数值计算方法内容总结*

0 总述

计算方法是设计求数学问题的数值近似解方法的一门学科.
在总述中, 约定: 设 x^* 为**准确值**, x 为 x^* 的**一个近似值**.

0.1 误差

称 $\boldsymbol{e = x^* - x}$ 为 x 的**绝对误差**. 若 $|e| < \varepsilon$, 称 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为 x 的一个**绝对误差限**.
称如下定义的 $\boldsymbol{e_r}$ 为**相对误差**. 若 $|e_r| < \varepsilon_r$, 称 $\boldsymbol{\varepsilon_r}$ 为 x 的一个**相对误差限**

$$\boldsymbol{e_r} = \frac{e}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*} \approx \frac{x^* - x}{x}$$

0.2 有效位数

如果 $|e|$ 不超过 x 的某一位的**半个单位**, 从这一位起直到前面**第一位非零数字为止**所有的数字的个数为 n , 称 x (作为 x^* 的近似值) **有** n **位有效数字**.

0.3 计算中应注意的几点

1. 防止两个相近的数字相减 — 否则相对误差较大.
2. 避免很小的数做分母 — 否则绝对误差较大.
3. 防止大数 ‘吃’ 小数 — 改进算法, 提高精度.
4. 尽量减少总的运算次数.
5. 设计稳定的收敛算法.

1 插值

1.1 定义

f 为 $[a, b]$ 上的函数, $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为该区间上互不相同的点. 给定函数类 Φ , 若有 $\phi \in \Phi$, 满足:

$$\phi(x_i) = f(x_i) \ \ (0 \le i \le n)$$

则称 $\boldsymbol{\phi(x)}$ 为 $f(x)$ 关于节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 在 Φ 上的**插值函数**.

1.2 多项式插值的基本原理

取 Φ 的一个 $n+1$ 维子空间, 基为: $\phi_1, \phi_2, \cdots, \phi_{n+1}$. 则 2.1 中 ϕ 存在唯一的充要条件是:

$$\begin{vmatrix} \phi_1(x_0) & \phi_2(x_0) & \cdots & \phi_{n+1}(x_0) \\ \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \cdots & \phi_{n+1}(x_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x_n) & \phi_2(x_n) & \cdots & \phi_{n+1}(x_n) \end{vmatrix} \ne 0$$

*2012 级近代物理系 罗弋涵, 如有错误请联系我, E-mail: lyh2012@mail.ustc.edu.cn

显然多项式基满足此条件.

1.3 Lagrange 插值

寻找满足 $l_i(x_j)=\delta_{ij}$ 的基如下形式:

$$l_i(x)=\prod_{0\le k\le n,k\ne i}\frac{x-x_k}{x_i-x_k}$$

则

$$\phi(x)=L_n(x)=\sum_{0\le i\le n}f(x_i)l_i(x)$$

l_i 与 x^i 之间的转换矩阵的求法: 对 $f(x)=x^k$ 进行 Lagrange 插值即可. 即:

$$\begin{pmatrix}1\\x\\\vdots\\x^n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&1&\cdots&1\\x_0&x_1&\cdots&x_n\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\x_0^n&x_1^n&\cdots&x_n^n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}l_0\\l_1\\\vdots\\l_n\end{pmatrix}$$

注意: l_i 仅与 x_i 的选取有关.

误差: 定义为 $R_n(x)=f(x)-L_n(x)$, 若 $f\in C^{n+1}[a,b]$, 则

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

其中: $\xi\in[\min\{x,x_i\},\max\{x,x_i\}]$, 这是因为当 x 不同时, R_n 中的 ξ 取值亦不同.

事后估计: 当 $|f^{n+1}(x)|$ 较大且缓变时, 分别以 $\{x_i\}_{0\le i\le n},\{x_i\}_{1\le i\le n+1}$ 做插值节点, 得到 $L_n^{(1)},L_n^{(2)}$, 由 R_1/R_2 知:

$$f(x)-L_n^{(1)}\approx\frac{x-x_0}{x-x_{n+1}}(L_n^{(1)}-L_n^{(2)})$$

1.4 Newton 插值

1.4.1 插值形式的构造

构造插值多项式如下形式:

$$N_n=a_0+a_1(x-x_0)+a_2(x-x_0)(x-x_1)+\cdots+a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

系数为

$$a_i=f[x_0.x_1,\cdots,x_i]$$

差商: 定义一阶差商为

$$f[x_0,x_1]=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$$

归纳定义:

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\frac{f[x_1,\cdots,x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_0}$$

可利用下表来进行计算

误差: Newton 插值的误差公式和 Lagrange 插值等价, 但是有另一种表达形式:

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

由两种插值的余项完全一致, 可得差商性质

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

其中: $\xi\in[\min\{x,x_i\},\max\{x,x_i\}]$.

x_i	$f(x_1)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商	$\cdots$	n 阶差商
x_0	$f(x_0)$					
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0,x_1]$				
x_2	$f(x_2)$	$f[x_1,x_2]$	$f[x_0,x_1,x_2]$			
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$		
x_n	$f(x_n)$	$f[x_{x-1},x_n]$	$f[x_{n-2},x_{n-1},x_n]$	$f[x_{n-3},x_{n-2},x_{n-1},x_n]$	$\cdots$	$f[x_0,x_1,\cdots,x_n]$

1.4.2 差商的性质

1, $f[x_0,x_1,\cdots,x_n]$ 可表示为 $f(x_i)$ 的线性组合, 可由对比 n 阶 Newton 插值和 Lagrange 插值的最高次项系数得到.

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\sum_{0\le i\le n}\frac{f(x_i)}{\prod\limits_{j\neq i}(x_i-x_j)}$$

2, 差商值与中括号中项的顺序无关.

