计算方法复习 第三版

Eslzzyl

eslzzyl@163.com

2022 年 10 月 27 日

目录

I 引论 **5**
1.1 数值计算注意事项 5
1.2 二分法 5
1.3 误差 5
1.3.1 来源（P9） 5
1.3.2 绝对误差限（P10） 5
1.3.3 有效数字（P10） 5
1.3.4 相对误差限（P11） 5

II 第一章 插值方法 **5**
2.1 拉格朗日插值 5
2.1.1 线性插值（P16） 5
2.1.2 一般情形（P18） 6
2.1.3 误差的事后估计（P21） 6
2.2 牛顿插值（P23） 6
2.2.1 差商（P24） 6
2.2.2 差商形式的牛顿插值公式（P26） 6
2.2.3 差分（P26） 6
2.2.4 差分形式的牛顿插值公式 7
2.3 埃尔米特插值（P28） 7
2.4 分段插值（P30） 7
2.4.1 分段三次插值（P32） 7
2.5 样条函数（P33） 7
2.5.1 三次样条插值 7
2.6 曲线拟合的最小二乘法（P36） 8
2.6.1 直线拟合 8
2.6.2 多项式拟合 8

III 第二章 数值积分 **8**
3.1 机械求积 8
3.1.1 数值求积的基本思想 8
3.1.2 代数精度（P59） 8
3.1.3 插值型的求积公式（P60） 8
3.2 牛顿-柯特斯公式（P61） 9
3.2.1 复化求积（P63） 9
3.3 龙贝格算法（P66） 9
3.4 高斯公式（P71） 9
3.4.1 高斯点的基本特性（P72） 10

IV 第三章 常微分方程的差分方法 10
4.1 欧拉方法 10
4.1.1 欧拉格式（P98） 10
4.1.2 隐式欧拉格式（P99） 10
4.1.3 两步欧拉格式（P99） 10
4.2 改进的欧拉方法 10
4.2.1 梯形格式（P100） 10
4.2.2 改进的欧拉格式 10
4.3 龙格-库塔方法 11
4.3.1 设计思想 11
4.3.2 二阶龙格-库塔方法（P103） 11
4.3.3 三阶龙格-库塔方法（P104） 11
4.3.4 四阶龙格-库塔方法（P105） 11
4.4 亚当姆斯方法（P108） 11
4.4.1 亚当姆斯预报-校正系统（P109） 11
4.5 收敛性与稳定性（P112） 11
4.5.1 收敛性问题 12
4.5.2 稳定性问题 12

V 第四章 方程求根的迭代法 12
5.1 迭代过程的收敛性 12
5.1.1 压缩映像原理（P129） 12
5.1.2 局部收敛性 12
5.1.3 收敛速度 12
5.2 迭代过程的加速 12
5.2.1 经典加速方法（P133） 12
5.2.2 埃特金加速方法（P133） 12
5.3 牛顿法（P135） 13
5.3.1 开方公式（P137） 13
5.3.2 牛顿下山法（P138） 13
5.4 弦截法（P139） 13

VI 第五章 线性方程组的迭代法 13
6.1 雅可比迭代、高斯-塞德尔迭代、超松弛法 13
6.2 向量和矩阵的范数 13
6.2.1 向量的范数（P162） 13
6.2.2 矩阵的范数（P164） 14
6.3 迭代过程的收敛性 14
6.3.1 对角占优方程组 14

VII 第六章 线性方程组的直接法 **15**
7.1 消去法 15
7.1.1 约当消去法（P172） 15
7.1.2 高斯消去法（P176） 15
7.1.3 选主元素（P179） 15
7.2 追赶法 15
7.2.1 追赶法的计算公式（P182） 15
7.2.2 追赶法的代数基础（P183） 15
7.3 误差分析 16
7.3.1 方程组的病态 16
7.3.2 精度分析 16

I 引论

1.1 数值计算注意事项

- 选择数值稳定的计算公式
- 避免两个相近的数相减
- 绝对值太小（接近零）的数不能作除数
- 避免大数吃掉小数
  - 求和时, 从小数加到大数, 而不是反过来。
- 简化计算步骤, 减少运算次数, 避免误差积累
- 控制舍入误差的累积和传播

有效的算法：运算量少，应用范围广，需用存储单元少, 逻辑结构简单, 便于编写计算机程序, 而且计算结果可靠。

1.2 二分法

想要二分法达到误差不超过 10^{-m}，则应该二分 k 次，且有

$$2^{-k} < 10^{-m}, \quad k\text{取可能的最大值}$$

1.3 误差

1.3.1 来源（P9）

- 计算误差
  - 截断误差: 求解方法本身的限制, 如果是近似的数值解法，则不可能完全精确。
  - 舍入误差: 计算机字长有限, 数据存储时不可能无穷精确。
- 固有误差
  - 模型误差（本课程不考虑）
  - 测量误差（同上）

