《工程硕士数学》期末复习

第二章 解线性方程组的直接解法

1. Gauss消去法

- Gauss顺序消去法
 - 消去($O(n^3)$):将Ax = b通过初等行变换化简为Ux = b。
 - 从第二行开始,给每行乘以一个不同的系数*l*,使得每行第一位都等于第一行第一位的相 反数;
 - 从第二行开始,给每行加上第一行,使得每行第一位都等于0;
 - 从第三行开始,给每行乘以一个不同的系数*l*,使得每行第二位都等于第二行第二位的相反数;
 - 从第三行开始,给每行加上第二行,使得每行第二位都等于0;
 - **.....**
 - 最后得到上三角阵*U*。
- 回代($O(n^2)$): 从最后一行开始逐行解Ux = b。
- Gauss列主元消去法 : 若消去到第k-1步($k\geq 1$),此时第k行及以下部分的第k位待消去,则挑选所有这些数中绝对值最大的,把它所在行换到第k行,再消去。

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{bmatrix}.$$

。 示例:

例 2.2.4 用列主元法解方程组 Ax=b,计算过程取五位数字,其中

$$[\mathbf{A} \mid \mathbf{b}] = \begin{bmatrix} -0.002 & 2 & 2 & 0.4 \\ 1 & 0.78125 & 0 & 1.3816 \\ 3.996 & 5.5625 & 4 & 7.4178 \end{bmatrix}.$$

这一题的第一步,就需要先把3.996所在行换到第一行,再进行第一次消去。

2. 顺序主子式

- 顺序主子式 : 对 $n \times n$ 的方阵,求其左上角 1×1 、 2×2 、……、 $n \times n$ 这n个部分的行列式,这个过程称为求顺序主子式 Δ_1 、 Δ_2 、…、 Δ_n 。
- Gauss消去法的可行性 : 当顺序主子式任何一项都不为零时,方阵A可以使用上述的Gauss消去。

3. LU分解

- Doolittle分解(LU分解) : 通过Gauss消去法得到U以后,一定能找到下三角阵L,使 $A=LU_\circ$
 - \circ L的对角元素显然全为1。
- Crout分解: 对换Doolittle分解中L的对角元素和U的对角元素,使得U的对角元素全为1。
- LDU分解: 提取Doolittle分解中U的对角元素,形成对角矩阵D,使得U变成对角元素全为1的上三角阵 \widetilde{U} ,而此时A可以分解为 $A=LD\widetilde{U}$ 。
- 单位上(下)三角阵:对角元素全为1的上(下)三角阵。
- Doolittle分解的存在唯一性 : 存在唯一Doolittle分解的条件为方阵 $A_{n \times n}$ 的顺序主子式 Δ_1 到 Δ_{n-1} 都不为零。
 - 。 显然,如果Doolittle分解存在且唯一,则Crout、LDU分解也都存在且唯一。

4. 三对角矩阵

• 三对角矩阵: 三对角矩阵是形如下图的方阵。

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

● 三对角矩阵LU分解的形状 : 三对角矩阵的LU分解一定形如下图。

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ l_2 & 1 & & & & \\ & l_3 & 1 & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & l_n & 1 \end{bmatrix}, \qquad U = \begin{bmatrix} u_1 & c_1 & & & & \\ & u_2 & c_2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & c_{n-1} & \\ & & & u_n \end{bmatrix}$$

• 追赶法:

- 先进行LU分解,使得LUx = b。
- \circ 计算Ly = b,此时有y = Ux。
- 计算Ux = y,求出x。

5. 正定矩阵的Cholesky分解

- 正定矩阵: 顺序主子式全部大于0的实对称方阵。
- Cholesky分解 : 对正定对称阵作LU分解,必有 $U=L^T$ 、 $A=LL^T$ 。这种分解称为Cholesky分解。
- 平方根法 (Cholesky法):
 - 。 先进行Cholesky分解,使得 $LL^Tx=b$ 。
 - \circ 计算Ly=b,此时有 $y=L^Tx$ 。
 - \circ 计算 $L^T x = y$,求出x。

6. 范数

- 向量范数:
 - 。 1-范数: 向量所有元素的和。
 - 2-范数: 向量模长。
- **谐半径**: 方阵A的谱半径为其所有特征值的绝对值的最大值,记为 $\rho(A)$ 。
 - \circ 回忆:特征多项式为 $|\lambda I-A|$ 计算出的多项式,特征值为特征多项式的零点。
- 矩阵范数:
 - o 1-范数 (列范数):对所有元素取绝对值,再对每列进行求和。取最大的和为1-范数。
 - \circ 2-范数: $\sqrt{\rho(A^TA)}$ 。
 - ullet 当A为对称矩阵时,有 $\sqrt{
 ho(A^TA)} == \sqrt{
 ho(A^2)} =
 ho(A)$ 。
 - 。 **无穷范数** (∞ —范数、行范数): 对所有元素取绝对值,再对每行进行求和。取最大的和为无穷范数。

7. 条件数与病态

- 条件数: $Cond(A)_n = ||A||_n ||A^{-1}||_n$,其中||A||表示矩阵范数, $||A||_1$ 为1-范数, $||A||_2$ 为2-范数,……。
 - 。 回忆:
 - 矩阵元素的代数余子式为 $B_{ij}=(-1)^{i+j}A_{ij}$ 。
 - 矩阵所有元素取代数余子式会得到伴随矩阵 A^* ,而 $A^{-1}=rac{1}{|A|}A^*$ 。
- \mathbf{f} 有态 : 对病态矩阵A的任意元素进行扰动(加减一个微小量),都会导致Ax = b求解结果的巨大变化。
- \mathbf{x} **病态矩阵的判别**: \mathbf{y} \mathbf
- 比较可能出现病态的矩阵:
 - 。 各元素数量级差别很大的矩阵;
 - 。 进行列主元消去或LU分解时,发现主元也很小的矩阵;
 - 。 行列式很小的矩阵。

