, Steffensen 迭代法比简单迭代法收敛得快.

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

表 4.1-2

$k$	简单迭代法	Steffensen 迭代法		
	$x^{(k)}$	$x^{(k)}$	$\tilde{x}^{(k+1)}$	$\bar{x}^{(k+1)}$
0	3	3	3.098612289	3.130954363
1	3.098612289	3.146738373	3.146366479	3.146248288
2	3.130954363	3.146193227	3.146193223	3.146293221
3	3.141337866	3.146193227		
4	3.144648781			
5	3.145702209			
6	3.146037143			

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

## 4.1.2 解非线性方程组的迭代法

关于非线性方程组(4.1-2)的解的存在和唯一性问题,以及由迭代公式(4.1-3)产生的向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 的收敛性,有下述著名的压缩映射原理.

**定理 4.1-5** 设  $\Phi(x)$  在闭域  $\bar{G} \subset \mathbb{R}^n$  上满足条件:

1) 存在常数  $q, 0 < q < 1$ , 使得对一切  $x, y \in \bar{G}$  均有

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq q \|x - y\|, \quad (4.1-9)$$

2) 对一切  $x \in \bar{G}$ , 均有  $\Phi(x) \in \bar{G}$  (即  $\Phi(\bar{G}) \subseteq \bar{G}$ ),

则  $\Phi(\cdot)$  存在唯一的不动点  $x^* \in \bar{G}$ , 并且对任意  $x^{(0)} \in \bar{G}$ , 由(4.1-3)式产生的向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于  $x^*$ , 且有估计式

$$\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{q}{1-q} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|, \quad (4.1-10)$$

$$\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{q^k}{1-q} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|. \quad (4.1-11)$$

证 因  $x^{(0)} \in \bar{G}$  和  $\Phi(\bar{G}) \subseteq \bar{G}$  知,  $x^{(1)} = \Phi(x^{(0)}) \in \bar{G}$ . 同理可证, 对一切正整数  $k, x^{(k)} \in \bar{G}$ .

又由(4.1-9)式, 得

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| = \|\Phi(x^{(k)}) - \Phi(x^{(k-1)})\| \leq q \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|,$$

从而对任意正整数  $l$ , 有

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

$$\begin{aligned}
 \|x^{(k+l)} - x^{(k)}\| &\leq \sum_{i=1}^l \|x^{(k+i)} - x^{(k+i-1)}\| \leq (q^{l-1} + \cdots + q + 1) \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \\
 &\leq \frac{1}{1-q} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \frac{q^k}{1-q} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|.
 \end{aligned} \quad (4.1-12)$$

因为  $0 < q < 1$ , 所以当  $k$  充分大时,  $\|x^{(k+l)} - x^{(k)}\|$  可任意小, 从而  $\{x^{(k)}\}$  是 Cauchy 序列. 又因  $\bar{G}$  是闭域, 故由 Cauchy 收敛原理<sup>①</sup>知,  $\{x^{(k)}\}$  收敛,  $\lim_{k \rightarrow +\infty} x^{(k)} = x^*$ , 且  $x^* \in \bar{G}$ .

又由(4.1-9), 得

$$\begin{aligned}
 \|\Phi(x^*) - x^*\| &\leq \|\Phi(x^*) - \Phi(x^{(k)})\| + \|\Phi(x^{(k)}) - x^*\| \\
 &\leq q \|x^{(k)} - x^*\| + \|x^{(k+1)} - x^*\|,
 \end{aligned}$$

令  $k \rightarrow +\infty$ , 则由  $\|x^{(k)} - x^*\| \rightarrow 0$  知  $\|\Phi(x^*) - x^*\| = 0$ , 即  $x^* = \Phi(x^*)$ , 也就是说  $x^*$  是  $\Phi(\cdot)$  的不动点.

至于  $x^*$  的唯一性以及估计式(4.1-10)和(4.1-11)的证明, 与定理 4.1-1 的证明类同, 这里不做详细证明.

定理 4.1-5 除了要求迭代函数  $\Phi(\cdot)$  满足压缩条件(4.1-9)式外, 还要求条件  $\Phi(\bar{G}) \subseteq \bar{G}$ . 这后一条件是为了保证由(4.1-3)式产生的一切  $x^{(k)}$  ( $k=1, 2, \dots$ ) 均属于  $\bar{G}$ . 事实上, 只要选择初始向量  $x^{(0)}$ , 确定这样的  $\delta > 0$ , 使  $\|\Phi(x^{(0)}) - x^{(0)}\| \leq \delta(1-q)$ , 那么就有

$$\begin{aligned}
 \|x^{(k)} - x^{(0)}\| &\leq \sum_{i=1}^k \|x^{(i)} - x^{(i-1)}\| \leq (q^{k-1} + \cdots + q + 1) \|x^{(1)} - x^{(0)}\| \\
 &\leq (1 + q + \cdots + q^{k-1})(1-q)\delta = (1 - q^k)\delta < \delta.
 \end{aligned}$$

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

因此,令  $\bar{G} = \{x \mid \|x - x^{(0)}\| \leq \delta\}$ , 它是一个闭域, 则对一切  $x^{(k)} (k=1, 2, \dots)$ , 均有  $x^{(k)} \in \bar{G}$ , 从而  $\Phi(\bar{G}) \subseteq \bar{G}$ .

另外, 如果  $\Phi(x) = [\varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)]^T$  的每个分量  $\varphi_i(x)$  都在  $\bar{G}$  上可微, 将  $\Phi(x)$  的 Jacobi 矩阵记为

$$D\Phi(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_n} \end{bmatrix},$$

则压缩条件(4.1-9)式同样可以用下条件替代:

对一切  $x \in \bar{G} = \{x \mid \|x - x^{(0)}\| \leq \delta\}$ , 均有  $\|D\Phi(x)\| \leq q < 1$ .

从上述讨论可知, 不动点迭代法是线性收敛的, 收敛速度不够理想. 特别当  $q$  小于 1 但很接近 1 时, 收敛很慢. 加速方法可参阅王德人编《非线性方程组解法与最优化方法》.

**例 5** 用不动点迭代法求非线性方程

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = e^{x_1} + x_2 - 1 = 0, \\ f_2(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 4 = 0 \end{cases}$$

在闭域  $\bar{G}: |x_1 - 1| \leq \frac{1}{4}, |x_2 + \frac{3}{2}| \leq \frac{1}{2}$  内的根.

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

解 闭域  $\bar{G}$  可改写成  $\frac{3}{4} \leq x_1 \leq \frac{5}{4}, -2 \leq x_2 \leq -1$ .