1.3.2 绝对误差限（P10）

绝对误差限/误差限/精度 ϵ：满足 $|x - x^*| \le \epsilon$

四舍五入得到的结果，其误差限为最末一位的半个单位。

1.3.3 有效数字（P10）

对 x^* 的规格化表示

$$x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m \tag{1.1}$$

若

$$|x - x^*| \le \frac{1}{2} \times 10^{m-l}, 1 \le l \le n \tag{1.2}$$

则称近似值 x 有 l 位有效数字。

准确值可认为有无穷位有效数字。

有效数字相同，误差限不一定相同。如 12345 和 0.12345 都有 5 位有效数字，但前者误差限为 0.5，后者为 0.000005。

1.3.4 相对误差限（P11）

若

$$\frac{|x - x^*|}{x} \le \epsilon \tag{1.3}$$

则 ϵ 是 x 的相对误差限。

II 第一章 插值方法

内插：插值点在插值区间内的插值。

外推：插值点在插值区间外的插值。不可靠。

2.1 拉格朗日插值

2.1.1 线性插值（P16）

点斜式:

$$p_1(x) = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0) \tag{2.1}$$

2.1.2 一般情形（P18）

插值基函数

$$l_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j} \tag{2.2}$$

拉格朗日插值公式

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) y_k = \sum_{k=0}^{n} \left(\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j} \right) y_k \tag{2.3}$$

$p_n(x)$ 也可表为 $L_n(x)$，注意 $L_n(x)$ 和 $l_k(x)$ 不是同一回事。

拉格朗日插值余项（即截断误差）

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n} (x-x_k) \tag{2.4}$$

其中 $\xi \in [a,b]$

2.1.3 误差的事后估计（P21）

直接用计算结果估计误差的方法称为**事后估计法**。

公式:

$$y - y_1 \approx \frac{x-x_1}{x_2-x_1}(y_2-y_1) \tag{2.5}$$

通过公式计算出估计误差后，可以将结果加上误差得到更精确的修正值。

埃特金插值

本节为选讲，故略。

2.2 牛顿插值（P23）

2.2.1 差商（P24）

一阶差商

$$f(x_0,x_1) = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0} \tag{2.6}$$

二阶差商：即一阶差商的差商

$$f(x_0,x_1,x_2) = \frac{f(x_1,x_2)-f(x_0,x_1)}{x_2-x_0} \tag{2.7}$$

推广到 n 阶差商:

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n) = \frac{f(x_1,x_2,\cdots,x_n)-f(x_0,x_1,\cdots,x_{n-1})}{x_n-x_0} \tag{2.8}$$

差商的值与节点的排列顺序无关，即差商的**对称性**。

定理 2.1 在 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 所界定的范围 $\Delta : \left[\min\limits_{0\le i\le n} x_i, \max\limits_{0\le i\le n} x_i\right]$ 内存在一点 ξ，使成立

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$$

2.2.2 差商形式的牛顿插值公式（P26）

公式

$$\begin{aligned} p_n(x) = f(x_0) &+ f(x_0,x_1)(x-x_0) + \\ & f(x_0,x_1,x_2)(x-x_0)(x-x_1) + \cdots + \\ & f(x_0,x_1,\cdots,x_n)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \end{aligned} \tag{2.9}$$

余项（截断误差）

$$R(x) = f(x_0,x_1,\cdots,x_n,x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \tag{2.10}$$

2.2.3 差分（P26）

关于函数值 $f(x_i)=y_i$ 的**一阶差分**定义为

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$$

二阶差分定义为一阶差分的差分

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i$$

n 阶差分定义为

$$\Delta^w y_i = \Delta^{n-1} y_{i+1} - \Delta^{n-1} y_i$$

节点等距的情况下，差商可用差分来表示。设步长 $h = x_{i+1} - x_i$，有

$$f(x_i,x_{i+1},\cdots,x_{i+k}) = \frac{1}{k!h^k}\Delta^k y_i$$

2.2.4 差分形式的牛顿插值公式

令 $x = x_0 + th$，则有

$$p_n(x_0+th) = y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t(t-1)}{2}\Delta^2 y_0 + \cdots + \frac{t(t-1)(t-2)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n y_0$$

这一公式称为函数插值的**有限差公式**。

2.3 埃尔米特插值（P28）

略

2.4 分段插值（P30）

当拉格朗日插值的插值次数 n 增大时，插值函数 $p_n(x)$ 会在插值区间的两端发生激烈的震荡，称为**龙格现象**。龙格现象说明，在大范围内使用高次插值，逼近的效果往往是不理想的。

分段插值的优缺点：

- 优点：显式算法，方法简单，收敛性好，有局部性，不易受到其他区间的影响。
- 缺点：需要各个节点的导数值，要求高；光滑性差。

2.4.1 分段三次插值（P32）

公式：

$$S_3(x) = \varphi_0\left(\frac{x-x_i}{h_i}\right)y_i + \varphi_1\left(\frac{x-x_i}{h_i}\right)y_{i+1} + h_i\psi_0\left(\frac{x-x_i}{h_i}\right)y_i' + h_i\psi_1\left(\frac{x-x_i}{h_i}\right)y_{i+1}' \tag{2.11}$$

其中 $h_i = x_{i+1} - x_i$，而 $\varphi_0, \varphi_1, \psi_0, \psi_1$ 由式 (2.17) 给出（看右边）。

误差

$$|f(x) - S_3(x)| \le \frac{h^4}{384}\max_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)| \tag{2.12}$$