第三章 解线性方程组的迭代法

1. Jacobi、Gauss-Seidel法与SOR法

当矩阵A满足下图所示形式时:

$$\begin{split} A &= \left(a_{ij}\right)_{n \times n} \in R^{n \times n} \\ A &= D - L - U; D = diag[a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}] \end{split}$$

$$L = \begin{bmatrix} 0 & & & & & \\ -a_{21} & 0 & & & & \\ -a_{31} & -a_{32} & 0 & & & \\ \vdots & & & \ddots & & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & -a_{nn-1} & 0 \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & -a_{13} & & -a_{1n} \\ 0 & -a_{23} & & -a_{2n} \\ & 0 & & & \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

- Jacobi法: $egin{cases} B=D^{-1}(L+U)\ x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+D^{-1}b \end{cases}$;
 Gauss-Seidel法: $egin{cases} B=(D-L)^{-1}U\ x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+(D-L)^{-1}b \end{cases}$;
- SOR法: $egin{cases} B=L_{\omega}=(D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D+\omega U] \ x^{(k+1)}=L_{\omega}x^{(k)}+\omega(D-\omega L)^{-1}b \end{cases}$,式中 ω 为自主选择的松弛因子。
- **迭代矩阵**: 以上三式中的*B*称为迭代矩

2. 迭代法的收敛

- 迭代法的收敛性判定:
 - o 对任何迭代法,若迭代矩阵B满足 $\rho(B) < 1$,则迭代法收敛。
 - 。 若A严格对角占优,则无论用Jacobi法还是Gauss-SeideI法求解Ax=b,均收敛。
 - 回忆: 若每行的对角元素绝对值均大于其他元素绝对值之和,则这样的矩阵为严格对角 占优矩阵。
 - 因此,若Ax = b无法直接用迭代法求解,可以先进行行交换,使A为严格对角占优矩 阵,再求解。
 - \circ 对任何对称正定矩阵A,Gauss-Seidel法收敛。
 - o 对任何对称正定矩阵A,若将非对角元素全部取相反数,新矩阵仍然对称正定,则Jacobi法 收敛。
 - 对任何 $\omega \in (0,2)$,有SOR法收敛。
 - 特别的, $\omega < 1$ 称为低松弛, $\omega > 1$ 为高松弛, $\omega = 1$ 时SOR法退化回Gauss-Seidel 法。
- 迭代法的渐进收敛速度 : $R(B) = -\ln \rho(B) > 0$ 。 $\rho(B)$ 越小,迭代法收敛越快。
 - 。 最佳松弛因子: 对三对角对称正定矩阵,SOR法有最佳松弛因子 $\left\{egin{align*} B_J = D^{-1}(L+U) \ \omega_b = rac{2}{1+\sqrt{1ho^2(B_J)}} \end{array}
 ight.$ 。
 - 此时有 $\rho(L_{\omega_b}) = \omega_b 1$ 。
 - 当 $\omega \approx \omega_h$ 时,SOR法远快于Jacobi法。

3. 共轭梯度法

• 最速下降法:
$$egin{cases} r^{(k)} = b - Ax^{(k)} \ lpha_k = rac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ar^{(k)}, r^{(k)})} & \circ \ x^{(k+1)} = x^{(k)} + lpha_k r^{(k)} \ & egin{cases} lpha_k = rac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})} \end{cases}$$

共轭梯度法(CG法):
$$\begin{cases} \alpha_k = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})} \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)} \\ r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)} , \text{ 初値可取} \\ \beta_k = \frac{(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{(r^{(k)}, r^{(k)})} \\ p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)} \end{cases}$$

- CG法显著快于最速下降法和J法,一般也显著快于SOR法。
- \circ CG法能保证对 $A_{n\times n}$ 最多只需n步就求出精确解。

第四章 非线性方程的数值解法

1. 不动点迭代法

- 收敛: 把方程化为x=f(x)的形式,若当 $\lim_{k\to+\infty}x_k=x^*$,则 $x^*=f(x^*)$,则此时不动点 迭代法收敛。
- 不动点迭代法的整体收敛性:
 - 。 映内性 : 若 $\forall x \in [a,b]$ 有 $f(x) \in [a,b]$,则[a,b]中一定存在f(x)的不动点。
 - 压缩性: 在映内性满足的情况下,若 $\exists L \in (0,1)$ 使得 $|f(x)-f(y)| \leq L|x-y|$ 对任意 x,y成立,则映内性所说的不动点是唯一的,因此f(x)确认能收敛到这个不动点。
 - 。 推论: 在映内性满足的情况下,若 $\exists L\in (0,1)$ 使得 $|f'(x)|\leq L$ 对任意 $x\in [a,b]$ 成立,则 f(x)也必然存在唯一的不动点,从而收敛到这一不动点。
 - 显然,一般使用推论证明整体收敛性,不用压缩性证明。(参考第九章第1节"Lipschitz条件")

• 不动点迭代法的局部收敛性:

- 。 局部收敛: 若已有有 x^* ,且确认f'(x)在 x^* 附近的邻域内连续,满足 $|f'(x^*)| < 1$,则不动点迭代法是局部收敛的。
- 。 $% = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{f^{(p)}(x^*)}{p!} \neq 0$,满足该式的最小正整数p称为局部收敛阶数。
 - 显然,计算阶数时可以忽略p!,直接求f在 x^* 处的导数、二阶导数……直到不等于0为止。

2. 不动点迭代法的加速方法

- Aitken加速法 : 从迭代的第三项 x_{k+2} 起进行修正: $x_i=rac{x_ix_{i-2}-x_{i-1}^2}{x_i+x_{i-2}-2x_{i-1}}$ 。
- Steffensen加速法 : 对于不动点迭代法x=arphi(x),Steffensen加速法为:

$$egin{cases} m=arphi(x_k)\ n=arphi(m)\ x_{k+1}=x_k-rac{(n-m)^2}{n-2m+x_k} \end{cases}$$
 .