3, 若 f 为 n 次多项式, 则 $f[x,x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]$ 为 $n-k(k\le n)$ 次多项式. 若 $k>n$, 此式为 0.

1.5 Hermite 插值

给定 $f\in C^1[a,b]$, 定义 f 关于节点 $\{x_i\}_{0\le i\le n}$ 的 (二重密切)Hermite 插值为 $H(x)$, 它是一个 $2n+1$ 次多项式, 满足

$$\begin{cases}H(x_i)=f(x_i)\\H'(x_i)=f'(x_i)\end{cases}$$

基函数法:
构造基 $\{g_i,h_i\}_{0\le i\le n}$ 满足:

$$\begin{cases}g_i(x_j)=\delta_{ij}\\g_i'(x_j)=0\end{cases}\qquad\begin{cases}h_i(x_j)=0\\h_i'(x_j)=\delta_{ij}\end{cases}$$

则:

$$H(x)=\sum_{0\le i\le n}f(x_i)g_i(x)+\sum_{0\le i\le n}f'(x_i)h_i(x)$$

差商法:
将有直到 k 阶导数信息的节点当作 $k+1$ 重节点 (离的非常近的 $k+1$ 个不同节点).

误差: 其余项为

$$R_{2n+1}=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}(x-x_0)^2(x-x_1)^2\cdots(x-x_n)^2$$

1.6 分段低阶插值

增加节点数目不一定能够提高插值函数的近似程度, 当插值函数阶数较高时, 插值函数震荡严重 (**Runge 现象**). 将区间**分割**后在每个小区间上**分别插值**是一个好的解决方法.

1.6.1 分段线性插值

将区间 $[a,b]$ 做分割: $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$, 在 $[x_i,x_{i+1}]$ 上线性插值得

$$p_i(x)=f(x_i)\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}+f(x_{i+1})\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}$$

则 $P(x)=p_i(x)\ (x_i\le x\le x_{i+1})$ 称作 f 关于上述节点的**分段线性插值**.

误差: 每段上的误差即为**一阶线性插值**的误差, 设 M_2 为 $f''(x)$ 在 $[a,b]$ 上的上界, 则分段线性插值的误差限为:

$$|f(x)-P(x)|\le\frac{M_2}{2}(\frac{x_{i+1}-x_i}{2})^2$$

1.6.2 三次样条插值

利用不超过三次的多项式, 满足全局二阶光滑的一种分段插值.

注意到, **端点**能提供 $\boldsymbol{2n}$ 个约束条件, **段间连接点一二阶导数连续**提供了 $\boldsymbol{2(n-1)}$ 个约束条件, 但是决定三次样条插值共需要 $4n$ 个参数, 所以需要更多的两个约束, 可加入**端点处的一阶或二阶导数值**来限制.

设区间 $[a,b]$ 的分割为 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$, $S_i(x)$ 为区间 $[x_i,x_{i+1}]$ 上的样条插值函数.

M 关系式:

将样条函数连接处二阶导数值记为 $M_i(1\le i\le n-1)$, 端点处样条函数二阶导数值设为 $S''(a)=M_0,S''(b)=M_n$

$M_0=M_n=0$ 称作**自然边界条件**; $S''(a)=f''(x_0),S''(b)=f''(x_n)$ 称为**固支边界条件**.

对 $S''(x)$ 做分段线性插值, 两次积分产生 $2n$ 个系数, 利用 $2n$ 个端点取值约束得到用 M_i 表示的 $S(x)$. 此 $S(x)$ 中含有 $n-1$ 个未知参数, 即 $M_i(1\le i\le n-1)$, 利用 $n-1$ 个连接处一阶导数连续的约束可解出.

样条函数如下:

$$\begin{aligned}S_i(x)=&\frac{(x_{i+1}-x)^3}{6h_i}M_i+\frac{(x-x_i)^3}{6h_i}M_{i+1}+\frac{f(x_i)(x_{i+1}-x)+f(x_{i+1})(x-x_i)}{h_i}\\&-\frac{h_i}{6}((x_{i+1}-x)M_i+(x-x_i)M_{i+1})\end{aligned}$$

称下式为 **M** 关系式:

$$\boldsymbol{\mu_i M_{i-1}+2M_i+\lambda_i M_{i+1}=d_i}$$

其中

$$h_i=x_{i+1}-x_i,\ \ \lambda_i=\frac{h_i}{h_i+h_{i-1}},\ \ \mu_i=1-\lambda_i,d_i=6f[x_{i-1},x_i,x_{i+1}]$$

m 关系式:

将样条函数连接处一阶导数值记为 $m_i(1\le i\le n-1)$, 端点处样条函数一阶导数值设为 $S''(a)=m_0,S''(b)=m_n$.

与 M 关系式类似地, 利用 Hermite 插值, 得到用 m 表示的样条函数, 利用二阶导数连续定出 $m(1\le i\le n-1)$ 的值.

样条函数如下:

$$\begin{aligned}S_i(x)=&(1-2(x-x_i)\frac{1}{x_i-x_{i+1}})(\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}})^2f(x_i)\\&+(1-2(x-x_{i+1})\frac{1}{x_{i+1}-x_i})(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i})^2f(x_{i+1})\\&+(x-x_i)(\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}})^2m_i+(x-x_{i+1})(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i})^2m_{i+1}\end{aligned}$$

称下式为 **m** 关系式:

$$\boldsymbol{\lambda_i m_{i-1}+2m_i+\mu_i m_{i+1}=c_i}$$

其中

$$h_i=x_{i+1}-x_i,\ \ \lambda_i=\frac{h_i}{h_i+h_{i-1}},\ \ \mu_i=1-\lambda_i,c_i=3(\lambda_i f[x_{i-1},x_i]+\mu_i f[x_i,x_{i+1}])$$

2 数值微分与数值积分

2.1 数值微分

2.1.1 差商

向前差商: $f'(x_0) \approx \dfrac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$, 其误差为 $R(x) = -\boldsymbol{\dfrac{h}{2}f''(\xi)} \sim O(h)$.