2.5 样条函数（P33）

称具有分划

$$\mathit{\Delta} : a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

的分段 k 次式 $S_k(x)$ 为 k **次样条函数**：如果它在每个内节点 $x_i(1 \le i \le n-1)$ 上具有直到 $k-1$ 阶连续导数。点 x_i 称作样条函数的**节点**。

样条函数简称样条，其特点是，既是充分光滑的，又保留有一定的间断性。

样条插值其实是一种改进的分段插值。一次样条插值和一次分段插值是同一回事。（P33 底部）

2.5.1 三次样条插值

原理比较复杂，只给出求解过程：

首先计算 α_i 和 β_i

$$\alpha_i = \frac{h_{i-1}}{h_{i-1}+h_i} \tag{2.13}$$

$$\beta_i = 3\left[(1-\alpha_i)\frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}} + \alpha_i\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i}\right] \tag{2.14}$$

其中 $h_i = x_{i+1} - x_i$（所以 α_i 的 i 是从 1 开始取的）。

然后列出如下关于 m_i 的方程组

$$\begin{cases} 2m_1 + \alpha_1 m_2 = \beta_1 - (1-\alpha_1)y_0' \\ (1-\alpha_2)m_1 + 2m_2 + \alpha_2 m_3 = \beta_2 \\ \cdots\cdots \\ (1-\alpha_{n-1})m_{n-3} + 2m_{n-2} + \alpha_{n-2}m_{n-1} = \beta_{n-2} \\ (1-\alpha_{n-1})m_{n-2} + 2m_{n-1} = \beta_{n-1} - \alpha_{n-1}y_n' \end{cases} \tag{2.15}$$

用追赶法（7.2）解方程组，得到 $m_1, m_2, \cdots, m_{n-1}$

然后判断 x 所在区间 $[x_i, x_{i+1}]$，最后用下式

$$S_3(x) = \varphi_0\left(\frac{x-x_i}{h_i}\right)y_i + \varphi_1\left(\frac{x-x_i}{h_i}\right)y_{i+1} + h_i\psi_0\left(\frac{x-x_i}{h_i}\right)m_i + h_i\psi_1\left(\frac{x-x_i}{h_i}\right)m_{i+1} \tag{2.16}$$

插出 $y = S_3(x)$，得到结果。其中

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = (x-1)^2(2x+1) \\ \varphi_1(x) = x^2(-2x+3) \\ \psi_0(x) = x(x-1)^2 \\ \psi_1(x) = x^2(x-1) \end{cases} \tag{2.17}$$

2.6 曲线拟合的最小二乘法（P36）

预测值 $\widehat{y}_i$ 和实测值 y_i 的差称为**残差**:

$$e_i = y_i - \widehat{y}_i \tag{2.18}$$

构造拟合曲线可选用如下三种准则之一:

(1). 使残差的最大绝对值最小: $\max\limits_i |e_i| = min$

(2). 使残差的绝对值之和最小: $\sum_i |e_i| = min$

(3). 使残差的平方和最小: $\sum_i e_i^2 = min$

其中使用 (3) 的方法称为最小二乘法。

2.6.1 直线拟合

$$\begin{cases} aN + b\sum x_i = \sum y_i \\ a\sum x_i + b\sum x_i^2 = \sum x_i y_i \end{cases} \tag{2.19}$$

2.6.2 多项式拟合

拟合对象是 m 次多项式

$$y = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j \tag{2.20}$$

待定系数 $a_0, a_1, \cdots, a_m$

拟合的正则方程组如下:

$$\begin{cases} a_0 N + a_1 \sum x_i + \cdots + a_m \sum x_i^m = \sum y_i \\ a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 + \cdots + a_m \sum x_i^{m+1} = \sum x_i y_i \\ \cdots \\ a_0 \sum x_i^m + a_1 \sum x_i^{m+1} + \cdots + a_m \sum x_i^{2m} = \sum x_i^m y_i \end{cases} \tag{2.21}$$

III 第二章 数值积分

3.1 机械求积

3.1.1 数值求积的基本思想

根据积分中值定理，存在一点 $\xi \in [a, b]$，使得

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)f(\xi) \tag{3.1}$$

其中 $f(\xi)$ 称为区间 $[a, b]$ 上的平均高度，根据这个平均高度的估计方法的不同，可以得到一些公式。

梯形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] \tag{3.2}$$

中矩形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \tag{3.3}$$

辛甫生公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] \tag{3.4}$$

更一般地，取 $[a, b]$ 内若干个点 x_k 处的高度 $f(x_k)$，加权平均得到平均高度 $f(\xi)$，这类公式的一般形式是

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{3.5}$$

其中 x_k 称为**求积节点**，A_k 称为**求积系数**。

3.1.2 代数精度（P59）

若公式 (3.5) 对于一切次数 $\leq m$ 的多项式是准确的，但对于 $m+1$ 次多项式（指 x 的次数）不准确，就称它具有 m **次代数精度**。

梯形公式和中矩形公式有一次代数精度，辛甫生公式有三次代数精度。

求给定插值公式的代数精度：令其对 $f(x) = 1, f(x) = x, f(x) = x^2, \cdots, f(x) = x^n$ 准确成立，找到使得对 $f(x) = x^i$ 准确成立而对 $f(x) = x^{i+1}$ 不准确成立的 i 值，即为所求值。