将原方程组化为等价的方程组

$$\begin{cases} x_1 = \ln(1 - x_2), \\ x_2 = -\sqrt{4 - x_1^2}. \end{cases} \quad (4.1-13)$$

取  $x_1^{(0)} = 1, x_2^{(0)} = -1.5$ , 按迭代公式

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \ln(1 - x_2^{(k)}), \\ x_2^{(k+1)} = -\sqrt{4 - (x_1^{(k)})^2}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

产生的序列  $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$  收敛. 因为其迭代函数为

$$\Phi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \varphi_1(x_1, x_2) \\ \varphi_2(x_1, x_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ln(1 - x_2) \\ -\sqrt{4 - x_1^2} \end{bmatrix},$$

它的 Jacobi 矩阵是  $D\Phi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{1 - x_2} \\ \frac{x_1}{\sqrt{4 - x_1^2}} & 0 \end{bmatrix}.$

由于在闭域  $\bar{G}$  上, 有

$$0 + \left| -\frac{1}{1 - x_2} \right| \leq \frac{1}{2}, \quad \left| \frac{x_1}{\sqrt{4 - x_1^2}} \right| + 0 \leq \frac{5}{\sqrt{39}} < 1,$$

# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

所以在闭域  $\bar{G}$  上  $\|D\Phi(\mathbf{x})\|_{\infty} \leq \max\left\{\frac{1}{2}, \frac{5}{\sqrt{39}}\right\} = \frac{5}{\sqrt{39}} < 1$ ,

故  $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$  收敛. 计算结果如表 4.1-3 所示.

表 4.1-3

$k$	0	1	2	3	4	...
$x_1^{(k)}$	1	0.916290731	1.005052539	1.021642891	1.003980635	...
$x_2^{(k)}$	-1.5	-1.732050808	-1.777754565	-1.729123881	-1.719373666	...

若将原方程组化为等价方程组

$$\begin{cases} x_1 = \sqrt{4 - x_2^2}, \\ x_2 = 1 - e^{x_1}, \end{cases}$$

则由于迭代函数的 Jacobi 矩阵是

$$\begin{bmatrix} 0 & \frac{-x_2}{\sqrt{4 - x_2^2}} \\ -e^{x_1} & 0 \end{bmatrix},$$

它在  $\bar{G}$  上任一点  $[x_1, x_2]^T$  的谱半径大于 1 (为什么?), 所以按不动点迭代法产生的序列  $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$  未必收敛.



# 4.1 不动点迭代法及其收敛性

也可以对等价方程组(4.1-13)采用 Seidel 迭代法,其迭代算式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \ln(1 - x_2^{(k)}), \\ x_2^{(k+1)} = -\sqrt{4 - (x_1^{(k+1)})^2}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots.$$

计算结果如表 4.1-4 所示.

表 4.1-4

$k$	0	1	2	3	4	5
$x_1^{(k)}$	1	0.916290731	1.021642891	1.000401584	1.004967648	1.003998714
$x_2^{(k)}$	-1.5	-1.777754565	-1.719373666	-1.731818891	-1.729173221	-1.729735986

## 4.2 Newton迭代法及其变形

对于非线性方程组(4.1-1),比较常用的构造迭代函数  $\Phi(x)$  的方法是线性化方法,即若  $f(x)=[f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x)]^T$  在点  $x^{(k)}$  处可微,把各个  $f_i(x) (i=1, 2, \dots, n)$  在点  $x^{(k)}$  处展开,用线性函数  $f_i(x^{(k)}) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_j} (x_j - x_j^{(k)})$  近似替代  $f_i(x)$ ,得到线性

$$\text{方程组} \quad f_i(x^{(k)}) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_j} (x_j - x_j^{(k)}) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

$$\text{其矩阵形式是} \quad f(x^{(k)}) + Df(x^{(k)})(x - x^{(k)}) = 0, \quad (4.2-1)$$

其中  $Df(x^{(k)})$  是  $f(x)$  在点  $x^{(k)}$  处的 Jacobi 矩阵.

当  $Df(x^{(k)})$  可逆时,用(4.2-1)式的解作为非线性方程组(4.1-1)的第  $k+1$  次近似解  $x^{(k+1)}$ ,即

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - [Df(x^{(k)})]^{-1} f(x^{(k)}). \quad (4.2-2)$$

(4.2-2)式是一个迭代算式,称为解方程组(4.1-1)的 **Newton 迭代公式**. 因此,Newton 法是逐步线性化方法的典型代表.

从(4.2-2)式不难看出,Newton 法的迭代函数是  $\Phi(x) = x - [Df(x)]^{-1} f(x)$ .

但是,由于求逆矩阵比较麻烦,所以对于多元非线性方程组,一般直接解线性方程组  $Df(x^{(k)})\Delta x^{(k)} = -f(x^{(k)})$  求得  $\Delta x^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$ . 从而实用的 Newton 迭代公式为

$$\begin{cases} Df(x^{(k)})\Delta x^{(k)} = -f(x^{(k)}), \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x^{(k)}, \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots. \quad (4.2-3)$$

特别地,对于一元非线性方程  $f(x)=0$  来说,(4.2-1)式简化为

## 4.2 Newton迭代法及其变形

$$f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})(x - x^{(k)}) = 0,$$

因而(4.2-2)式相应地简化为

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}, \quad (4.2-4)$$

其迭代函数为

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}. \quad (4.2-5)$$

若  $x^*$  是  $f(x)$  的单重零点, 即  $f(x^*) = 0, f'(x^*) \neq 0$ , 那么, 由于  $\varphi'(x^*) = \frac{f(x^*)f''(x^*)}{[f'(x^*)]^2} = 0, \varphi''(x^*) = \frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}$  一般不为零, 所以 Newton 法是局部二阶收敛的.

**例 1** 用 Newton 法求非线性方程  $f(x) = xe^x - 1 = 0$  在  $(0, 1)$  内的根, 取  $x^{(0)} = 0.5$ .

**解** 因  $f'(x) = (1+x)e^x$ , 故由(4.2-4)式得

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{x^{(k)} \cdot e^{x^{(k)}} - 1}{(1+x^{(k)})e^{x^{(k)}}}, \quad k = 0, 1, \dots$$

从  $x^{(0)} = 0.5$  出发, 计算结果如表 4.2-1 所示.

表 4.2-1

$k$	0	1	2	3	4
$x^{(k)}$	0.5	0.571020439	0.567155568	0.56714329	0.56714329

尽管  $x^{(0)}$  是很粗略的, 但  $x^{(3)}$  已有八位有效数字. 可见 Newton 法收敛是相当快的.

## 4.2 Newton迭代法及其变形

当  $x^*$  是  $f(x)=0$  的重根时,不妨设为  $m$  重根,这时  $f(x)=(x-x^*)^m g(x)$ , 且  $g(x^*) \neq 0$ , 其中  $m \geq 2$ .