向后差商: $f'(x_0) \approx \dfrac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}$, 其误差为 $R(x) = -\boldsymbol{\dfrac{h}{2}f''(\xi)} \sim O(h)$.

中心差商: $f'(x_0) \approx \dfrac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$, 其误差为 $R(x) = -\boldsymbol{\dfrac{h^2}{6}f'''(\xi)} \sim O(h^2)$.

实际计算时应注意步长的选取, 采用**事后估计**, 即: 给定精度 ε, 分别取 $h, h/2$ 步长计算差商, 若 $|D(h)-D(h/2)| < \varepsilon$, 则 $\boldsymbol{h/2}$ 为合适步长.

2.1.2 插值型数值微分

以 Lagrange 插值为例, 插值型数值微分即用 $L_n^{(k)}(x)$ 近似 $f^{(k)}(x)$. 其插值点处一阶导数的误差为:

$$R_n'(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j\neq i}(x_i-x_j)$$

2.2 数值积分

2.2.1 基本概念

数值积分, 即用一些**离散点**上函数值的**线性组合**近似求解积分的方法, 如下式, 其中 α_i 成为**积分系数**.

$$I_n(f) \triangleq \sum_{i=0}^{n}\alpha_i f(x_i) \approx \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \triangleq I(f)$$

若对于 $f = x^k$, k 当且仅当满足 $0 \le k \le m$ 时都有 $I_n(f) = I(f)$ (存在 $f \in \mathbb{P}^{(m+1)}$ 使此式不成立), 则称积分公式 I_n 有 $\boldsymbol{m}$ **阶代数精度**. $\boldsymbol{n+1}$ 个**积分节点**的数值积分公式, 通过选取适当的**积分系数** $\boldsymbol{\{\alpha_i\}}$ 可达到 $\boldsymbol{n}$ **阶代数精度**, 积分系数由**积分节点** $\boldsymbol{\{x_i\}}$ 的选取**唯一确定**.

2.2.2 插值型数值积分

利用 f 关于节点 $\{x_i\}$ 的 n 阶插值函数 L_n 所求得的积分近似. 积分系数可选为

$$\alpha = \int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x$$

此积分公式拥有至少 n 阶代数精度.

2.2.3 Newton-Cote's 积分

选取积分区间上**等距点**作为积分节点的插值型数值积分称为 **Newton-Cote's 积分**. 其积分系数为

$$\alpha_i = (b-a)\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)\mathrm{d}t$$

其误差为:

$$\begin{cases} E_n(f) = \dfrac{K_n}{(n+2)!}f^{(n+2)}(\xi), \quad K_n = \displaystyle\int_a^b x\omega_n(x)\mathrm{d}x < 0, \quad n = 2k \\ E_n(f) = \dfrac{K_n}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi), \quad K_n = \displaystyle\int_a^b \omega_n(x)\mathrm{d}x < 0, \quad n = 2k-1 \end{cases}$$

可见奇偶性的差别.

梯形积分公式:
Newton-Cote's 积分中取 $n = 1$ 即可, 它有一阶代数精度.

$$T(f) = \frac{b-a}{2}(f(a) - f(b))$$

误差: $E_1(f) = \ -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)\ \ \eta \in [a,b]$.

Simpson 积分公式:
Newton-Cote's 积分中取 $n = 2$ 即可, 它有三阶代数精度.

$$S(f) = \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b))$$

误差: $E_1(f) = \ -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)\ \ \eta \in [a,b]$.

2.3 复化数值积分

复化数值积分即分段插值函数的积分.

2.3.1 复化梯形积分

令 $h = (b-a)/n, x_i = a + ih\ (i = 0, 1, \cdots, n)$, 其数值积分公式为:

$$T_n(f) = \frac{h}{2}(f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b))$$

误差: $E_n(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi)$.

2.3.2 复化 Simpson 积分

令 $h = (b-a)/2n, x_i = a + ih\ (i = 0, 1, \cdots, 2n)$, 其数值积分公式为:

$$S_n(f) = \frac{h}{3}(f(a) + 4\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{2i+1}) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + f(b))$$

误差: $E_n(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880n^4}f^{(4)}(\xi)$.

2.3.3 Romberg 积分

为了进一步地提高积分精度, 考察复化梯形积分公式和复化 Simpson 积分公式的误差项:

$$I(f) - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n}(f) - T_n(f))$$

$$I(f) - S_{2n} \approx \frac{1}{15}(S_{2n}(f) - S_n(f))$$

复化梯形积分公式加其误差项作为新的近似值得到复化 Simpson 积分公式:

$$I(f) \approx T_{2n}(f) + \frac{1}{3}(T_{2n}(f) - T_n(f)) = S_n(f)$$

同理, 复化 Simpson 积分公式加其误差项作为新的近似值得到**复化 Cotes 积分公式**.

$$I(f) \approx S_{2n}(f) + \frac{1}{15}(S_{2n}(f) - S_n(f)) = \frac{16}{15}S_{2n}(f) - \frac{1}{15}S_n f = C_n(f)$$

更一般地, 若将数值积分结果记为 $R_{i,j}$, 其中 j 为插值函数**每个分段**包含的**等分积分区间个数** (插值点数为 $j+1$), i 表征积分区间的个数 (2^{i-1}), 则:

$$R_{k,j} = R_{k,j-1} + \frac{R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}, k = 2, 3, \cdots$$