- 。 Steffensen加速法至少能加速到二阶。
- o Steffensen加速法有时能将不收敛的不动点迭代法加速为收敛。

3. Newton迭代法

此处待求解的方程变为f(x) = 0而非f(x) = x。

- (带导数的) Newton迭代法 : $x_{n+1} = x_n \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
 - 。 若要求的根为重根,则Newton迭代法是线性的。否则,Newton迭代法是至少二阶的。
- 不带导数的Newton迭代法 (割线法): $x_{n+1}=x_n-f(x_n)\frac{(x_n-x_{n-1})}{f(x_n)-f(x_{n-1})}$ 。 这个方法需要两个初值。
- **改进的Newton迭代法** : $x_{n+1} = x_n m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$,式中m需要按照原方程情况进行指定。

第五章 矩阵特征值问题

本章讨论的矩阵特征值均用 λ 表示,其中 λ_1 是主特征值(最大的特征值),其余特征值按 λ_2 、 λ_3 、…、 λ_n 从大到小排列。

1. 幂法

• 幂法:对任给 v_0 ,有 $\begin{cases} z^{(k)}=Av^{(k-1)} \\ m^{(k)}=\max(z^{(k)})$,其中 $m^{(k)}$ 收敛到主特征值 λ_1 , $v^{(k)}$ 收敛到 λ_1 对应的特征向量。

- 幂法的收敛速度 : 用 $\frac{\lambda_2}{\lambda_1}$ 表示。 λ_2 越接近 λ_1 ,收敛越慢。
- 幂法的Aitken加速: $\overline{\lambda_1}^{(k)}=rac{m_km_{k+2}-m_{k+1}^2}{m_{k+2}-2m_{k+1}+m_k}$,这个算法比 $m^{(k)}$ 收敛得更快。
- - o 逆幂法的收敛速度 : 用 $\frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}}$ 表示。 λ_n 越接近 λ_{n-1} ,收敛越慢。
- 原点位移的逆幂法: $\begin{cases} (A'-qI)z^{(k)}=v^{(k-1)}\\ m^{(k)}=\max(z^{(k)}) \end{cases}, 其中第一步需要解方程。当<math>q$ 最接近某一特征 $v^{(k)}=\frac{z^{(k)}}{m^{(k)}}$ 值 λ_i 时, $m^{(k)}$ 收敛到 $\frac{1}{\lambda_i-q}$, $v^{(k)}$ 收敛到 λ_i 对应的特征向量。
 - 。 若已知 λ_i 对应的特征向量近似为x,可直接取 $q=rac{(Ax,x)}{(x,x)}$ 。

2. Householder矩阵的求法

- 一般情况下的Householder矩阵 : 对任意n维向量x,总存在对称正交矩阵P,使得Px的计算结果为n维向量 $v=(v_1,\cdots,v_j=-sgn(x_j)\alpha,v_{j+1}=0,\cdots,v_k=0,v_{k+1},\cdots,v_n)$ (相当于将任意变量变换为有一段连续为0的向量,一般记为第j+1到k项为0, $1\leq j< k$, $j< k\leq n$)。这样的矩阵P称为Householder矩阵。
- 一般情况下的Householder矩阵求法:

$$\begin{cases} \alpha = \sqrt{x_j^2 + x_{j+1}^2 + \dots + x_n^2} \\ u = [0, \cdots, 0, x_j + sgn(x_j)\alpha, x_{j+1}, \cdots, x_k, 0, \cdots, 0]^T \circ \\ P = I - \frac{2uu^T}{||u||_2^2} \end{cases}$$

- 。 $||u||_2^2$ 的简便算法: $||u||_2^2=2lpha(lpha+x_i)$ 。
- 。 如此计算出的Householder矩阵P,从j行j列到k行k列仍为Householder矩阵(记为 \widetilde{P}),其余部分则为单位矩阵,如下图所示。

$$P = I - \frac{2uu^{T}}{||u||_{2}^{2}} = \begin{pmatrix} I_{j-1} & & \\ & \tilde{p} & \\ & & I_{n-k} \end{pmatrix}$$

- 。 等式右边为矩阵的Householder矩阵求法 : 当等式变为Px=V时,若矩阵第一列v仍满足上述的条件,则仍可按上述方法求取Householder矩阵P。
- 特殊情况下的Householder矩阵求法 : 当计算结果为n维向量 $v=[v_1,0,\cdots,0]^T$ (即从第二项开始全为0)时,Householder矩阵的求法变为如下形式:

$$egin{cases} v_1 = -sgn(x_1)||x||_2 \ u = [x_1 + sgn(x_1)||x||_2, x_2, \cdots, x_n]^T \ eta = rac{1}{||x||_2 + |x_1| \cdot ||x||_2} \ P = I - eta u u^T \end{cases}$$