由于  $f'(x) = m(x-x^*)^{m-1}g(x) + (x-x^*)^m g'(x)$ , 所以若令  $x = x^* + h$ , 则由 (4.2-5) 式及  $x^* = \varphi(x^*)$  得

$$\begin{aligned}\varphi(x^* + h) &= x^* + h - \frac{h^m g(x^* + h)}{mh^{m-1}g(x^* + h) + h^m g'(x^* + h)} \\ &= \varphi(x^*) + h - \frac{h^m g(x^* + h)}{mh^{m-1}g(x^* + h) + h^m g'(x^* + h)}.\end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned}\varphi'(x^*) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\varphi(x^* + h) - \varphi(x^*)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \left( 1 - \frac{h^{m-1}g(x^* + h)}{mh^{m-1}g(x^* + h) + h^m g'(x^* + h)} \right) \\ &= 1 - \frac{1}{m}.\end{aligned}$$

当  $m \geq 2$  时,  $\varphi'(x^*) \neq 0$  但  $|\varphi'(x^*)| < 1$ , 故 Newton 法是一阶收敛的. 容易看出, 这时, 若取  $\varphi(x) = x - m \frac{f(x)}{f'(x)}$ , 则从上述分析可知  $\varphi'(x^*) = 0$ . 因此, 若预先知道  $x^*$  的重数  $m$ , 则可将 (4.2-4) 式修改为

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - m \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}. \quad (4.2-6)$$

则由此产生的序列  $\{x^{(k)}\}$  是二阶收敛的.

## 4.2 Newton迭代法及其变形

另外一个修改方法是,令  $\mu(x) = \frac{f(x)}{f'(x)}$ , 那么,若  $x^*$  是  $f(x)$  的  $m$  重零点,则因  $x^*$  是  $\mu(x)$  的单重零点,故将 Newton 法应用于  $\mu(x)$ ,得

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{\mu(x^{(k)})}{\mu'(x^{(k)})} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})f'(x^{(k)})}{[f'(x^{(k)})]^2 - f(x^{(k)})f''(x^{(k)})}. \quad (4.2-7)$$

它所产生的序列是二阶收敛的.

**例 2**  $\sqrt{2}$  是方程  $f(x) = x^4 - 4x^2 + 4 = 0$  的二重根,用下列三种方法求解.

(1) 用 Newton 法求解  $x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{(x^{(k)})^2 - 2}{4x^{(k)}}$ ;

(2) 用  $m=2$  时 (4.2-6) 式给出的方法求解  $x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{(x^{(k)})^2 - 2}{2x^{(k)}}$ ;

(3) 用 (4.2-7) 式所确定的方法求解  $x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{x^{(k)}[(x^{(k)})^2 - 2]}{(x^{(k)})^2 + 2}$ .

三种方法均取  $x_0 = 1.5$ , 计算结果如表 4.2-2 所示.

表 4.2-2

$x^{(k)}$ \ $k$	0	1	2	3
方法				
方法 1	1.5	1.458333333	1.436607143	1.425497619
方法 2	1.5	1.416666667	1.414215686	1.414213562
方法 3	1.5	1.411764706	1.414211438	1.414213562

## 4.2 Newton迭代法及其变形

经过三次迭代,用方法 2 和方法 3 都达到了  $10^{-9}$  的精度. 但由于方法 1 是一阶收敛的,所以要进行约 30 次迭代才能得到与方法 2、方法 3 相同的结果.

下面讨论 Newton 法迭代公式(4.2-2)产生的序列  $\{x^{(k)}\}$  的局部收敛性及其收敛速度.

**定理 4.2-1** 设  $x^*$  是  $f(x)$  的零点,  $f(x)$  在  $x^*$  的某个邻域  $N$  内二次连续可微,且  $Df(x^*)$  可逆,则存在闭球  $S = \{x \mid \|x - x^*\| \leq \delta, \delta > 0\} \subset N$ , 由  $S$  内任一点  $x^{(0)}$  出发,按公式(4.2-2)产生的序列  $\{x^{(k)}\}$  被包含在  $S$  内,且有  $\|x^{(k+1)} - x^*\| \leq C \|x^{(k)} - x^*\|^2$ , 其中  $C$  是与  $k$  无关的正常数.

**证** 由于  $Df(x)$  在  $x^*$  处连续,且  $Df(x^*)$  可逆,故存在  $\delta > 0$ , 使  $Df(x)$  在  $S = \{x \mid \|x - x^*\| \leq \delta\} \subset N$  上可逆,并且  $f(x)$  在  $S$  上二次连续可微.

由于  $f(x^*) = 0$ , 故若  $x^{(k)} \in S$ , 则有

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} - x^* &= x^{(k)} - x^* - [Df(x^{(k)})]^{-1} [f(x^{(k)}) - f(x^*)] \\ &= [Df(x^{(k)})]^{-1} [f(x^*) - f(x^{(k)}) + Df(x^{(k)})(x^{(k)} - x^*)], \end{aligned}$$

从而

$$\begin{aligned} \|x^{(k+1)} - x^*\| &\leq \| [Df(x^{(k)})]^{-1} \| \| f(x^*) - f(x^{(k)}) + Df(x^{(k)})(x^{(k)} - x^*) \| \\ &\leq \max_{0 \leq t \leq 1} \| D^2 f(x^* + t(x^{(k)} - x^*)) \| \cdot \| [Df(x^{(k)})]^{-1} \| \| x^{(k)} - x^* \|^2. \quad \textcircled{1} \end{aligned}$$

(4.2-8)

## 4.2 Newton迭代法及其变形

由于  $f(x)$  在  $S$  上二次连续可微,  $[Df(x)]^{-1}$  在  $S$  上连续, 所以存在常数  $M$  和  $C$ , 使

$$\max_{0 \leq t \leq 1} \| D^2 f(x^* + t(x^{(k)} - x^*)) \| \leq M, \quad \| [Df(x^{(k)})]^{-1} \| \leq \frac{C}{M},$$

其中  $M$  和  $C$  与  $k$  无关. 从而由(4.2-8)式得

$$\| x^{(k+1)} - x^* \| \leq C \| x^{(k)} - x^* \|^2.$$

只要  $\delta$  充分小, 使  $C\delta \leq 1$ , 则由上式知  $\| x^{(1)} - x^* \| \leq C \| x^{(0)} - x^* \|^2 \leq C\delta^2 \leq \delta$ , 故  $x^{(1)} \in S$ , 于是由归纳法可知, 对一切正整数  $k$ , 均有  $x^{(k)} \in S$ .

因此, Newton 法是局部二阶收敛的.

**例 3** 用 Newton 法求非线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3 = 0, \\ 2x_1^2 + x_2^2 - 5 = 0 \end{cases}$$

在点  $(1.5, 1)$  附近的根.

解  $f(x) = \begin{bmatrix} x_1 + 2x_2 - 3 \\ 2x_1^2 + x_2^2 - 5 \end{bmatrix}, \quad Df(x) = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 4x_1 & 2x_2 \end{bmatrix}.$

按(4.2-3)式有 
$$\begin{cases} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 4x_1^{(k)} & 2x_2^{(k)} \end{bmatrix} \Delta x^{(k)} = - \begin{bmatrix} x_1^{(k)} + 2x_2^{(k)} - 3 \\ 2(x_1^{(k)})^2 + (x_2^{(k)})^2 - 5 \end{bmatrix}, \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x^{(k)}. \end{cases}$$

从  $x^{(0)} = [1.5, 1]^T$  出发, 计算结果如表 4.2-3 所示.