3.1.3 插值型的求积公式（P60）

对于式 (3.5)，如果其所有 A_k 均满足

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx \tag{3.6}$$

其中 $l_k(x)$ 有如下形式

$$l_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}$$

则这样的求积公式是**插值型**的。

定理 3.1 *形如（3.5）的求积公式至少具有 n 次代数精度的充要条件是：它是插值型的。*

3.2 牛顿-柯特斯公式（P61）

设分 $[a,b]$ 为 n 等分，步长 $h=\frac{b-a}{n}$，取等分点 $x_k=a+kh\ (k=0,1,\cdots,n)$ 构造出的插值型求积公式

$$I_n=(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_kf(x_k) \tag{3.7}$$

称作**牛顿-柯特斯公式**，其中 C_k 称为**柯特斯系数**。

一阶牛顿-柯特斯公式就是梯形公式。

二阶牛顿-柯特斯公式就是辛甫生公式。

四阶牛顿-柯特斯公式

$$\begin{aligned}C=&\frac{b-a}{90}\Big[7f(x_0)+32f(x_1)\\&+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)\Big]\end{aligned} \tag{3.8}$$

称为**柯特斯公式**。

更高阶的牛顿-柯特斯公式不稳定，一般不用。一般令 $n\leq 7$。

由定理3.1知，n 阶牛顿-柯特斯公式**至少**具有 n 次代数精度。实际上辛甫生公式（二阶）和柯特斯公式（四阶）分别具有 3 次和 5 次代数精度。

3.2.1 复化求积（P63）

复化求积法是指，先用低阶的求积公式求得每个子段 $[x_k,x_{k+1}]$ 上的积分值 I_k，然后将它们累加求和，用 $\sum_{k=0}^{n-1}I_k$ 作为积分 I 的近似值。

在下面的一系列式子中，都有 $h=x_{k+1}-x_k$。

复化梯形公式

$$T_n=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right] \tag{3.9}$$

误差

$$I-T_n\approx-\frac{h^2}{12}\left[f'(b)-f'(a)\right] \tag{3.10}$$

复化辛甫生公式

$$S_n=\frac{h}{6}\left[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right] \tag{3.11}$$

误差

$$I-S_n\approx-\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4\left[f'''(b)-f'''(a)\right] \tag{3.12}$$

复化柯特斯公式

$$\begin{aligned}C_n=&\frac{h}{90}\Big[7f(a)+32\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{4}})\\&+12\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})+32\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{3}{4}})\\&+14\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+7f(b)\Big]\end{aligned} \tag{3.13}$$

误差

$$I-C_n\approx-\frac{2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6\left[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right] \tag{3.14}$$

3.3 龙贝格算法（P66）

根据事后误差估计法修正上节的公式（过程见 P68），可以得到如下迭代加速公式：

$$S_n=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n \tag{3.15}$$

$$C_n=\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n \tag{3.16}$$

$$R_n=\frac{64}{63}C_{2n}-\frac{1}{63}C_n \tag{3.17}$$

于是，根据 $T_1,T_2,T_4,T_8,T_{16},\cdots$，可以得到 $S_1,S_2,S_4,S_8,\cdots$，可以得到 $C_1,C_2,C_4,\cdots$，可以得到 $R_1,R_2,\cdots$。这种加速方法称为**龙贝格算法**。注意它已经不属于牛顿-柯特斯公式。

3.4 高斯公式（P71）

牛顿-柯特斯公式的求积节点是等分的，如果能够适当地选取这些节点，可以使求积公式具有 $2n-1$ 次代数精度。这种公式称为**高斯公式**，相应的求积节点 x_k 称为**高斯点**。通式如下：

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx\sum_{k=1}^{n}A_kf(x_k) \tag{3.18}$$

高斯公式也是插值型求积公式。（课本 P71 指出“本章所考察的求积公式都是插值型的”）

一点高斯公式就是中矩形公式（$2\times1-1=1$ 次代数精度）：

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx 2f(0) \tag{3.19}$$

其高斯点 $x_1=0$。

两点高斯公式（$2\times 2-1=3$ 次代数精度）：

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)+f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \tag{3.20}$$

其高斯点 $x_1=-\frac{1}{\sqrt{3}}, x_2=\frac{1}{\sqrt{3}}$。

对上式 (3.20) 做变换，可以得到 $[a,b]$ 上的高斯公式：

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx &\frac{b-a}{2}\left[f\left(-\frac{b-a}{2\sqrt{3}}+\frac{a+b}{2}\right)\right.\\ &\left.+f\left(\frac{b-a}{2\sqrt{3}}+\frac{a+b}{2}\right)\right]\end{aligned} \tag{3.21}$$

三点高斯公式（$2\times 3-1=5$ 次代数精度）：

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)+\frac{8}{9}f(0)+\frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right) \tag{3.22}$$