3. 上Hessenberg矩阵的求法

• 上Hessenberg矩阵: 次对角线以下元素均为0的矩阵,如下图所示。

$$B = \begin{bmatrix} * & * & \cdots & * & * \\ * & * & \cdots & * & * \\ & * & \cdots & * & * \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & * & * \end{bmatrix}.$$

- 上Hessenberg矩阵的求法:
 - 。 将待变换成上Hessenberg矩阵的矩阵A,取第一列 v_1 ,寻找Householder矩阵 $P_1v_1=v_1'$ 使 得 v_1' 形如 $(*,*,0,\cdots,0)^T$ 。
 - 。 计算 $H_1=P_1AP_1$ 。如 H_1 还不是上Hessenberg矩阵,则除去A最左上角的一行一列,对右下角的分块 A_2 ,取新的第一列 v_2 ,寻找n-1维Householder矩阵 $P_2'v_2=v_2'$ 使得 v_2' 形如 $(*,*,0,\cdots,0)^T$,构造n维Householder矩阵 $P_2=\begin{bmatrix}I&&\\&P_2'\end{bmatrix}$ 。

- 。 计算 $H_2=P_2H_1P_2$ 。如 H_2 还不是上Hessenberg矩阵,则再除去 A_2 最左上角的一行一列,对右下角的分块 A_3 ,取新的第一列 v_3 ,寻找n-2维Householder矩阵 $P_3'v_3=v_3'$ 使得 v_3' 形如 $(*,*,0,\cdots,0)^T$,构造n维矩阵 $P_3=\begin{bmatrix}I&\\&P_3'\end{bmatrix}$ 。
- o
- \circ 直到 H_k 为上Hessenberg矩阵时,结束。

4. QR分解

- QR分解: 将非奇异矩阵A分解为A=QR,其中Q为正交矩阵,R为对角线均为正数的上三角阵。
- QR分解方法 (类似于上Hessenberg矩阵的求法):
 - 将待分解的矩阵A,取第一列 v_1 ,寻找 $P_1v_1=v_1'$ 使得 v_1' 形如 $(*,0,\cdots,0)^T$ 。
 - 。 计算 $R_1=P_1A$ 。如 R_1 还不是上三角矩阵,则除去A最左上角的一行一列,对右下角的分块 A_2 ,取新的第一列 v_2 ,寻找n-1维矩阵 $P_2'v_2=v_2'$ 使得 v_2' 形如 $(*,0,\cdots,0)^T$,构造n维矩阵 $P_2=\begin{bmatrix}I&&\\&P_2'\end{bmatrix}$ 。
 - 。 计算 $R_2=P_2P_1A$ 。如 R_2 还不是上三角矩阵,则除去A最左上角的一行一列,对右下角的分块 A_3 ,取新的第一列 v_3 ,寻找n-2维矩阵 $P_3'v_3=v_3'$ 使得 v_3' 形如 $(*,0,\cdots,0)^T$,构造n维矩阵 $P_3=\begin{bmatrix}I&&&\\&P_3'\end{bmatrix}$ 。
 - o
 - 直到 $R_k = P_k P_{k-1} \cdots P_1 A$ 为上三角矩阵时,结束。此时有:

$$extbf{Q} = (P_1 P_2 \cdots P_n)^{-1} = (P_1 P_2 \cdots P_n)^T = P_k^T P_{k-1}^T \cdots P_1^T \circ P_k^T \circ P_k$$

- $\blacksquare R = P_k P_{k-1} \cdots P_1 A_{\circ}$
- 。 有时希望对角线为正,因此需要取合适的对角矩阵D,使 $ar{Q}=QD$ 、 $ar{R}=D^{-1}R$ 对角线为正。
- 。 示例:求 $A=egin{bmatrix}1&1&1\2&-1&-1\2&-4&5\end{bmatrix}$ 的QR分解,使Q和R对角线均为正。
- 解答:
 - 先找到P使R = PA为上三角阵:

•
$$k = -3$$
, $u = [4, 2, 2]^T$, $\beta = \frac{1}{12}$

■ 注意到第二列对角线以下仍然不是0,因此再对 $A_0=\begin{bmatrix}0&-3\\-3&3\end{bmatrix}$ 找 P_0 ,使 $R_0=P_0A_0$ 为上三角阵。

•
$$k_0 = -3$$
, $u_0 = [3, -3]^T$, $\beta_0 = \frac{1}{9}$.

$$lackbox{lackbox{}{}} P_0 = I - eta_0 u_0 u_0^T = egin{bmatrix} 0 & 1 \ 1 & 0 \end{bmatrix}$$
,此时 $P_0 A_0 = egin{bmatrix} -3 & 3 \ 0 & -3 \end{bmatrix}$ 。

• 于是取
$$P_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & P_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$
,此时:

但这是对角线非正的。因此取 $\bar{D} = diag(-1, -1, -1)$:

$$\bar{Q} = Q\bar{D} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \circ$$

$$\bar{R} = \bar{D}^{-1}R = \begin{bmatrix} 3 & -3 & 3 \\ 0 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \circ$$

$$\bar{R} = \bar{D}^{-1}R = \begin{bmatrix} 3 & -3 & 3 \\ 0 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}.$$

检验得 $\bar{Q}\bar{R}=A$,符合题意。

第六章 插值法

1. Lagrange插值

- n次Lagrange插值多项式 : $L_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) [\prod_{j=0, j \neq k}^n (rac{x-x_j}{x_k-x_k})]$ 。
 - \circ 显然,n次Lagrange插值多项式是n次多项式,对应n-1个插值点,在这些插值点上 $L_n(x) = f(x)_{\circ}$