## 4.2 Newton迭代法及其变形

表 4.2-3

$k$	0	1	2	3	4
$\mathbf{x}^{(k)}$	$\begin{bmatrix} 1.5 \\ 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.5000 \\ 0.75000 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.4881 \\ 0.75595 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.4880 \\ 0.75598 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.4880 \\ 0.75598 \end{bmatrix}$

从例 3 看出, Newton 法收敛很快, 因为它具有二阶收敛速度, 但要求  $\mathbf{x}^{(0)}$  充分靠近  $\mathbf{x}^*$  才能保证它的收敛性. 如果初始向量  $\mathbf{x}^{(0)}$  选择不当, 则可能不收敛. 再则, Newton 法每一步都要计算 Jacobi 矩阵  $Df(\mathbf{x}^{(k)})$  和解线性方程组  $Df(\mathbf{x}^{(k)})\Delta\mathbf{x}^{(k)} = -f(\mathbf{x}^{(k)})$ , 并且当  $Df(\mathbf{x}^{(k)})$  不可逆时, Newton 法无法继续迭代. 针对它的这些缺点, 人们提出各种改进办法. 我们将在 4.3 节讨论的变尺度法就是为了解决上述后两个缺点的. 这里讲一下带松弛因子的 Newton 法, 即所谓 **Newton 下山法**.

为了改善对初始值的要求, 在迭代公式 (4.2-2) 或 (4.2-3) 中引入松弛因子  $\omega_k$ , 这时迭代公式为

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \omega_k [Df(\mathbf{x}^{(k)})]^{-1} f(\mathbf{x}^{(k)})$$

$$\text{或} \quad Df(\mathbf{x}^{(k)})\Delta\mathbf{x}^{(k)} = -\omega_k f(\mathbf{x}^{(k)}). \quad (4.2-9)$$

松弛因子  $\omega_k$  的选取应满足

$$\|f(\mathbf{x}^{(k+1)})\| < \|f(\mathbf{x}^{(k)})\|, \quad (4.2-10)$$

即  $\|f(\mathbf{x})\|$  (例如  $f^T(\mathbf{x})f(\mathbf{x})$ ) 是严格单调减小的, 且  $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$  收敛于  $f(\mathbf{x})$  的零点.



## 4.2 Newton迭代法及其变形

通常选取  $\omega_k$  的办法是,依次令  $\omega_k = 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2^2}, \dots$  进行试探,直至(4.2-10)式满足,再进行下一次迭代. 如果这样选不到满足(4.2-10)式的  $\omega_k$ ,则 Newton 下山法失败.

另一种选取  $\omega_k$  的办法是进行一维搜索,即求

$$\min_{\omega > 0} \| f[\mathbf{x}^{(k)} - \omega(Df(\mathbf{x}^{(k)}))^{-1}f(\mathbf{x}^{(k)})] \|$$

的最小值点  $\omega^*$ . 这样迫使序列  $\{ \| f(\mathbf{x}^{(k)}) \| \}$  严格单调下降,从而从某个  $\mathbf{x}^{(k)}$  开始进入  $\mathbf{x}^*$  的附近.

**例 4** 对于非线性方程组

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = x_1^3 - x_2^2 - 1 = 0, \\ f_2(x_1, x_2) = x_1 x_2^3 - x_2 - 4 = 0, \end{cases}$$

取  $\mathbf{x}^{(0)} = [0.5, 1]^T$ , 若用 Newton 法,得

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} x_1^{(1)} \\ x_2^{(1)} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \end{bmatrix} - [Df(\mathbf{x}^{(0)})]^{-1} \begin{bmatrix} f_1(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) \\ f_2(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0.5 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.210526315 & 0.842105263 \\ -0.421052631 & 0.315789473 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1.875 \\ -4.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.684210524 \\ 1.631578945 \end{bmatrix}, \\ f_1(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}) &= 99.11809287, \quad f_2(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}) = -1.288234453, \\ \| f(\mathbf{x}^{(1)}) \|_{\infty} &> \| f(\mathbf{x}^{(0)}) \|_{\infty}, \end{aligned}$$

可见迭代下去不会收敛.

## 4.2 Newton迭代法及其变形

现用 Newton 下山法, 取  $\omega_0 = 0.25$ , 则由迭代公式(4.2-9)得,

$$\begin{bmatrix} x_1^{(1)} \\ x_2^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 1 \end{bmatrix} - 0.25 \begin{bmatrix} 0.210526315 & 0.842105263 \\ -0.42105263 & 0.315789473 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1.875 \\ -4.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.546052631 \\ 1.157894737 \end{bmatrix},$$

$$f_1(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}) = 1.354776509, \quad f_2(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}) = -2.757782707,$$

$$\|f(x^{(1)})\|_{\infty} < \|f(x^{(0)})\|_{\infty}.$$

### Newton 法的算法

用  $\|f(x^{(k)})\| < \epsilon$  或  $\|\Delta x^{(k)}\| / \|x^{(k)}\| < \epsilon$  作为终止迭代的准则, 最大迭代次数为  $N_{\max}$ .

1) 对于  $k=0, 1, 2, \dots, N_{\max}$ , 做①~⑥:

① 计算  $f(x^{(0)}) \Rightarrow f_0$ .

② 若  $\|f_0\| < \epsilon$ , 则  $x^{(0)} \Rightarrow x$ , 输出信息“ $\|f\|$  已很小”, 停机.

③ 计算  $Df(x^{(0)}) \Rightarrow Df_0$ .

④ 解线性方程组

$$Df_0 \Delta x^{(0)} = -f_0.$$

⑤ 若  $\|\Delta x^{(0)}\| < \epsilon \|x^{(0)}\|$ , 则  $x^{(0)} + \Delta x^{(0)} \Rightarrow x$ , 输出信息“ $\|\Delta x^{(0)}\|$  已足够小”, 停机.

⑥  $x \Rightarrow x^{(1)}$ .

2) 输出信息“ $N_{\max}$ 次迭代后仍不收敛”.

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

现在讨论求函数  $F(\mathbf{x})$  的最小值问题, 即确定  $\mathbf{x}^* \in \mathbf{R}^n$ , 使  $F(\mathbf{x}^*) = \min_{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n} F(\mathbf{x})$ , 记  $\mathbf{x}^* =$

$\arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n} F(\mathbf{x})$ .