可利用下表计算

复化梯形积分	复化 Simpson 积分	复化 Cotes 积分	Romberg 算法		
$R_{11} = T_n$					
$R_{21} = T_{2n}$	$R_{22} = S_n$				
$R_{31} = T_{4n}$	$R_{32} = S_{2n}$	$R_{33} = C_n$			
$R_{41} = T_{8n}$	$R_{42} = S_{4n}$	$R_{43} = C_{2n}$	$R_{44} = R_n$		
$R_{51} = T_{16n}$	$R_{52} = S_{8n}$	$R_{53} = C_{4n}$	$R_{54} = R_{2n}$	$\cdots$	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
$R_{m1} = T_{2^{m-1}n}$	$R_{m2} = S_{2^{m-2}n}$	$R_{m3} = C_{2^{m-3}n}$	$R_{m4} = R_{2^{m-4}n}$	$\cdots$	R_{mm}

2.3.4 复化积分公式的收敛阶数

定义: 若一个积分公式的误差满足 $\lim\limits_{h \to 0} \dfrac{R[f]}{h^p} = C < \infty$, 且 $C \neq 0$, 则称此积分公式 p 阶收敛.

由复化数值积分的区间分割方法, 可知 $\dfrac{R[f]}{h^p} \sim R[f]n^p$. 故可得: $T_n \sim O(h^2), S_n \sim O(h^4)$.

2.3.5 复化积分的精度自动控制

给定精度 ε, 对于 n, 若 $|I_{(2n)}(f) - I_n(f)| < k\varepsilon$, 则 $\boldsymbol{I_{(2n)}(f)}$ 为满足要求的结果. 对于复化梯形积分, $k = 3$; 对于复化 Simpson 积分, $k = 15$. 更一般的, 若数值积分公式 p 阶收敛, 则 $k = 2^n - 1$.

为了提高积分精度, 可再加入**自适应算法**, 即在函数值变化剧烈处加密节点, 变化缓慢处取相对稀疏的节点.

2.4 重积分

讨论矩形积分区域 D 上的二重积分, 设 a, b, c, d 为常数, f 在 $D = [a, b] \times [c, d]$ 上连续.

2.4.1 复化梯形积分公式

$$\int_a^b \int_a^b f(x, y) \mathrm{d}x \mathrm{d}y \approx hk \sum_{j=0}^{n} \sum_{i=0}^{m} c_{i,j} f(x_i, y_i)$$

其中 $c_{i,j}$ 在角点处为 $1/4$, 边点处为 $1/2$, 内点处为 1.

误差: $E(f) = -\dfrac{(d-c)(b-a)}{12}(h^2 \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} f(\eta, \mu) + k^2 \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} f(\eta', \mu'))$

2.4.2 复化 Simpson 积分公式

m, n 均为偶数

$$\int_a^b \int_a^b f(x, y) \mathrm{d}x \mathrm{d}y \approx hk \sum_{j=0}^{n} \sum_{i=0}^{m} \omega_{i,j} f(x_i, y_i)$$

$\omega_{i,j} = u_i v_i$, 其中

$$\{u_0, u_1, \cdots, u_m\} = \left\{\frac{1}{3}, \frac{4}{3}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \cdots, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \frac{1}{3}\right\}$$
$$\{v_0, v_1, \cdots, v_n\} = \left\{\frac{1}{3}, \frac{4}{3}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \cdots, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \frac{1}{3}\right\}$$

误差: $E(f) = -\dfrac{(d-c)(b-a)}{180}(h^4 \dfrac{\partial^4}{\partial x^4} f(\eta, \mu) + k^4 \dfrac{\partial^4}{\partial y^4} f(\eta', \mu'))$

2.5 Gauss 积分

2.5.1 基础知识

带权的积分: $I(f)=\int_a^b W(x)f(x)\mathrm{d}x$, 其中权函数 $W(x)\geq 0$ 在 $[a,b]$ 上成立.

内积: 在多项式函数构成的线性空间上可定义关于权 $W(x)$ 的内积: $(f,g)=\int_a^b W(x)f(x)g(x)\mathrm{d}x$. 可先取基 $\{1,x,x^2,\cdots,x^n\}$, **通过 Schmidt 正交化**获得正交基.

> **定理 1**: $[a,b]$ 上权为 $W(x)$, 具有 n 个积分节点的数值积分公式, 代数精度不会超过 $2n-1$.

2.5.2 Gauss 型积分

定义: $[a,b]$ 上权为 $W(x)$ 的正交多项式 $p_n\perp\mathbb{P}_{n-1}$ 的 n 个零点为积分节点, 积分系数取 $\alpha_i=\int_a^b W(x)l_i(x)\mathrm{d}x$ 的数值积分公式 $G_n=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i f(x_i)$ 称为 **Gauss 型积分**.

Gauss 型积分的积分系数大于 0; 当 $n\to\infty$ 时, 数值积分收敛于原积分.

误差: $E_n(f)=\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\int_a^b W(x)(x-x_1)^2(x-x_2)^2\cdots(x-x_n)^2\mathrm{d}x$

3 曲线拟合的最小二乘法

拟合是一种逼近原函数的方法.

3.1 向量范数

定义: 映射 $||\cdot||:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^+\cup\{0\}$, 若满足如下条件, 则称该映射为**向量的范数**.

> 1. 非负性: $||X||\geq 0$, $||X||=0\Leftrightarrow X=0$.
> 2. 其次性: $\forall a\in\mathbb{R},||aX||=|a|\cdot||X||$.
> 3. 三角不等式: $||X+Y||\leq||X||+||Y||$.

向量的 $p=$ 范数: $||X||_p=(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p)^{1/p}$.

几种常见的范数: 1-范数 $||X||_1=\sum_{i=1}^{n}|x_i|$; 2-范数 $||X||_2=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}x_i^2}$; ∞ 范数 $||X||_\infty=\max\{|x_i|\}$.