2. 均差与Hermite插值

- 均差: $f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=rac{f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]-f[x_1,x_2,\cdots,x_k]}{x_k-x_0}$ 。又称差商。
- 均差表:一个函数的自变量和因变量可以画成形如下图的均差表。
 - 3. 设 $f(x) \in C^n[a,b], x_j \in [a,b], j = 0,1,...,n$ 为相异节点,那么 $f[x_0,x_1,\cdots x_n] = \frac{1}{n!}f^{(n)}(\xi), \xi \in (a,b)$ 均差表 (差商表)

$$x_k$$
 $f(x_k)$ 一阶均差 三阶均差 三阶均差 三阶均差 x_0 $f(x_0)$ $f(x_0)$ $f(x_0, x_1]$ $f(x_1, x_2)$ $f(x_1, x_2)$ $f(x_1, x_2, x_1)$ $f(x_1, x_2, x_1)$

• Hermite插值:

$$H_n(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[\cdots + f[x_0, x_1, \cdots, x_n] \prod_{k=0}^{n-1} (x - x_k)$$
o

- \circ 简记: 即只用x分别减对应每个f的括号里的前面几项,再相乘。最后一项不减不乘。
- 次数:即n。
 - 显然,n次Hermite插值需要n对(x, f(x))进行均差求解。
- **重节点**: 如果提供的(x,f(x))不够要求的次数,那么可以使用重节点。在带有重节点的均差表中,如果出现 $\frac{f(x_i)-f(x_i)}{x_i-x_i}$ 的情况,则视为求一阶导 $f'(x_i)$ 。其余情况类推。
 - 。 使用重节点均差的Hermite插值,如 $f[x_0,x_0,x_1,x_1]$,后面就需要乘 $(x-x_0)^2(x-x_1)$ 。 这仍然符合上面的简记。

3. 三次样条插值

- 三次样条函数 : 对函数f(x)进行三次样条插值得到的函数S(x),一般为满足如下性质的分段函数。
 - 每个分段上均为最高次数相同的多项式函数 $\sum_{k=0}^{n} a_k x^k$ 。
 - 在每个分段点上,函数值、一阶导数值、二阶导数值相等。
 - 如此时约束条件仍然不够,使得插值得到的系数只能求出关系而不能求值,则可以补足条件。
- 常见的补足条件方法:
 - o I型边界条件: 对分段的开头 x_0 与结尾 x_n 这两处,要求S'(x) = f'(x)。
 - II型边界条件: 对分段的开头 x_0 与结尾 x_n 这两处,要求S''(x) = f''(x)。
 - 自然边界条件: 对分段的开头 x_0 与结尾 x_n 这两处,要求S''(x) = 0。
 - 此时的三次样条函数又称自然样条函数。
 - 。 非扭矩边界条件 : 对每个分段上的函数 $\sum_{k=0}^n a_k x^k$,有 $a_n=0$ 。

第七章 函数逼近

1. 正交多项式

• 正交多项式 : 设有函数f(x),g(x),其定义域均为[a,b],则若找到 $\rho(x)$ 满足 $\int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx = 0$,则f与g在[a,b]上互为基于权函数 ρ 的正交多项式。

2. 最小二乘法

- 线性拟合的最小二乘法 : 设有n维向量x和n维向量y需要拟合成直线 $y=a_0+a_1x$,则方法如下:
 - 定义每个元素全为1的n维向量c。

。
$$\begin{bmatrix} (c,c) & (x,c) \\ (c,x) & (x,x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (c,y) \\ (x,y) \end{bmatrix}$$
,其中 $(,)$ 表示向量内积(点乘)。

• 由于c、x、y均已知,因此相当于求解Ax = b。解出 a_0 、 a_1 即为所求。

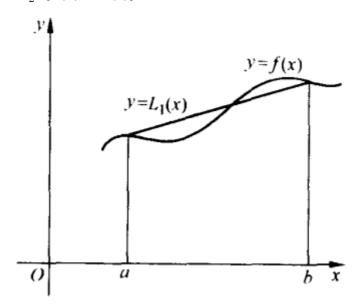
- 指数拟合的最小二乘法 : 设有n维向量x和n维向量y需要拟合成指数曲线 $y=be^{ax}$,,则方法如下:
 - 。 两边取 \ln : $\ln y = \ln b + ax$
 - \circ 于是记 $z=\ln y$, $a_0=\ln b$, $a_1=a$,变成 $z=a_0+a_1x$,按线性拟合的最小二乘法求解即可。

第八章 数值积分

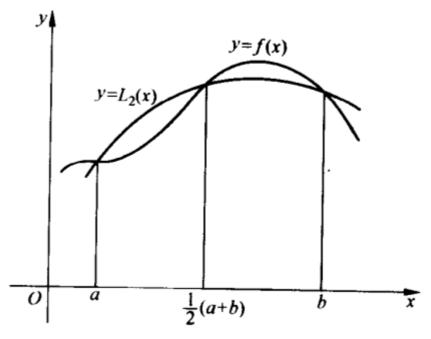
本章讨论的数值积分均形如 $I(f)=\int_a^b f(x)dxpprox \int_a^b L_1(x)dx$ 。

1. Newton-Cotes型数值积分

- 插值型公式: 设对f(x)进行n次Lagrange插值,得到插值多项式 $L_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) [\prod_{j=0, j \neq k}^n (\frac{x-x_j}{x_k-x_j})]$,则插值型公式定义为 $I(f) \approx \sum_{k=0}^n f(x_k) [\prod_{j=0, j \neq k}^n (\frac{x-x_j}{x_k-x_j})]$ 。
 - 。 下述的梯形、Simpson、Newton-Cotes求积公式,事实上全部为插值型公式。
- 代数精度 : 若某个插值型求积公式 $I(f) \approx \int_a^b L_1(x) dx$ 能在 $f(x) = 1, x, x^2, \cdots, x^p$ 严格取等,而在 $f(x) = x^{p+1}$ 只能取约等,则该求积公式的代数精度为p次。
- 梯形公式: $I(f) \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$, 如下图所示。