设  $F(\cdot)$  具有二阶连续偏导数, 用  $\mathbf{g}(\mathbf{x})$  记  $F(\mathbf{x})$  的梯度,  $\mathbf{H}(\mathbf{x})$  记  $F(\mathbf{x})$  的二阶偏导数所组成  $n \times n$  矩阵, 即  $\mathbf{H}(\mathbf{x})$  是  $F(\mathbf{x})$  的 Hesse 矩阵:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial F(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 F(\mathbf{x})}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 F(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 F(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 F(\mathbf{x})}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}.$$

所谓下降迭代法是指, 给出初始点  $\mathbf{x}^{(0)}$ , 构造使  $F(\mathbf{x})$  逐步严格下降的迭代算式, 即要求

$$F(\mathbf{x}^{(k+1)}) < F(\mathbf{x}^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots.$$

具体地说, 设已经迭代到点  $\mathbf{x}^{(k)}$ , 那么下一次迭代将有两种情况之一发生, 要么从  $\mathbf{x}^{(k)}$  出发沿任何方向移动,  $F(\mathbf{x})$  都不再严格减小, 这时按极小值点的定义,  $\mathbf{x}^{(k)}$  是局部最小值点, 迭代终止; 要么至少有一个方向使  $F(\mathbf{x})$  严格减小. 这时, 从这些方向中选择一个下降方向  $\mathbf{p}_k$ , 沿这个方向适当地移动一步, 即在射线  $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(k)} + t\mathbf{p}_k (t > 0)$  上适当地确定一个点

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + t_k \mathbf{p}_k \quad (4.3-1)$$

$$\text{使} \quad F(\mathbf{x}^{(k+1)}) = F(\mathbf{x}^{(k)} + t_k \mathbf{p}_k) < F(\mathbf{x}^{(k)}). \quad (4.3-2)$$

这样就完成了第  $k+1$  次迭代, 其中  $t_k$  称为步长因子.

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

如果这种下降迭代法所产生的序列 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ 收敛于 $\mathbf{x}^*$ ,则这个方法是有效的,否则是无效的.

在迭代过程中,有两个规则需要确定,一是下降方向 $\mathbf{p}_k$ 的选取,一是步长因子 $t_k$ 的选取.不同的规则对应不同的方法.

由于当 $t$ 充分小时, $F(\mathbf{x}^{(k)} + t\mathbf{p}_k) = F(\mathbf{x}^{(k)}) + t[\nabla F(\mathbf{x}^{(k)})]^T \mathbf{p}_k + o(t)$ ,其中 $o(t)$ 表示与 $t$ 相比是高阶小量,所以由(4.3-2)知

$$\mathbf{g}_k^T \mathbf{p}_k < 0, \quad (4.3-3)$$

这里记 $\mathbf{g}_k = \nabla F(\mathbf{x}^{(k)})$ . (4.3-3)式为下降方向应满足的条件.

步长因子 $t_k$ 可以沿射线 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(k)} + t\mathbf{p}_k (t > 0)$ 进行一维搜索来确定.例如选取这样的 $t_k$ ,使

$$t_k = \arg \min_{t > 0} F(\mathbf{x}^{(k)} + t\mathbf{p}_k). \quad (4.3-4)$$

又如“成功-失败”试探法,一开始取定一个步长因子 $\lambda$ ,比较 $\mathbf{x}^{(k)} + \lambda\mathbf{p}_k$ 与 $\mathbf{x}^{(k)}$ 处的函数值,若 $F(\mathbf{x}^{(k)} + \lambda\mathbf{p}_k) < F(\mathbf{x}^{(k)})$ ,则“成功”, $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \lambda\mathbf{p}_k$ ;否则“失败”,将步长因子 $\lambda$ 减半,再比较 $\mathbf{x}^{(k)} + \frac{\lambda}{2}\mathbf{p}_k$ 与 $\mathbf{x}^{(k)}$ 处的函数值,若 $F(\mathbf{x}^{(k)} + \frac{\lambda}{2}\mathbf{p}_k) < F(\mathbf{x}^{(k)})$ ,则“成功”, $\mathbf{x}^{(k+1)} =$

$\mathbf{x}^{(k)} + \frac{\lambda}{2}\mathbf{p}_k$ ;否则将步长因子减半为 $\frac{\lambda}{4}$ 再试探.

(4.3-4)式中的步长因子称为最佳步长因子.

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

### 4.3.1 最速下降法

这时,取  $\mathbf{p}_k = -\mathbf{g}_k$ ,即下降方向取为负梯度方向,由于  $F(\mathbf{x})$  在  $\mathbf{x}^{(k)}$  的小邻域内沿负梯度方向下降最快,所以称为最速下降法.

最速下降法的迭代公式(以选用最佳步长因子为例)是

$$\begin{cases} t_k = \arg \min_{t>0} F(\mathbf{x}^{(k)} - t\mathbf{g}_k), \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - t_k\mathbf{g}_k, \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots. \quad (4.3-5)$$

特别地,将最速下降法应用于二次函数  $F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}^T\mathbf{x} + c$ , (4.3-6)

其中  $\mathbf{A}$  是  $n$  阶对称正定矩阵,  $\mathbf{b}$  是  $n$  维常数向量,  $c$  为常数,那么可以得到  $t_k$  的显式表达式.

事实上,由于  $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \nabla F(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}$ ,故有  $\mathbf{g}_k = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}$ ,

$$\mathbf{g}_{k+1} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+1)} + \mathbf{b} = \mathbf{A}(\mathbf{x}^{(k)} - t_k\mathbf{g}_k) + \mathbf{b} = \mathbf{g}_k - t_k\mathbf{A}\mathbf{g}_k,$$

其中  $t_k$  是最佳步长因子.另一方面,最佳步长因子  $t_k$  又应满足

$$\frac{d}{dt}F(\mathbf{x}^{(k)} - t\mathbf{g}_k) = -[\nabla F(\mathbf{x}^{(k)} - t\mathbf{g}_k)]^T \mathbf{g}_k = -\mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{g}_k = 0. \quad (4.3-7)$$

因而  $(\mathbf{g}_k - t_k\mathbf{A}\mathbf{g}_k)^T \mathbf{g}_k = \mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k - t_k \mathbf{g}_k^T \mathbf{A} \mathbf{g}_k = \mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k - t_k \mathbf{g}_k^T \mathbf{A} \mathbf{g}_k = 0,$

由此即得

$$t_k = \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_k^T \mathbf{A} \mathbf{g}_k}. \quad (4.3-8)$$

于是,对于二次函数(4.3-6),最速下降法的迭代公式为

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_k^T \mathbf{A} \mathbf{g}_k} \mathbf{g}_k, \quad k = 0, 1, \dots. \quad (4.3-9)$$

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

### 最速下降法算法

$\epsilon$  是预先给定的终止限, 以  $\|g(x^{(k)})\| < \epsilon$  为终止准则.

- 1)  $x^{(0)} \Rightarrow x$ .
- 2) 计算  $F(x)$  和  $g(x)$ .
- 3) 若  $\|g(x)\| < \epsilon$ , 则输出  $x$  和  $F(x)$ , 停机; 否则做 4).
- 4) 求最佳步长因子  $t^*$ , 使

$$F(x - t^* g(x)) = \min_{t \geq 0} F(x - t g(x)).$$

- 5)  $x - t^* g(x) \Rightarrow x$ , 转 2).

由于最优步长因子  $t_k$  应满足(4.3-7)式, 亦即

$$g_{k+1}^T g_k = 0,$$

所以后一次下降方向  $p_{k+1}$  与前一次下降方向  $p_k$  总是互相垂直的, 称之为锯齿状下降, 如图 4.3-1 所示.