3.2 最小二乘问题

设 $f(x)$ 为定义在 $[a,b]$ 上的函数, $\{x_i\}_{i=1}^m$ 为区间上 m 个互不相同的点. 寻找这样一个函数 Φ , 使得矢量 $(\Phi(x_1),\Phi(x_2),\cdots,\Phi(x_m))$ 与 $(f(x_1),f(x_2),\cdots,f(x_m))$ 二范数意义下距离最短, 构造方法称为**最小二乘法**.

取函数类为多项式函数空间 $\mathbb{P}_n$, 此时得到的拟合函数 ϕ 称为**多项式拟合函数**.

> **定理**:
>
> 1. 设 $m>n,A\in\mathbb{R}_{m\times n},b\in\mathbb{R}_{m\times 1},\mathrm{rank}(A)=n$. 称 $\boldsymbol{A^TAx=A^Tb}$ 为**矛盾方程组** $\boldsymbol{Ax=b}$ **的法方程, 法方程有唯一解**.
>
> 2. **法方程的解** x 使得 $||\boldsymbol{Ax-b}||_{\boldsymbol{2}}$ 最小.
>
> 实际拟合时, 取 $x=a$, a 为多项式的系数, A 为 x^i 于各拟合样本点的取值构成的变换矩阵, 显然 Ax 即为矢量 $(\Phi(x_1),\Phi(x_2),\cdots,\Phi(x_m))$, 按照定理 2 便可求得 $||\boldsymbol{Aa-y}||_{\boldsymbol{2}}$ 最小时的系数矩阵 a .
>
> **若给定的 Φ 不是线性空间, 可采用变量代换将其转化为多项式拟合问题; 此时结果已不是最小二乘意义下的最小, 但也有直观拟合意义.**

4 非线性方程求解

4.1 对分法

即二分法, 设要求的求解精度为 ε , 其**终止条件**为 $|f(x) < \varepsilon|$. 可估计所需的对分次数 k :

$$\frac{b-a}{2^k} < \varepsilon \Rightarrow k > \frac{\ln(b-a) - \ln \varepsilon}{\ln 2}$$

另一种终止条件, 当 $|a-b| < 2\varepsilon$ 时终止, 取**区间中点**为方程的根.

4.2 迭代法

4.2.1 基本理论

基本步骤:

- 给出方程的等价形式 $f(x) = 0 \Leftrightarrow x = \phi(x)$
- 取**合适的**初值 x_0 , 构造迭代序列 $x_{k+1} = \phi(x_k)$.
- 若 $k \to \infty$ 时 $x_k \to x^*$, x^* 为方程的解; 若不存在极限, 则迭代失败, 需重选 x_0 或重新构造插值格式 ϕ.

定理:
若 $\phi \in C^1[a,b]$ 满足:

1. $x \in [a,b], a \leq \phi(x) \leq b$.
2. $\exists\, 0 < L < 1$, 使得 $\forall x \in [a,b]$ 有 $|\phi'(x)| \leq L$ (ϕ 为压缩映射).

则有:

- 存在唯一的 x^* 使得 $x^* = \phi(x^*)$.
- $\forall x_0 \in [a,b]$, 迭代序列 $\{x_k\}$ 收敛, 且误差为

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

4.2.2 收敛的阶数

定义: $\{x_k\} \to x^*, \varepsilon_k = |x^* - x_k|$. 若 $\exists\, p \leq 1$ 和正常数 c , 使得

$$\lim_{k \to \infty} \frac{\varepsilon_{k+1}}{\varepsilon_k^p} = c$$

则称 $\{x_k\}$ p **阶收敛**, 相应的迭代格式亦为 p **阶收敛**.

定理:

x^* 为 $x = \phi(x)$ 的根, ϕ 在 x^* 处有连续 p 阶导数, 且**从 $\mathbf{1} \sim \boldsymbol{p-1}$ 阶导数值均为** 0, $\boldsymbol{\phi_{(p)} \neq 0}$, 则迭代 $x_{k+1} = \phi(x_k)$ 为 $\boldsymbol{p}$ **阶收敛**.

4.2.3 Newton 迭代

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

该迭代方法当所求根为单根时为二阶收敛: 若不是单根, 则为一阶收敛. 当知道所求根的重数 p 时, 可采取改进的迭代公式使迭代重新成为二阶:

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

4.2.4 弦截法

将 Newton 迭代公式中的导数用差商代替, 得到

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

4.2.5 非线性方程组的 Newton 迭代法

设方程组 $f_i(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0$. 记 $F = (f_1, f_2, \cdots, f_n)^T, X = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$, 则方程组表示为 $F(X) = 0$. 取初值 $X_0 = (x_{01}, x_{02}, \cdots, x_{0n})^T$, 则将 f_i 在 X_0 处 Taylor 展开后去线性部分得:

$$\begin{cases} f_1(X_0) + \dfrac{\partial f_1}{\partial x_1}(x_1 - x_{01}) + \cdots + \dfrac{\partial f_1}{\partial x_n}(x_n - x_{0n}) = 0 \\ f_2(X_0) + \dfrac{\partial f_2}{\partial x_1}(x_1 - x_{01}) + \cdots + \dfrac{\partial f_2}{\partial x_n}(x_n - x_{0n}) = 0 \\ \qquad \vdots \\ f_n(X_0) + \dfrac{\partial f_n}{\partial x_1}(x_1 - x_{01}) + \cdots + \dfrac{\partial f_n}{\partial x_n}(x_n - x_{0n}) = 0 \end{cases}$$

该方程写成矩阵形式:

$$F(X_0) + J_F(X_0)(X - X_0) = 0$$

则取迭代为:

$$X_{k+1} = X_k - J_F^{-1}(X_k)F(X_k)$$

5 解线性方程组的直接法

5.1 消元法

5.1.1 特殊形式

设方程为 $Ax = b$, 其中:

$$A = \begin{pmatrix} I_{11} & I_{12} & \cdots & I_{1n} \\ I_{21} & I_{22} & \cdots & I_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ I_{n1} & I_{n2} & \cdots & I_{nn} \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