- 。 梯形公式的代数精度: 1。
- Simpson公式: $I(f)=rac{b-a}{6}[f(a)+f(b)+4f(rac{b+a}{2})]$,如下图所示。



- o Simpson公式的代数精度:3。
- Newton-Cotes求积公式: $I(f)pprox (b-a)\sum_{k=0}^n C_k^{(n)}f(x_k)$,其中 $C_k^{(n)}$ 的值见下表。

n			$C_{k}^{(n)}$		
1	1/2				
2	1 6	4 6			
3	1 8	3 8			
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$		
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$		
6	41 840	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	
7	$\frac{751}{17\ 280}$	$\frac{3577}{17\ 280}$	$\frac{1323}{17\ 280}$	2989 17 280	
8	$\frac{989}{28\ 350}$	5888 28 350	$\frac{-928}{28\ 350}$	10 496 28 350	$\frac{-4540}{28350}$

- 。 $C_k^{(n)}$ 满足 $C_k^{(n)}=C_n^{(n-k)}$ 。
- 。 $\{x_0=a,x_1,\cdots,x_n=b\}$ 等分了区间[a,b]。
- 。 n=1时,Newton-Cotes求积公式退化为梯形公式; n=2时退化为Simpson公式, n=3时称为Simpson 3/8公式; n=4时称为Boole公式(或Cotes公式)。
- 。 Newton-Cotes求积公式的稳定性 : $n \leq 7$ 的Newton-Cotes都是稳定的,因为此时所有的 C均为正数。
- ・ 开型Newton-Cotes求积公式 : 即令 $\{a,x_0,x_1,\cdots,x_n,b\}$ 等分[a,b]的Newton-Cotes公式。
 - 。 中点公式: 取n=0,有 $I(f)pprox(b-a)f(rac{a+b}{2})$ 。
 - 。 两点公式 : 取n=1,有 $I(f)pprox rac{b-a}{2}[f(x_0)+f(x_1)]$ 。
 - 。 $oxed{ 三点公式}$: 取n=2,有 $I(f)pprox rac{b-a}{3}[2f(x_0)-f(x_1)+2f(x_2)]$ 。

2. 复合求积公式

- **复合梯形公式** : 将[a,b]等分为 $\{x_0=a,x_1,\cdots,x_n=b\}$,并对每个部分使用梯形公式求积分,得到 $I_n(f) \approx \frac{b-a}{2n}[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)]$,即为复合梯形公式。
- 复合Simpson公式: 将[a,b]等分为 $\{x_0=a,x_1,\cdots,x_n=b\}$,并对每个部分使用Simpson公式求积分,得到 $I_n(f)\approx \frac{b-a}{6n}[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)+4\sum_{k=1}^nf(\frac{x_k+x_{k-1}}{2})]$,即为复合Simpson公式。

• Romberg算法:

- 1. h=b-a, $T(0,0)=rac{h}{2}(f(a)+f(b))$,转2。
- 2. 将区间[a,b]分半, $T(1,0)=I_2(f)$, $T(1,1)=rac{4T(1,0)-T(0,0)}{4^1-1}$,1 o j,转4。
- 3. 对区间作 2^j 等分, $T(j,0)=I_{2^j}(f)$, $T(j,k)=\frac{4^kT(j,k-1)-T(j-1,k-1)}{4^k-1}$, $k=1,2,\cdots,j$,求出T(j,j),转4。
- 4. |T(j,j)-T(j-1,j-1)|<arepsilon,则T(j,j)即为所求;否则j+1 o j,转3。
- \circ 式中 $I_n(f)$ 使用复合梯形公式求解。
- \circ Romberg算法的计算结果可以打印为T—表,如下表所示。

T(0.0)				
T(1,0)	T(1,1)			
T(2,0)	T(2,1)	T(2,2)		
T(3,0)	T(3,1)	T(3,2)	T(3,3)	
• • •	•••	• • •	• • •	

3. Gauss型求积公式

- 最高精度: 对于有n+1个节点的求积公式,其最高代数精度为2n+1。
- Gauss型求积公式: 达到了最高代数精度的求积公式。
- Gauss型求积公式的求法 : 若有Gauss型求积公式 $I(f) = \int_a^b \rho(x) f(x) dx$,希望使用n+1个节点得到2n+1精度,则求法如下:

。 设
$$\phi(x)=x^{n+1}+ax^n+bx^{n-1}+\cdots+z$$
,则联立 $\left\{egin{array}{l} \int_a^b
ho(x)\phi(x)dx-0\ \int_a^bx
ho(x)\phi(x)dx-0\ \cdots\ \int_a^bx^n
ho(x)\phi(x)dx-0 \end{array}
ight.$,由此解出

 a,b,\cdots,z_{\circ}

- 即是要求 $\phi(x)$ 同时与多项式序列 $\{a_{n+1}x^{n+1},a_nx^n,\cdots,a_0x^0\}$ 在给定区间内基于权函数 $\rho(x)$ 正交。
- 。 解 $\phi(x)=0$,得到 x_1,x_2,\cdots,x_{n+1} 共n+1个解,于是知 $I(f)=\int_a^b
 ho(x)f(x)dxpprox\sum_{k=1}^{n+1}A_kf(x_k)$ 。
- 。 由于精度为2n+1,则显然可以根据代数精度的求法,令I(f)在 $f(x)=1,x,\cdots,x_n$ 严格取等,解出 A_1,A_2,\cdots,A_{n+1} 。此时即有Gauss型求积公式 $I(f)\approx\sum_{k=1}^{n+1}A_kf(x_k)$ 。