从图 4.3-1 可以看出, 在远离极小点的地方, 每次迭代可能使函数值有较多的下降, 可是在接近极小点的地方, 由于锯齿状下降使每次迭代移动的距离缩短, 从而收敛速度变慢, 越接近极小点, 收敛速度就越慢. 这是最速下降法的一个严重的弱点.

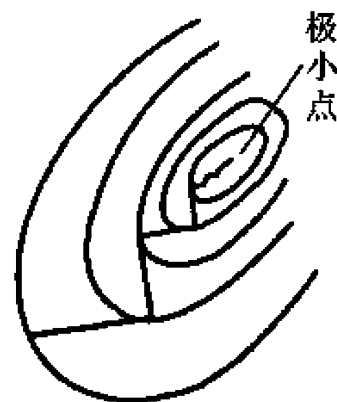


图 4.3-1

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

例 1 用最速下降法求解极值问题

$$\min_{x_1, x_2} F(x_1, x_2) = 2x_1^2 + 2x_1x_2 + 5x_2^2,$$

取  $\mathbf{x}^{(0)} = [1, -1]^T$  (准确解  $\mathbf{x}^* = [0, 0]^T, F(\mathbf{x}^*) = 0$ ).

解  $F(\mathbf{x})$  是二次函数, 且

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 4x_1 + 2x_2 \\ 2x_1 + 10x_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 10 \end{bmatrix}.$$

从  $\mathbf{x}^{(0)} = [1, -1]^T$  出发, 前四次迭代的结果如表 4.3-1 所示.

表 4.3-1

$k$	0	1	2	3	4
$\mathbf{x}^{(k)}$	$[1, -1]$	$[0.7702, -0.0810]^T$	$[0.2189, -0.2189]^T$	$[0.1686, -0.0177]^T$	$[0.048, -0.0479]^T$
$\mathbf{g}_k$	$[2, -8]$	$[2.9189, 0.7297]^T$	$[0.4378, -1.7513]^T$	$[0.639, 0.1602]^T$	
$\mathbf{A}\mathbf{g}_k$	$[-8, -76]$	$[13.1351, 13.1352]^T$	$[-1.7513, -16.637]^T$	$[0.8764, 2.88]^T$	
$l_k$	0.11486	0.18888	0.11486	0.1887	
$F(\mathbf{x}^{(k)})$	5	1.0945	0.2396	0.05246	0.01148

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

### 4.3.2 变尺度法

上面已经说过,在接近极小值点的地方,最速下降方向并不是理想的下降方向.为了改善收敛速度,考虑在极小值点  $x^*$  处将  $F(x)$  按 Taylor 公式展开,取到二阶项,即

$$F(x) \approx F(x^*) + [g(x^*)]^T(x - x^*) + \frac{1}{2}(x - x^*)^T H(x^*)(x - x^*),$$

那么,由于  $g(x^*) = 0$ , 所以有

$$F(x) \approx F(x^*) + \frac{1}{2}(x - x^*)^T H(x^*)(x - x^*),$$

$$\nabla F(x) = g(x) \approx H(x^*)(x - x^*).$$

如果 Hesse 矩阵  $H(x^*)$  正定,则令  $H(x^*)(x - x^*) = g(x)$ , 由此解得

$$x^* = x - [H(x^*)]^{-1} g(x). \quad (4.3-10)$$

记  $B = [H(x^*)]^{-1}$ , (4.3-10) 式表明方阵  $B$  作用于  $-g(x)$  使最速下降方向  $-g(x)$  变为直指极小值点  $x^*$ . 这就启发我们寻找这样的下降迭代算法,它使用  $-Bg(x)$  形式的搜索方向. 为保证  $-Bg(x)$  是下降方向,只需  $[g(x)]^T[-Bg(x)] = -[g(x)]^T Bg(x) < 0$ , 即  $[g(x)]^T Bg(x) > 0$ . 因此,若  $B$  是对称正定矩阵,则  $-Bg(x)$  必为下降方向. 于是,一般的迭代公式是

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - t_k B_k g_k, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (4.3-11)$$

其中步长因子  $t_k$  可以通过一维搜索来确定. 容易看出,当  $B_k = I$  时, (4.3-11) 式就是最速下降法的迭代公式.



## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

一种选择  $B_k$  的方法是,取  $B_k$  为  $F(x)$  在点  $x^{(k)}$  的 Hesse 矩阵  $H(x^{(k)})$  的逆矩阵,即  $B_k = [H(x^{(k)})]^{-1}$ ,从而得到迭代公式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - t_k [H(x^{(k)})]^{-1} g_k, \quad k = 0, 1, \dots. \quad (4.3-12)$$

这就是 4.2 节所讲的 Newton 下山法.

在 4.2 节曾指出,  $F(x)$  的 Hessian 矩阵  $H(x)$  (即  $g(x)$  的 Jacobi 矩阵  $Dg(x)$ ) 的逆矩阵可能在某些点处不存在,即使存在,计算工作量也很大. 解决这个问题一个实际可行的办法是,从一个近似于  $[H(x^{(k)})]^{-1}$  的方阵出发,每次迭代时对它进行修正.

由于  $[g(x)]^T p(x) = [g(x)]^T A(A^{-1} p(x))$ , 这里  $A$  为对称正定矩阵,所以如果用  $\|x\|_A = \sqrt{x^T A x}$  作为  $x$  的范数(尺度)时,则  $F(x)$  按  $\|\cdot\|_A$  意义下的最速下降方向为  $-A^{-1} g(x)$ , 因为  $p(x) = -g(x)$  是最速下降方向. 因此,当  $F(x)$  在点  $x^{(k)}$  处的 Hessian 矩阵  $H(x^{(k)})$  正定时,  $\|\cdot\|_{H_k}$  意义下的最速下降方向是  $-H_k^{-1} g_k$ , 这里  $H_k = H(x^{(k)})$ . 于是,当用对称正定矩阵  $B_k$  近似  $H_k^{-1}$  时,相当于用  $B_k^{-1}$  近似  $H_k$ , 从而  $F(x)$  在点  $x^{(k)}$  处按范数  $\|\cdot\|_{B_k^{-1}}$  意义下的最速下降方向是  $-B_k g_k$ . 如果每次迭代都以这种最速下降方向作为搜索方向,并且逐次改变尺度矩阵,那么就可以构造出如下变尺度法.“变尺度”一词也源于此.

讨论对  $B_k$  附加的条件.

1) 为使搜索方向  $p_k = -B_k g_k$  是下降方向,如上所述,  $B_k$  应为对称正定矩阵.