3.4.1 高斯点的基本特性（P72）

定理 3.2 节点 x_k $(k=1,2,\cdots,n)$ 是高斯点的充要条件是，多项式

$$\omega(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)$$

满足

$$\int_{-1}^{1} x^k\omega(x)dx=0,\quad k=0,1,\cdots,n-1$$

IV 第三章 常微分方程的差分方法

4.1 欧拉方法

4.1.1 欧拉格式（P98）

微分方程的数值解法首先就是要消除导数项，这一步称为**离散化**。

微分方程可以写成

$$y'=f(x,y) \tag{4.1}$$

的形式。用差商代替导数，整理可得**欧拉 (Euler) 格式**：

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n),\quad n=0,1,2,\cdots \tag{4.2}$$

在 y_n 为准确（即 $y_n=y(x_n)$）的前提下估计误差 $y(x_{n+1})-y_{n+1}$。这种误差称为**局部截断误差**。

称一种数值方法的精度是 p 阶的，如果其局部截断误差为 $O(h^{p+1})$。

欧拉格式为一阶方法。

4.1.2 隐式欧拉格式（P99）

若将微分方程 $y'(x_{n+1})=f(x_{n+1},y(x_{n+1}))$ 中的导数项用向后差商替代，则可得到

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_{n+1},y_{n+1}) \tag{4.3}$$

称为隐式欧拉格式。也是一阶方法。

4.1.3 两步欧拉格式（P99）

用中心差商替代导数项，可以得到两步欧拉格式

$$y_{n+1}=y_{n-1}+2hf(x_n,y_n) \tag{4.4}$$

这是一种二阶方法。

4.2 改进的欧拉方法

思路是通过两端积分，将微分方程的导数项转换为积分项，然后采用数值求积方法解决。

4.2.1 梯形格式（P100）

公式如下：

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}\left[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})\right] \tag{4.5}$$

梯形格式是显式欧拉格式 (4.2) 和隐式欧拉格式 (4.3) 的算术平均。这是一种隐式格式。

梯形格式具有二阶精度（存疑）。

4.2.2 改进的欧拉格式

先用欧拉方法求一个 y_{n+1} 的近似值，然后代替式4.5右端的 y_{n+1}，得到校正值，合起来写是

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}\left[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_n+hf(x_n,y_n))\right] \tag{4.6}$$

称为改进的欧拉格式。这是一种一步显式格式。

4.3 龙格-库塔方法

4.3.1 设计思想

如果设法在 $[x_n, x_{n+1}]$ 内多预报几个点的斜率值，然后将它们加权平均作为区间上的平均斜率 K^*，则可能得到更高精度的方法。

4.3.2 二阶龙格-库塔方法（P103）

二阶龙格-库塔方法有两种常见形式(解释见课本)。第一种形式就是改进的欧拉格式。第二种格式又称**中点格式**:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hK_2 \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_n + \frac{h}{2}K_1\right) \end{cases} \tag{4.7}$$

4.3.3 三阶龙格-库塔方法（P104）

其中的一种:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_n + \frac{h}{2}K_1\right) \\ K_3 = f\left(x_{n+1}, y_n + h(-K_1 + 2K_2)\right) \end{cases} \tag{4.8}$$

4.3.4 四阶龙格-库塔方法（P105）

其中的一种:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n = \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_n + \frac{h}{2}K_1\right) \\ K_3 = f\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_n + \frac{h}{2}K_2\right) \\ K_4 = f\left(x_{n+1}, y_n + hK_3\right) \end{cases} \tag{4.9}$$

龙格-库塔方法要求解具有良好的光滑性。如果光滑性差, 那么龙格-库塔方法可能不如改进的欧拉方法。

4.4 亚当姆斯方法（P108）

（本节疑似不考）

记 $y'_{n-k} = f(x_{n-k}, y_{n-k})$（差商），则有如下显式格式:

二阶显式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3y'_n - y'_{n-1}) \tag{4.10}$$

三阶显式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(23y'_n - 16y'_{n-1} + 5y'_{n-2}) \tag{4.11}$$

四阶显式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55y'_n - 59y'_{n-1} + 37y'_{n-2} - 9y'_{n-3}) \tag{4.12}$$

此外还有如下隐式格式:

二阶隐式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(y'_{n+1} + y'_n) \tag{4.13}$$

三阶隐式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5y'_{n+1} + 8y'_n - y'_{n-1}) \tag{4.14}$$

四阶隐式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9y'_{n+1} + 19y'_n - 5y'_{n-1} + y'_{n-2}) \tag{4.15}$$

4.4.1 亚当姆斯预报-校正系统（P109）

类似改进的欧拉方法，通过显式、隐式亚当姆斯格式可以得到**亚当姆斯预报-校正系统**，下面是四阶的情况:

预报

$$\overline{y}_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55y'_n - 59y'_{n-1} + 37y'_{n-2} - 9y'_{n-3})$$

$$\overline{y}'_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$$

校正

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9\overline{y}'_{n+1} + 19y'_n - 5y'_{n-1} + y'_{n-2})$$

$$y'_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$$

使用时，y_{n+1} 是输出的结果，y'_{n+1} 用于为后续插值点提供数据。

此预报-校正系统的事后误差估计与补偿公式请见课本 P111。

4.5 收敛性与稳定性（P112）

主要内容略。

4.5.1 收敛性问题

对于任意固定的 $x_n = x_0 + nh$, 如果数值解 y_n 当 $h \to 0$（同时 $n \to \infty$）时趋向于准确解 $y(x_n)$, 则称该方法是**收敛**的。