- 。 从以上过程中可以看出,只要给定求积区间[a,b]和权函数 $\rho(x)$,则不论对于什么样的f(x),都能解出唯一一组 $\{A_k\}$,使得 $I(f) pprox \sum_{k=1}^{n+1} A_k f(x_k)$ 。
- 。 示例:

例 8.5.2 确定求积公式

$$\int_{0}^{1} \sqrt{x} f(x) dx \approx A_{0} f(x_{0}) + A_{1} f(x_{1})$$

中的系数 A_0 , A_1 及节点 x_0 , x_1 , 使该求积公式具有最高代数精度.

解 具有最高代数精度的求积公式为 Gauss 求积公式. 节点 x_0, x_1 为[a,b]=[0,1]上以权函数 $\rho(x) = \sqrt{x}$ 的两次正交多项式的零点. 不妨假定 $\phi_2(x)$ 的首项系数为 1(不改 变零点).

$$\int_{0}^{1} \sqrt{x} \phi_{2}(x) dx = 0, \quad \int_{0}^{1} \sqrt{x} \cdot x \phi_{2}(x) dx = 0, \quad (8, 5, 8)$$

那么 $\phi_2(x)$ 在[0,1]上以权函数 $\rho(x) = \sqrt{x}$ 与零次和一次多项式正交. 所以 $\phi_2(x)$ 是[a,b] 上,以权函数 $\rho(x) = \sqrt{x}$ 的二次正交多项式(首项系数为 1).

由(8.5.8)式得出
$$a = -\frac{10}{9}$$
, $b = \frac{5}{21}$, 从而得出

$$\phi_2(x) = x^2 - \frac{10}{9}x + \frac{5}{21}.$$

 $\mathbf{m} \phi_2(x) = 0$,有

$$x_0 = \frac{35 - 2\sqrt{70}}{63}, \quad x_1 = \frac{35 + 2\sqrt{70}}{63},$$

即 $x_0 = 0.289949$, $x_1 = 0.821162$.

由于两个节点的 Gauss 求积公式具有 3 次代数精度,因此对于 f(x)=1,x,求积公 式准确成立.即

$$f(x) = 1$$
, $f(x) = 1$, $f(x) = x$, $f(x)$

定积分计算后得

$$A_0 + A_1 = \frac{2}{3}, \quad x_0 A_0 + x_1 A_1 = \frac{2}{5}.$$

由此解得 $A_0 = 0.277556$, $A_1 = 0.389111$. 求积公式为

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x) dx \approx 0.277556 f(0.289949) + 0.389111 f(0.821162).$$

Gauss-Legendre求积公式: $\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$,式中对不同的n有不同的 A_k , 如下图所示。

n	

表 8.4

n	x_k	. A.	n	x_k	A_k
0	0	2	5	±0.932 469 514 2	0. 171 324 492 4
1	±0,577 350 269 2	1		±0.661 209 386 5	0. 360 761 573 0
2	±0.774 596 669 2	0. 555 555 555 6	<u></u>	±0. 238 619 186 1	0. 467 913 934 6
	0	0. 888 888 888 9	6	± 0.9491079123 ± 0.7415311856	0. 129 484 966 2 0. 279 705 391 5
3	±0.861 136 311 6	0. 347 854 845 1		±0.4058451514	0. 381 830 050 5
	±0.3399810436	0. 652 145 154 9		0	0. 417 959 183 7
4	±0,906 179 845 9	0. 236 926 885 1	7	±0.960 289 856 5	0. 101 228 536 3
	±0.5384693101	0, 478 628 670 5		±0.796 666 477 4	0. 222 381 034 5
	0	0. 568 888 888 9		± 0.5255324099 ± 0.1834346425	0. 313 706 645 9 0. 362 683 783 4

- 。 当求积区间不为[-1,1]而为[a,b]时,应将x变换为 $t=rac{2x-b-a}{b-a}$,将 $\int_a^b f(x)dx$ 变为 $\frac{2}{b-a}\int_{-1}^1 f(t)dt$ 。
- Gauss-Chebyshev求积公式: $\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \sum_{k=0}^n \frac{\pi}{n+1} f(\cos(\frac{2k+1}{2n+2}\pi))$ 。
 - 。 类似地,当求积区间不为[-1,1]而为[a,b]时,应将x变换为 $t=rac{2x-b-a}{b-a}$ 。

第九章 常微分方程数值解法

本章讨论的常微分方程均形如 $\begin{cases} y'=f(x,y) \\ y_0=\alpha \end{cases}$, 迭代步长一律为h, 即 $x_k=x_0+kh$, $y_k=y(x_0+kh)$ 。

1. Lipschitz条件

- Lipschitz条件: 若存在常数L使任意 y_1 、 y_2 满足 $|f(y_1)-f(y_2)| \leq L(y_1-y_2)$,则f满足Lipschitz条件。
- 加强的判别条件 : $\forall (x,y)$ 满足 $|\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)| \leq L$ 的函数f(x,y)一定对y满足Lipschitz条件。
 - 。 这个条件是充分不必要条件,反推不一定成立。