2) 从  $B_k$  到  $B_{k+1}$  应该具有简单形式,一般采用对  $B_k$  进行修正来得到  $B_{k+1}$ . 令  $\Delta B_k$  为修正方阵,则有

$$B_{k+1} = B_k + \Delta B_k. \quad (4.3-13)$$

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

3)  $B_{k+1}$  满足拟 Newton 条件. 所谓拟 Newton 条件是通过下述考虑得出的:

如果  $F(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x + c$ , 那么由  $g_k = Ax^{(k)} + b$  和  $g_{k+1} = Ax^{(k+1)} + b$  得  $g_{k+1} - g_k = A(x^{(k+1)} - x^{(k)})$ , 从而

$$x^{(k+1)} - x^{(k)} = A^{-1}(g_{k+1} - g_k).$$

因此, 要使  $B_{k+1}$  很好地近似  $A^{-1}$ , 则  $B_{k+1}$  应满足

$$B_{k+1}(g_{k+1} - g_k) = x^{(k+1)} - x^{(k)}. \quad (4.3-14)$$

为了推导变尺度法的迭代公式时方便, 记

$$y_k = g_{k+1} - g_k, \quad s_k = x^{(k+1)} - x^{(k)}, \quad (4.3-15)$$

则(4.3-14)式可改写成

$$B_{k+1}y_k = s_k. \quad (4.3-14')$$

将(4.3-13)式代入(4.3-14')式, 得到修正矩阵  $\Delta B_k$  必须满足的方程

$$(\Delta B_k)y_k = s_k - B_k y_k. \quad (4.3-16)$$

根据(4.3-16)式的形式, 令

$$\Delta B_k = s_k v_k^T - B_k y_k w_k^T, \quad (4.3-17)$$

其中  $v_k, w_k$  是待定向量, 它们的不同选取便可得到不同的算法, 但都是秩 1 的算法, 因为  $\Delta B_k$  的秩为 1.

将(4.3-17)式代入(4.3-16)式, 得

$$(v_k^T y_k)s_k - (w_k^T y_k)B_k y_k = s_k - B_k y_k. \quad (4.3-18)$$

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

考虑到  $\Delta \mathbf{B}_k$  应是对称矩阵的要求, 取

$$\begin{cases} \mathbf{v}_k^T = \frac{(1 + \beta \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k) \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k} - \beta \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k, \\ \mathbf{w}_k^T = \frac{(1 - \beta \mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k) \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k} + \beta \mathbf{s}_k^T, \end{cases} \quad (4.3-19)$$

其中  $\beta$  是参数. 将(4.3-19)式代入(4.3-18)式的左边, 得

$$\begin{aligned} (\mathbf{v}_k^T \mathbf{y}_k) \mathbf{s}_k - (\mathbf{w}_k^T \mathbf{y}_k) \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k &= [(1 + \beta \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k) - \beta \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k] \mathbf{s}_k \\ &\quad - [(1 - \beta \mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k) + \beta \mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k] \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k = \mathbf{s}_k - \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k, \end{aligned}$$

故(4.3-18)式成立. 而将(4.3-19)式代入(4.3-17)右边, 得

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{B}_k &= \frac{\mathbf{s}_k (1 + \beta \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k) \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k} - \beta \mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k - \frac{\mathbf{B}_k \mathbf{y}_k (1 - \beta \mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k) \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k} - \beta \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k \mathbf{s}_k^T \\ &= (1 + \beta \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k) \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k} - (1 - \beta \mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k) \frac{(\mathbf{B}_k \mathbf{y}_k)(\mathbf{B}_k \mathbf{y}_k)^T}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k} - \beta (\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k + (\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k)^T), \end{aligned}$$

因此  $\Delta \mathbf{B}_k$  是对称矩阵, 从而  $\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \Delta \mathbf{B}_k$  也是对称矩阵.

特别地, 若取  $\beta=0$ , 则由(4.3-19)式得

$$\mathbf{v}_k^T = \frac{1}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k} \mathbf{s}_k^T, \quad \mathbf{w}_k^T = \frac{1}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k} \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k,$$

因而由(4.3-17)式和(4.3-13)式得

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k} - \frac{\mathbf{B}_k \mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k}. \quad (4.3-20)$$

10)  $x_2 \Rightarrow x_1, k+1 \Rightarrow k$ , 转步 3).

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

例 2 用 DFP 方法求解

$$\min_{x_1, x_2} F(x_1, x_2) = \frac{3}{2}x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 - x_1x_2 - 2x_1,$$

取  $\mathbf{x}^{(0)} = [-2, 4]^T$  (准确解是  $x_1^* = x_2^* = 1$ ).

解 取  $\mathbf{B}_0 = \mathbf{I}$ , 则 DFP 方法与最速下降法有相同的第 1 个迭代点  $\mathbf{x}^{(1)}$ .

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 3x_1 - x_2 - 2 \\ -x_1 + x_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} (= \mathbf{A}).$$

$$\mathbf{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} -2 \\ 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g}_0 = \begin{bmatrix} -12 \\ 6 \end{bmatrix}, \quad t_0 = \frac{\mathbf{g}_0^T \mathbf{g}_0}{\mathbf{g}_0^T \mathbf{A} \mathbf{g}_0} = 0.29412;$$

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} - t_0 \mathbf{g}_0 = \begin{bmatrix} 1.52944 \\ 2.23528 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g}_1 = \begin{bmatrix} 0.35304 \\ 0.70584 \end{bmatrix}.$$

以下用 DFP 法进行第二次迭代.

$$\mathbf{s}_0 = \mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 3.52944 \\ -1.76472 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}_0 = \mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_0 = \begin{bmatrix} 12.35304 \\ -5.29416 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{s}_0^T \mathbf{y}_0 = 52.94202, \quad \mathbf{y}_0^T \mathbf{B}_0 \mathbf{y}_0 = \mathbf{y}_0^T \mathbf{y}_0 = 180.62573,$$

$$\mathbf{s}_0 \mathbf{s}_0^T = \begin{bmatrix} 12.45695 & -6.22847 \\ -6.22847 & 3.11424 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{B}_0 \mathbf{y}_0 \mathbf{y}_0^T \mathbf{B}_0 = \mathbf{y}_0 \mathbf{y}_0^T = \begin{bmatrix} 152.5976 & -65.39897 \\ -65.39897 & 28.02813 \end{bmatrix},$$

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

$$\begin{aligned}
 \mathbf{B}_1 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.23529 & -0.11765 \\ -0.11765 & 0.05882 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.84483 & -0.36207 \\ -0.36207 & 0.15517 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} 0.39046 & 0.24442 \\ 0.24442 & 0.90365 \end{bmatrix}.
 \end{aligned}$$

搜索方向为  $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{B}_1 \mathbf{g}_1 = [-0.31037, -0.72412]^T$ , 从而

$$\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(1)} - \frac{\mathbf{p}_1^T \mathbf{g}_1}{\mathbf{p}_1^T \mathbf{A} \mathbf{p}_1} \mathbf{p}_1 = \mathbf{x}^{(1)} + 1.70589 \mathbf{p}_1 = \begin{bmatrix} 0.99998 \\ 1.00001 \end{bmatrix}.$$

比 DFP 更好的方法是 BFGS 方法, 它是目前公认的很有效的变尺度法, 由 Broyden, Fletcher, Goldfarb 和 Shanno 等人给出. 在 (4.3-19) 式中令  $\beta = \frac{1}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k}$ , 则可得到  $\mathbf{v}_k^T$  和  $\mathbf{w}_k^T$  的具体表达式, 并将其代入 (4.3-17) 式得到  $\Delta \mathbf{B}_k$  的表达式, 再由 (4.3-14) 式得

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \frac{1}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k} \left[ \left( 1 + \frac{\mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k} \right) \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T - \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k \mathbf{s}_k^T - \mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \right]. \quad (4.3-21)$$

由于  $\mathbf{B}_k$  不易变为不可逆, 所以 BFGS 方法具有较好的数值稳定性, 并且对一维搜索的精确度要求不高.