4.5.2 稳定性问题

欧拉方法是条件稳定的。

隐式欧拉格式是恒稳定（无条件稳定）的。

V 第四章 方程求根的迭代法

5.1 迭代过程的收敛性

对一般方程 $f(x)=0$, 为了使用迭代法, 需要将其改写成 $x=\varphi(x)$ 的格式, 其中 $\varphi(x)$ 成为迭代函数。

迭代公式：$x_{k+1}=\varphi(x_k), \quad k=0,1,2,\cdots$

如果 x_k 有极限，则称**迭代收敛**。

几何意义：求根问题在几何上就是确定曲线 $y=\varphi(x)$ 与直线 $y=x$ 的交点。

5.1.1 压缩映像原理（P129）

定理 5.1 设 $\varphi(x)$ 在 $[a,b]$ 上具有连续的一阶导数，且满足下列两项条件：

(1). 对于任意 $x\in[a,b]$，总有 $\varphi\in[a,b]$；

(2). 存在 $0\le L\le 1$，使对于任意 $x\in[a,b]$ 成立

$$|\varphi'(x)|\le L \tag{5.1}$$

则迭代过程 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 对任意初值 $x_0\in[a,b]$ 均收敛于方程 $x=\varphi(x)$ 的根 x^*，且有下列误差估计式

$$|x^*-x_k|\le\frac{1}{1-L}|x_{k+1}-x_k| \tag{5.2}$$

$$|x^*-x_k|\le\frac{L^k}{1-L}|x_1-x_0| \tag{5.3}$$

5.1.2 局部收敛性

称一种迭代过程在根 x^* **邻近收敛**，如果存在邻域 $\varDelta$：$|x-x^*|\le\delta$，使迭代过程对于任意初值 $x_0\in\varDelta$ 均收敛。这种在根的邻近所具有的收敛性称为**局部收敛性**。

定理 5.2 设 $\varphi(x)$ 在 $x\varphi(x)$ 的根 x^* 邻近有连续一阶导数，且成立

$$|\varphi'(x^*)|\le 1$$

则迭代过程 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 在 x^* 邻近具有局部收敛性。

5.1.3 收敛速度

如果迭代误差 $e_k=x^*-x_k$ 当 $k\to\infty$ 时成立

$$\frac{e_{k+1}}{e_k^p}\to c \quad (c\ne 0\text{ 常数})$$

则称迭代过程是 p **阶收敛的**。$p=1$ 时称**线性收敛**, $p=2$ 时称平方收敛。

定理 5.3 设 $\varphi(x)$ 在 $x=\varphi(x)$ 的根 x^* 邻近有连续二阶导数，且

$$|\varphi'(x^*)|\le 1$$

则 $\varphi'(x^*)\ne 0$ 时迭代过程为线性收敛；而当 $\varphi'(x^*)=0$，$\varphi''(x^*)\ne 0$ 时为平方收敛。

5.2 迭代过程的加速

5.2.1 经典加速方法（P133）

加速迭代公式（P133）

$$x_{k+1}=\frac{1}{1-L}\left[\varphi(x_k)-Lx_k\right] \tag{5.4}$$

其中 $L=\varphi'(x_0)$。

5.2.2 埃特金加速方法（P133）

经典方法的 L 需要求导得到, 此法的好处是不需要求导。

迭代 $\overline{x}_{k+1}=\varphi(x_k)$

迭代 $\widetilde{x}_{k+1}=\varphi\left(\overline{x}_{k+1}\right)$

改进 $x_{k=1}=\widetilde{x}_{k+1}-\frac{(\widetilde{x}_{k+1}-\overline{x}_{k+1})^2}{\widetilde{x}_{k+1}-2\overline{x}_{k+1}+x_k}$

5.3 牛顿法（P135）

牛顿公式:

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{5.5}$$

几何解释：P136

定理 5.4 牛顿法在 $f(x)=0$ 的单根 x^* 附近平方收敛。

5.3.1 开方公式（P137）

使用牛顿法解二次方程 $x^2-c=0$ 即得开方公式:

$$x_{k+1}=\frac{1}{2}\left(x_k+\frac{c}{x_k}\right) \tag{5.6}$$

定理 5.5 开方公式对于任意初值 $x_0>0$ 均平方收敛。

5.3.2 牛顿下山法（P138）

若初值 x_0 偏离 x^* 较远，则牛顿法可能发散。为了防止发散，需要额外保证函数值单调下降:

$$|f(x_{k=1})|<|f(x_k)| \tag{5.7}$$

因此采用下列迭代公式

$$x_{k+1}=x_k-\lambda\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{5.8}$$

其中 $0<\lambda\le 1$ 称为**下山因子**。

操作方法：从 $\lambda=1$ 开始反复将 λ 的值减半试算，一旦上面的单调性条件成立，则认为“下山成功”。反之若找不到合适的下山因子，则认为“下山失败”，此时需重选 x_0 再下山。

5.4 弦截法（P139）

弦截法的思想是，用差商 $\frac{f(x_k)-f(x_0)}{x_k-x_0}$ 代替牛顿法中的导数项。

公式:

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f(x_k)-f(x_0)}(x_k-x_0) \tag{5.9}$$

弦截法为线性收敛。

如果使用差商 $\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}$ 替代牛顿公式中的导数项，则得到**快速弦截法**:

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f(x_k)-f(x_{k-1})}(x_k-x_{k-1}) \tag{5.10}$$

这是一种两步方法，使用时需要先提供两个开始值 x_0,x_1。

VI 第五章 线性方程组的迭代法

6.1 雅可比迭代、高斯-塞德尔迭代、超松弛法

这部分参考课本 P156-161，结合例子容易理解。

松弛法:

$$x_i^{(k+1)}=(1-\omega)x_i^{(k)}+\omega\times \text{G-S 迭代值} \tag{6.1}$$

其中 $1<\omega<2$ 的松弛法称为**超松弛法（SOR 方法）**。

6.2 向量和矩阵的范数

6.2.1 向量的范数（P162）

任给向量 $\mathbf{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$,其**范数**记 $\|x\|$，它是一个实数，且满足下列三项条件:

(1) 对于任意向量 $\mathbf{x}$，$\|\mathbf{x}\|\ge 0$，当且仅当 $\mathbf{x}=\mathbf{0}$ 时 $\|\mathbf{x}\|=0$。

(2) 对于任意实数 λ 及任意向量 $\mathbf{x}$

$$\|\lambda\mathbf{x}\|=|\lambda|\cdot\|\mathbf{x}\|$$

(3) 对于任意向量 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$，有

$$\|\mathbf{x}+\mathbf{y}\|\le\|\mathbf{x}\|+\|\mathbf{y}\|$$

其中，性质(3)称作向量范数的**三角不等式**。

p - 范数通式：

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \tag{6.2}$$

常用范数：

(1) 2 - 范数（长度）

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

(2) 1 - 范数

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

(3) ∞ - 范数

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1\le i\le n}|x_i|$$

定理 6.1 *对于任意向量* $\mathbf{x}$，*有*

$$\lim_{p\to\infty}\|\mathbf{x}\|_p = \|\mathbf{x}\|_\infty \tag{6.3}$$

如果存在正数 c_1, c_2，使对于任意向量 $\mathbf{x}$ 均有

$$\|\mathbf{x}\|_p \le c_1\|\mathbf{x}\|_p, \quad \|\mathbf{x}\|_q \le c_2\|\mathbf{x}\|_p$$

则称范数 $\|\cdot\|_p$ 与 $\|\cdot\|_q$ 等价。范数的等价关系有**传递性**。

定理 6.2 *任何范数* $\|\mathbf{x}\|_p$ $(p<\infty)$ *均与* $\|\mathbf{x}\|_\infty$ *等价，因而任何两种* p *- 范数彼此都是等价的。*

定理 6.3 *在空间* $\mathbb{R}^n$ *中，向量序列* $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ *收敛于向量* $\mathbf{x}$ *的充要条件是对* $\mathbf{x}$ *的任意范数* $\|\cdot\|$，*有：*

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

6.2.2 矩阵的范数（P164）

设 $\mathbf{A}$ 是 n 阶方阵，$\|\mathbf{x}\|$ 为某范数，称

$$\|\mathbf{A}\| = \max_{x\ne 0}\frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|}$$

为矩阵 $\mathbf{A}$ 的从属于该向量范数的范数，或称矩阵 $\mathbf{A}$ 的范数，记为 $\|\mathbf{A}\|$。

矩阵范数的性质：

(1)（正定性）对任意方阵 $\mathbf{A}$，$\|\mathbf{A}\|\ge 0$，当且仅当 $\mathbf{A}=\mathbf{0}$ 时 $\|\mathbf{A}\|=0$。

(2)（齐次性）对任意实数 λ 和任意方阵 $\mathbf{A}$，有

$$\|\lambda\mathbf{A}\| = |\lambda|\|\mathbf{A}\|$$

(3) 对任意两个同阶方阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$，有

$$\|\mathbf{A}+\mathbf{B}\| \le \|\mathbf{A}\| + \|\mathbf{B}\| \quad \text{（三角不等式）}$$

$$\|\mathbf{AB}\| \le \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{B}\| \quad \text{（相容性）}$$

有什么样的向量范数, 就有什么样的矩阵范数。因此有矩阵 $\mathbf{A}$ 的 p - 范数：（略）

矩阵 $\mathbf{A}$ 的**行范数**：

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}| \tag{6.4}$$

矩阵 $\mathbf{A}$ 的**列范数**：

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}| \tag{6.5}$$

矩阵 $\mathbf{A}$ 的 **F-范数**：

$$\|\mathbf{A}\|_F = \left(\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}a_{ij}^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{6.6}$$

矩阵 $\mathbf{A}$ 的 **2-范数（谱范数）**：

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \left[\lambda_{\max}(A^TA)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{6.7}$$

其中，$\lambda_{\max}$ 是矩阵 $\mathbf{A}$ 的最大特征值。矩阵 $\mathbf{A}$ 为对称矩阵时，它的 2-范数和谱半径相等。