- 系数矩阵为对角阵, 即 $I_{ij} = \delta_{ij}$, 方程的解为 $x_i = \dfrac{b_i}{I_{ii}}$
- 系数矩阵为下三角矩阵, 即 $I_{ij} = 0, (i < j)$, 方程的解为 $x_i = \dfrac{b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} I_{ij}x_j}{I_{ii}}$
- 系数矩阵为上三角矩阵, 即 $I_{ij} = 0, (i > j)$, 方程的解为 $x_i = \dfrac{b_i - \sum\limits_{j=i+1}^{n} I_{ij}x_j}{I_{ii}}$

5.1.2 Gauss 消元

将系数矩阵转换为上三角阵, 方法为: 依次地, 第 k $(k = 1, 2, \cdots, n-1)$ 行 $\times \dfrac{-a_{jk}^{(k)}}{a_{kk}} +$ 第 j $(j = k+1, k+2, \cdots, n)$ 行. 此过程总运算量为 n^3 量级.

上述过程存在问题: 对于 $a_{kk}^{(k)} = 0$ 的情形无能为力; 当某个 $a_{kk}^{(k)}$ 很小时, 计算结果误差较大. 后者是因为, 未知数序列中先被解出的量误差累积, 会导致在 $a_{kk}^{(k)}$ 产生与这个系数接近的误差.

可做如下算法改进: 当第 k 步消元前, 交换第 k 行与后 k 行中第 k 个系数 (即 a_{*k}) 绝对值最大的一行. 这种方法称为**列主元消元法**.

结果更稳定的做法: 第 k 步消元前, 找出系数矩阵 $a_{ij}^{(k)}$ $(i, j \in [k, n])$ 中最大的一项 $a_{mn}^{(k)}$, 交换第 k 行与第 m 行, 交换第 k 列与第 n 列. 这种方法称为**全主元消元法**

5.1.3 Gauss-Jordan 消元法

依次地, 第 k $(k=1,2,\cdots,n-1)$ 行 $\times \dfrac{-a_{jk}^{(k)}}{a_{kk}} +$ 第 j $(j=1,2,\cdots,k-1,k+1,\cdots,n)$ 行. 与 Gauss 消元法复杂度量级一致.

5.2 直接分解法

将系数矩阵分解, 例如 $A=LU$, 则

$$Ax=b \Leftrightarrow LUx=b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly=b & (1) \\ Ux=y & (2) \end{cases}$$

5.2.1 Doolittle 分解与 Courant 分解

- L 为单位下三角阵, U 为上三角阵, 称为 Doolittle 分解.
- L 为下三角阵, U 为单位上三角阵, 称为 Doolittle 分解.

分解方法:

- Doolittle 分解: U 的第一行 $\rightarrow L$ 的第一列 $\rightarrow U$ 的第二行 $\rightarrow L$ 的第二列...
- Courant 分解: L 的第一列 $\rightarrow U$ 的第一行 $\rightarrow L$ 的第二列 $\rightarrow U$ 的第二行...

P.S. 该方法与 Gauss 消元法复杂度相同.

三对角阵的追赶法: 将 Courant 方法用于如下三对角阵即可, 计算复杂度 $5n-4$.

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & \\ c_2 & a_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ & & c_n & a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_n & \alpha_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & & \\ & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

对称正定阵的 LDL^T 分解: 对正定阵 $A=(a_{ij})$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

5.3 矩阵的条件数

5.3.1 矩阵范数

定义: 设 $||\cdot||$ 是以 n 阶方阵为变量的实值函数, 且满足下面条件, 则称 $||A||$ 为矩阵 A 的范数.

1. 非负性: $||X|| \geq 0$, $||X||=0 \Leftrightarrow X=0$.
2. 其次性: $\forall a \in \mathbb{R}, ||aX|| = |a| \cdot ||X||$.
3. 三角不等式: $||X+Y|| \leq ||X|| + ||Y||$.
4. 相容性 $||AB|| \leq ||A||\,||B||$

诱导的矩阵范数: 设 $||\cdot||$ 是一种向量范数, 可定义矩阵范数为:

$$||A|| = \sup_{x\in R^n, x\neq 0} \frac{||Ax||}{||x||} = \sup_{x\in R^n, ||x||=1} ||Ax||$$

定义: 设 λ_i 为 A 所有的特征值, 则 $\rho(A)=\max_{1\le i\le n}|\lambda_i|$ 表示 A 的模最大特征值, 称为 A 的**谱半径**.

则对应于 3 中最常见的向量 $p-$ 范数, 有 3 种常见的诱导范数:

- $||A||_1=\max\limits_{1\le j\le n}\sum\limits_{i=1}^{n}|a_{ij}|$
- $||A||_\infty=\max\limits_{1\le j\le n}\sum\limits_{i=1}^{n}|a_{ji}|$
- $||A||_2=\sqrt{\rho(A^TA)}$
- $||A||_E=\sqrt{\sum\limits_{i=1}^{n}\sum\limits_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2}$

定理: λ 为 A 的特征值, $||\cdot||$ 为任一诱导的矩阵范数, 则 $\lambda\le||A||$.

故 $\rho(A)\le||A||$, A 对称时等号成立.

5.3.2 条件数和病态矩阵

定义: $\mathrm{Cond}_p(A)=||A||_p\cdot||A^{-1}||_p$ 称为 $p-$ 范数意义下的条件数.