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

### BFGS 方法的算法

- 1)  $\mathbf{x}^{(0)} \Rightarrow \mathbf{x}_1$ , 计算  $F(\mathbf{x}_1) \Rightarrow F_1, \mathbf{g}(\mathbf{x}_1) \Rightarrow \mathbf{g}_1$ .
- 2)  $\mathbf{I} \Rightarrow \mathbf{B}, -\mathbf{g}_1 \Rightarrow \mathbf{p}, 0 \Rightarrow k$ .
- 3) 一维搜索确定步长因子  $t^*$ , 例如最优步长因子  $t^* = \arg \min_{t \geq 0} F(\mathbf{x}_1 + t\mathbf{p})$ .
- 4)  $t^* \mathbf{p} \Rightarrow \mathbf{s}, \mathbf{x}_1 + \mathbf{s} \Rightarrow \mathbf{x}_2$ .
- 5) 计算  $F(\mathbf{x}_2) \Rightarrow F_2, \mathbf{g}(\mathbf{x}_2) \Rightarrow \mathbf{g}_2$ .
- 6) 若  $\|\mathbf{g}_2\| < \varepsilon$ , 则输出  $\mathbf{x}_2, F_2$ , 停机; 否则做步 7).
- 7) 若  $\|\mathbf{F}_2\| \geq \|\mathbf{F}_1\|$ , 则  $\mathbf{x}_2 \Rightarrow \mathbf{x}_1, F_2 \Rightarrow F_1, \mathbf{g}_2 \Rightarrow \mathbf{g}_1$ , 转步 3); 否则做步 8).
- 8) 若  $k = n$ , 则  $\mathbf{x}_2 \Rightarrow \mathbf{x}_1, F_2 \Rightarrow F_1, \mathbf{g}_2 \Rightarrow \mathbf{g}_1$ , 转步 2); 否则做步 9).
- 9) 计算  $\mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_1 \Rightarrow \mathbf{y}$ .
- 10) 计算  $\mathbf{B} + \frac{1}{\mathbf{s}^\top \mathbf{y}} \left[ \left( 1 + \frac{\mathbf{y}^\top \mathbf{B} \mathbf{y}}{\mathbf{s}^\top \mathbf{y}} \right) \mathbf{s} \mathbf{s}^\top - \mathbf{B} \mathbf{y} \mathbf{s}^\top - \mathbf{s} \mathbf{y}^\top \mathbf{B} \right] \Rightarrow \mathbf{B}, -\mathbf{B} \mathbf{g}_1 \Rightarrow \mathbf{p}$ .
- 11)  $\mathbf{x}_2 \Rightarrow \mathbf{x}_1, k+1 \Rightarrow k$ , 转步 3).

例 3 用 BFGS 方法求解

$$\min_{x_1, x_2} F(x_1, x_2) = x_1^2 + 4x_2^2,$$

取  $\mathbf{x}^{(0)} = [1, 1]^\top$  (准确解  $x_1^* = x_2^* = 0$ ).

## 4.3 无约束优化问题的下降迭代法

解 取  $B_0 = I$ , 则 BFGS 方法与最速下降法有相同的第 1 个迭代点  $x^{(1)}$ .

$$g(x) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 8x_2 \end{bmatrix}, \quad H(x) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 8 \end{bmatrix} (= A).$$

$$x^{(0)} = [1, 1]^T, \quad g_0 = [2, 8]^T, \quad t_0 = \frac{g_0^T g_0}{g_0^T A g_0} = 0.13077;$$

$$x^{(1)} = x^{(0)} - t_0 g_0 = [0.73846, -0.04616]^T, \quad g_1 = [1.47692, -0.36928]^T.$$

以下用 BFGS 法作第二次迭代.

$$s_0 = x^{(1)} - x^{(0)} = [-0.26154, -1.04616]^T,$$

$$y_0 = g_1 - g_0 = [-0.52308, -8.36928]^T$$

$$s_0^T y_0 = 8.89241, \quad y_0^T B_0 y_0 = y_0^T y_0 = 70.31846,$$

$$s_0 s_0^T = \begin{bmatrix} 0.06840 & 0.27361 \\ 0.27361 & 1.09445 \end{bmatrix}, \quad B_0 y_0 s_0^T = \begin{bmatrix} 0.13681 & 0.54723 \\ 2.18890 & 8.75561 \end{bmatrix},$$

$$s_0 y_0^T B_0 = \begin{bmatrix} 0.13681 & 2.18890 \\ 0.54723 & 8.75561 \end{bmatrix};$$

$$\begin{aligned} B_1 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{8.89241} \left\{ 8.90769 \begin{bmatrix} 0.06840 & 0.27361 \\ 0.27361 & 1.09445 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.27362 & 2.73613 \\ 2.73613 & 17.51122 \end{bmatrix} \right\} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{8.89241} \begin{bmatrix} 0.33567 & -0.29890 \\ -0.29890 & -7.76220 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.03775 & -0.03361 \\ -0.03361 & 0.12710 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

搜索方向  $p_1 = -B_1 g_1 = \begin{bmatrix} -1.54509 \\ 0.09657 \end{bmatrix}$ , 从而

$$x^{(2)} = x^{(1)} - \frac{p_1^T g_1}{p_1^T A p_1} p_1 = x^{(1)} + 0.47794 p_1 = \begin{bmatrix} 0.00000 \\ -0.00001 \end{bmatrix}.$$

■



# 作业

## 习题 4

1. 已知方程  $x^3 - x^2 - 1 = 0$  在  $x^{(0)} = 1.5$  附近有根, 将方程改写成:

(1)  $x = 1 + \frac{1}{x^2}$ , 对应的迭代算式为  $x^{(k+1)} = 1 + \frac{1}{[x^{(k)}]^2}$ ;

(2)  $x = \sqrt[3]{1+x^2}$ , 对应的迭代算式为  $x^{(k+1)} = \sqrt[3]{1 + \frac{1}{[x^{(k)}]^2}}$ ;

(3)  $x = \frac{1}{\sqrt{x-1}}$ , 对应的迭代算式为  $x^{(k+1)} = \frac{1}{\sqrt{x^{(k)}-1}}$ .

判断上述各种迭代算式在 1.5 附近的收敛性.

# 謝謝觀看！



廈門大學  
XIAMEN UNIVERSITY



信息学院  
(国家示范性软件学院)  
School of Informatics

黃 煒  
博士·副教授  
Dr. Wei Huang