2. 一阶单步方法

- Euler法
 - 。 显式Euler法: $egin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n,y_n) \ y_0 = lpha \end{cases}$
 - 。 **隐式Euler法** : $\begin{cases} y_{n+1}=y_n+hf(x_{n+1},y_{n+1}) \\ y_0=\alpha \end{cases}$;这个方法在给定 y_n 时并不能直接求解 y_{n+1} ,而是还要解方程,因此一般在近似解 y_n 已知时使用。
 - 。 ${\sf Euler}$ 法的收敛性 : 若能找到使f对y满足Lipschitz条件的L,则 $h<rac{1}{L}$ 可使Euler法收敛。

• 梯形方法

- 。 $\begin{cases} y_{n+1}=y_n+rac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})], \ ext{即对显式、隐式Euler方法做了折中。} \\ y_0=lpha \end{cases}$
- 。 <mark>梯形方法的收敛性</mark>: 若能找到使f对y满足Lipschitz条件的L,则 $h<\frac{2}{L}$ 可使梯形方法收敛。
- 。 梯形方法比显式Euler法一般更快。

• 预估-校正方法

- 。 改进Euler法: $\left\{egin{aligned} y_{n+1}=y_n+rac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_n+hf(x_n,y_n))]\ y_0=lpha \end{aligned}
 ight.$
- 。 改进Euler法比显式Euler法一般更精确。
- ・ 中点公式: $egin{cases} y_{n+1}=y_n+h(f(x_n+rac{h}{2},y_n+rac{h}{2}f(x_n,y_n)) \ y_0=lpha \end{cases}$

3. 截断误差

• 局部截断误差 : 对方法 $\sum_{k=0}^p y_{n+k} = \sum_{k=0}^q y'_{n+k}$ 中的每项进行Taylor展开,得到的式子 $T_{n+1} = \sum_{i=0}^{+\infty} \beta h^i y_n^{(i)}$ 即为局部截断误差。

。 此处所用的Taylor展开公式:
$$\begin{cases} y_{n+k} = y(x+kh) = \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{(kh)^i}{i!} y_n^{(i)} \\ y_{n+k}' = f(x+kh) = \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{(kh)^i}{i!} y_n^{(i+1)^\circ} \end{cases}$$

- 主局部截断误差: T_{n+1} 的前面几项往往是0。对第一个非零项,称之为主局部截断误差。
- \mathbf{M} : 取主局部截断误差中h的次数p,有p-1为该方法的阶。
 - 示例:梯形公式的 $T_{n+1}=-rac{h^3}{12}y^{(3)}(x_n)+O(h^4)$,因此是二阶的。
 - 显式Euler、隐式Euler法都是一阶的,梯形公式是二阶的。
 - 。 改进Euler公式需要使用二维Taylor展式(即需要考虑f对x和y求取偏导数、二阶偏导数等)。最终计算得一维部分是 $\frac{h^3}{6}y^{(3)}(x_n)+O(h^4)$,二维部分的h系数也为3,因此是二阶的。

4. 相容性、收敛性与绝对稳定性

- 相容性: 若把显式单步法写成 $y_{n+1}=\phi(x_n,y_n;h)$ 形式,并对所有的h都取0,发现 $y_{n+1}=f(x_n,y_n)$,则这个显式单步法是相容的。
- 收敛性 : 若显式单步法 $y_{n+1}=\phi(x_n,y_n;h)$ 的阶数 ≥ 1 ,且 ϕ 满足对y的Lipschitz条件 $|\frac{\phi(x,y;h)-\phi(x,\bar{y},h)}{y-\bar{y}}|\leq L$,则这个显式单步法是收敛的。
 - 相容性-收敛性推论: 若显式单步法的阶数 ≥ 1,则它相容且收敛。
- 绝对稳定性 : 取 $y'(x) = f(x,y) = \lambda y$,则单步法可以写成 $y_{n+1} = E(\lambda h)y_n$ 。
 - 绝对稳定性的判别方法 : 令 λh 满足 $|E(\lambda h)| < 1$ 即可。
 - 。 当显式单步法中的f不是f(x,y)而是f(g(x),z(y))时,则 λy 变成 $\lambda z(y)$ 。
 - 。 示例: 求改进Euler方法 $y_{n+1}=y_n+rac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_n+hf(x_n,y_n))]$ 的绝对稳定区间。

对于改进Euler方法有
$$E(\lambda h) = 1 + \lambda h + \frac{(\lambda h)^2}{2}$$
 绝对稳定性条件为 $\left|1 + \lambda h + \frac{(\lambda h)^2}{2}\right| < 1$ 当 $\lambda h \in R$ 时,此条件等价于 $-1 < 1 + \lambda h + \frac{(\lambda h)^2}{2} < 1$

即
$$-2 < \lambda h(1 + \frac{\lambda h}{2}) < 0$$
 考虑区间 $(-\infty, -2], (-2, 0), [0, +\infty)$

当 $\bar{h} = \lambda h \in (-2,0)$ 时,有 $|E(\lambda h)| < 1$ 因此,改进Euler方法的绝对稳定性区间为(-2, 0)。

- 。 误差、有效数字、数值方法稳定性(送分题)
- 第二章:
 - 。 误差分析(病态?)
- 第六章:
 - Newton-Hermite插值(没写Newton插值)
 - 。 插值方法的余项
 - 。 分段低次插值
 - 。 三次样条插值(只写了三次样条函数的系数求法和常见边界条件)
- 第七章:
 - 。 线性以及特殊非线性化成线性问题 (最小二乘法?)
- 第八章:
 - 。 梯形公式、Simpson公式以及相应的复合求积公式的余项(代数精度?)
- 第九章:
 - 。 Runge-Kutta方法