$p=2$ 时, $\mathrm{Cond}_2(A)=|\lambda|_{min}/|\lambda|_{max}$. 引入条件数用来讨论解随误差的变化, 解的稳定性等. 一般来说, 条件数大的方阵对应着病态的线性方程组, 另外若 $\det(A)$ 很小, 则此矩阵也一般是病态的. 以下二式可表明这样一种关系:

$$b\text{ 受到扰动 }\delta x\text{ 后},\frac{||\delta x||}{||x||}\le\mathrm{Cond}(A)\frac{||\delta b||}{||b||}$$

$$A\text{ 受到扰动 }\delta A\text{ 后},\frac{||\delta x||}{||x||}\le\frac{\mathrm{Cond}(A)\frac{||\delta A||}{||A||}}{1-\mathrm{Cond}(A)\frac{||\delta A||}{||A||}}$$

对于第二式的证明:

对 A 施加一个微扰 δA, 则方程变为 $(A+\delta A)(x+\delta x)=b$, 考虑到 $Ax=b$, 则:

$$A\delta x+\delta A\,x+\delta A\delta x=0$$

等式两边同乘 A^{-1} , 移项得

$$\delta x=-(A^{-1}\delta A\,x+A^{-1}\delta A\delta x)$$

两边取范数,

$$\begin{aligned}||\delta x||&=||A^{-1}\delta A\,x+A^{-1}\delta A\delta x||\le||A^{-1}\delta A\,x||+||A^{-1}\delta A\delta x||\\&\le||A^{-1}||\,||\delta A||\,||x||+||A^{-1}||\,||\delta A||\,||\delta x||\end{aligned}$$

再次移项, 左面只保留 x 相关项

$$\begin{aligned}\frac{||\delta x||}{||x||}\le\frac{||A^{-1}||\,||\delta A||}{1-||A^{-1}||\,||\delta A||}&=\frac{||A^{-1}||\,||A||\frac{||\delta A||}{||A||}}{1-||A^{-1}||\,||A||\frac{||\delta A||}{||A||}}\\&=\frac{\mathrm{Cond}(A)\frac{||\delta A||}{||A||}}{1-\mathrm{Cond}(A)\frac{||\delta A||}{||A||}}\end{aligned}$$

6 解线性方程组的迭代法

6.1 普遍理论

6.1.1 迭代方程的构造

欲写出 $Ax = b$ 等价方程 $x = Gx + g$, 将 A 写成这样的形式: $A = N - P$, 其中 N 人为地取成可逆矩阵, 则:

$$Ax = b \Leftrightarrow (N - P)x = b \Leftrightarrow x = N^{-1}Px + N_{-1}b$$

令 $G = N^{-1}P$ 称作迭代矩阵, $g = N^{-1}b$, 于是我们得到了与原方程等价的有迭代意义的方程, 此方程的不动点即原方程的根.

6.1.2 能够迭代求根的条件

只要 $k \to \infty$ 时 $G^k \to 0$ 迭代即收敛. 由线性代数的理论, 此条件等价于 $\boxed{G \text{ 的谱半径 } \rho(G) \text{ 小于 } \mathbf{1}\text{, 为充分必要条件}}$, 与 x_0 **的初值无关**. 考虑到 $\rho(G) \le ||G||$, 则也可利用范数来判断收敛, $\boxed{\text{充分条件为 } \exists\, p\,,\, s.t.\ ||G||_p < 1}$.

6.2 Jacobi 迭代

方法为: 将第 i 个方程做这样的变形

$$\begin{aligned} &a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n = b_i \\ &\to x_i = -\frac{1}{a_{ii}}(a_{i1}x_1 + \cdots + a_{i,i-1}x_{i-1} + a_{i,i+1}x_{i+1} + \cdots a_{in}x_n) \end{aligned}$$

依次取如下迭代 (k 为迭代次数):

$$x_i^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{ii}}(a_{i1}x_1^{(k)} + \cdots + a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k)} + a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} + \cdots a_{in}x_n^{(k)})$$

迭代矩阵 $B = -D^{-1}(L + U) = I_n - D^{-1}A$, 其中

$$L = \begin{pmatrix} 0 & & & 0 \\ a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & a_{n-1,n} \\ 0 & & & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, a_{nn})$$

则迭代格式收敛的充要条件为 B 的谱半径 $\rho(B) < 1$. 对于 Jacobi 迭代, 有如下保证迭代收敛的**充分条件**.

> **定理:**
> 若 A 满足下列条件之一, 则 Jacobi 迭代收敛.
>
> - A 为**行对角占优阵**, 即 $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$
> - A 为**列对角占优阵**, 即 $|a_{jj}| > \sum_{i \neq j} |a_{ij}|$

6.3 Gauss-Seidel 迭代

在 Jacobi 迭代基础上做一点改动, 取如下迭代形式:

$$x_i^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{ii}}(a_{i1}x_1^{\color{red}(k+1)}t + \cdots + a_{i,i-1}x_{i-1}^{\color{red}(k+1)} + a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} + \cdots a_{in}x_n^{(k)})$$

其迭代矩阵为: $S = -(D + L)^{-1}U$ 迭代格式收敛的充要条件为 S 的谱半径 $\rho(S) < 1$. 对于 Jacobi 迭代, 有如下保证迭代收敛的**充分条件**.

定理:
若 A 满足下列条件之一, 则 Gauss-Seidel 迭代收敛.

- A 为行或列对角占优阵.
- A 为对称正定阵.

6.4 松弛迭代

进一步地改动, 将下式第一项, 加入修正因子 ω:

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - \frac{\omega}{a_{ii}}(a_{i1}x_1^{(k+1)}t + \cdots + a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} + a_{ii}x_i^{(k)} + a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} + \cdots a_{in}x_n^{(k)})$$

其迭代矩阵为: $S_\omega = (D+\omega L)^{-1}((1-\omega)D - \omega U)$.

定理:

- 松弛迭代收敛 $\Rightarrow\ 0 < \omega < 2$.
- 若 A 正定, 则 $0 < \omega < 2$ 时松弛迭代收敛.