易错：不要忽略了绝对值符号！

6.3 迭代过程的收敛性

雅可比迭代和高斯-塞德尔迭代公式都可以写成如下形式

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{GX}^{(k)} + \mathbf{b} \tag{6.8}$$

其中 $\mathbf{G}$ 称为公式 ()6.8) 的**迭代矩阵**。

定理 6.4 *若迭代矩阵* $\mathbf{G}$ *满足*

$$\|\mathbf{G}\| < 1 \tag{6.9}$$

则迭代公式 ()6.8) 对于任意初值 $\mathbf{x}^{(0)}$ *均收敛。*

6.3.1 对角占优方程组

如果 n 阶方阵 $\mathbf{A}=(a_{ij})_{n\times n}$ 的主对角线元素的绝对值大于同行其他元素的绝对值之和，则称其为**对角占优矩阵**。系数矩阵为对角占优矩阵的线性方程组称为**对角占优方程组**。

定理 6.5 *若* A *为对角占优矩阵，则它是非奇异的，且它对应的线性方程组的雅可比迭代公式和高斯-塞德尔迭代公式都收敛。*

VII 第六章 线性方程组的直接法

7.1 消去法

7.1.1 约当消去法（P172）

约当消去法: 每一步在一个方程中保留某个变元, 而从其他方程中消去这个变元, 反复消元后, 方程组的每个方程都只剩下一个变元。约当消去法的总计算量约为 $\frac{n^3}{3}$，n 为方程个数。

7.1.2 高斯消去法（P176）

这是约当消去法的改进版本。计算量约为约当消去的 50% 左右。

7.1.3 选主元素（P179）

略

7.2 追赶法

有如下三**对角阵**:

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \cdots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & a_n & b_n \end{bmatrix} \tag{7.1}$$

定理 7.1 假设上面的三对角阵 *(7.1)* 为对角占优，则它是非奇异的，且以 *(7.1)* 为系数矩阵的方程组有唯一解。

7.2.1 追赶法的计算公式（P182）

追的过程（消元过程）：按照如下顺序计算系数 $u_1 \to u_2 \to \cdots \to u_{n-1}$ 和 $y_1 \to y_2 \to \cdots \to y_n$。

$$\begin{aligned} u_1 &= \frac{c_1}{b_1}, \quad y_1 = \frac{f_1}{b_1} \\ u_i &= \frac{c_i}{b_i - u_{i-1}a_i}, \quad i = 2,3,\cdots,n-1 \\ y_i &= \frac{f_i - y_{i-1}a_i}{b_i - u_{i-1}a_i}, \quad i = 2,3,\cdots,n \end{aligned} \tag{7.2}$$

a_i, b_i, c_i 都是矩阵 (7.1) 中的值，f_i 是对应方程组等号右边的数排成的向量。

赶的过程（回代过程）：按照下面的式子逆序求出解 $x_n \to x_{n-1} \to \cdots \to x_1$。

$$\begin{aligned} x_n &= y_n \\ x_i &= y_i - u_i x_{i+1}, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{aligned} \tag{7.3}$$

追赶法的计算量仅为 $5n$ 次乘除法。

7.2.2 追赶法的代数基础（P183）

有如下**单位上二对角阵**

$$\mathbf{U}=\begin{bmatrix} 1 & u_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & 1 & u_2 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \cdots & 1 & u_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{7.4}$$

和如下**下二对角阵**

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix} d_1 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ a_2 & d_2 & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & a_{n-1} & d_{n-1} & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & a_n & d_n \end{bmatrix} \tag{7.5}$$

(类似地, 可以得到**单位下二对角阵**和**上二对角阵**的形式)

定理 7.2 如果矩阵 *(7.1)* 为对角占优，则它可以：

- 分解为 $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ 的形式，其中 $\mathbf{L}$ 为单位下二对角阵，$\mathbf{U}$ 为上二对角阵。此分解称为**杜里特尔 *(Doolittle)* 分解**。
- 分解为 $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ 的形式，其中 $\mathbf{L}$ 为下二对角阵，$\mathbf{U}$ 为单位上二对角阵。此分解称为**克劳特 *(Crout)* 分解**。

且上述两种分解都是唯一的。

平方根法

此为选讲内容，故略。

7.3 误差分析

7.3.1 方程组的病态

系数只有微小差别，解却大不相同的方程组称作是**病态的**。

记

$$\mathrm{cond}(\mathbf{A}) \equiv \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{A}\|$$

为矩阵 $\mathbf{A}$ 的**条件数**。则系数矩阵 $\mathbf{A}$ 和右端项 $\mathbf{b}$ 导致的误差估计式可以分别表示为

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \mathrm{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

与

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \frac{\mathrm{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}{1-\mathrm{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}$$

条件数 $\mathrm{cond}(A)$ 刻画了方程组“病态”的程度。

不能用行列式值 $\det(A)$ 是否很小来衡量方程组 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ 的病态程度。

7.3.2 精度分析

将近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ 代回到原方程组中得到**余量** $\mathbf{r}$：

$$\mathbf{r}=\mathbf{b}-\mathbf{A}\widetilde{\mathbf{x}}$$

如果 $\mathbf{r}$ 很小，就认为 $\tilde{\mathbf{x}}$ 是相当准确的。