6.5 总结

1. Jacobi 迭代和 Gauss-Seidel 迭代均存在收敛性问题, 二者的收敛范围存在交集.
2. 一般情形下 Gauss-Seidel 速度大于 Jacobi 迭代, 但不绝对.
3. 对于松弛迭代, 通常称 $0 < \omega < 1$ 的迭代称为**亚松弛迭代**, $1 < \omega < 2$ 称为**超松弛迭代**, $\omega = 1$ 即为 Gauss-Seidel 迭代.
4. 松弛迭代方法收敛的快慢与松弛因子 $omega$ 的选择有密切关系, 如何选取 ω 使得 $\rho(S_\omega)$ 无很好的解决方法, 经验上可取 $1.4 < \omega < 1.6$.

7 矩阵的特征值与特征向量

7.1 幂法

矩阵的按模最大特征值往往具有特殊重要性, 例如**谱半径**. 幂法是一种经典求矩阵**按模最大特征值**和**相应特征向量**的方法. 其它模较小的特征值由 Wielandt 压缩法和幂法依次再求. $\boxed{\text{幂法要求 } A \text{ 有 } n \text{ 个线性无关的特征向量}}$.
设 A 的特征值为 $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$, 对应的特征向量为 $v_1, v_2, \cdots, v_n$.

算法:
1. 选取初值 $x^{(0)}$, 构造向量 $x^{(k)} = Ax^{(k-1)} = A^k x^{(0)}$
2. 若序列表现为相邻两个向量各分量之比趋于一个常数, 则:

$$\begin{cases} \lambda_1 \approx x_i^{(k+1)}/x_i^{(k)} \\ v_1 \approx x^{(k)} \end{cases}$$

3. 若序列表现为奇偶序列各个分量比分别趋向于常数, 则:

$$\begin{cases} \lambda_1 \approx \sqrt{x_i^{(k+2)}/x_i^{(k)}}p \\ v_1 \approx x^{(k+1)} + \lambda_1 x^{(k)} \\ v_2 \approx x^{(k+1)} - \lambda_1 x^{(k)} \end{cases}$$

4. 若表现为其它, 退出, 需采用其它方法.

为了避免 $k \to \infty$ 迭代所得结果中产生无穷大或无穷小, 将算法做一些改进, 称为**规范化幂法**.

算法:

1. 选取初值 $x^{(0)}$, 记 $y^{(0)} = x^{(0)}/||x^{(0)}||_\infty$, 构造向量序列

$$\begin{cases} x^{(k+1)} = Ay^{(k)} \\ y^{(k+1)} = x^{(k+1)}/||x^{(k+1)}||_\infty \end{cases}$$

2. 若序列收敛, 则:

$$\begin{cases} \lambda_1 \approx ||x^{(k+1)}||_\infty \\ v_1 \approx y^{(k)} \end{cases}$$

3. 若序列表现为奇偶子列分别收敛于两个反号向量, 则:

$$\begin{cases} \lambda_1 \approx -||x^{(k+1)}||_\infty \\ v_1 \approx y^{(k)} \end{cases}$$

4. 若序列的奇偶子列分别收敛, 但不收敛于相反的向量, 记 $\widetilde{x}^{(k+2)} = A^2 y^{(k)}$, 则:

$$\begin{cases} \lambda_1 \approx \sqrt{\widetilde{x}_i^{(k+2)}/y_i^{(k)}} \\ v_1 \approx x^{(k+1)} + \lambda_1 y^{(k)} \\ v_2 \approx x^{(k+1)} - \lambda_1 y^{(k)} \end{cases}$$

5. 其他状况另行考虑.

幂法的总结

- 实用的是规范化的幂法.
- 方法不需考虑最大特征值是否为重根.
- 收敛速度由 $|\lambda_2/\lambda_1|$ 决定, 其值越小收敛速度越快.
- 由于 $A - p\mathbb{I}_n$ 的所有特征值为 $\{\lambda_i - p\}$, 当收敛很慢时可尝试计算 $A - p\mathbb{I}_n$.
- 当 $|\lambda_1| = |\lambda_2|$ 且二者共轭时, 也可求出它们的特征向量.

7.2 反幂法

用于计算 A 的模最小特征值与其相应的特征向量.

由 $Av = \lambda v$ 知 $A^{-1}v = v/\lambda$, 即 A 与 A^{-1} 的特征值互为倒数. 对 A^{-1} 运用幂法求得模最大特征值 μ , 则 $1/\mu$ 即为 A 的模最小特征值, 称为反幂法.

实际计算时, 通常为了避免求逆的运算, 将算法中利用 $x^{(k+1)} = A^{-1}y^{(k)}$ 求得 $x^{(k+1)}$ 的过程改为通过利用解线性方程组 $Ax^{(k+1)} = y^{(k)}$ 实现.

7.3 对称阵的 Jacobi 方法

Jacobi 方法通过构造 Givens 正交阵 Q 作用于 A 上得到 Q^TAQ 来减少非对角元的比重, 当此比重足够小的时候便可认为对角元就是 A 的全部特征值. Givens 矩阵为具有如下形式的正交阵:

$$Q(p,q,\theta) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & \cos\theta & \cdots & \sin\theta & & \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & & -\sin\theta & \cdots & \cos\theta & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

算法:

1. 选取非对角元中绝对值最大的项 $a_{pq} = a_{qp}$.

2. $s = \dfrac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}}$, 解方程 $t^2 + 2st - 1 = 0$, 令 t 为该方程**模较小的根**.

3. 利用下式算出 c, s

$$\begin{cases} c = \dfrac{1}{\sqrt{1+t^2}} \\ s = \dfrac{t}{\sqrt{1+t^2}} \end{cases}$$

4. 构造矩阵 Q , 计算 $Q^T AQ$, 返回 1.

$$Q(p,q) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & c & \cdots & s & & \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & & -s & \cdots & c & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$