

1.2 误差知识与算法知识

1.2.2 绝对误差、相对误差与有效数字

设 a 是准确值 x 的一个近似值, 记 $e = x - a$, 称 e 为近似值 a 的绝对误差, 简称误差。

如果 $|e|$ 的一个上界已知, 记为 ε , 即 $|e| \leq \varepsilon$, 则称 ε 为近似值 a 的绝对误差限或绝对误差界, 简称误差限或误差界。

记 $e_r = \frac{e}{x} = \frac{x-a}{x}$, 称 e_r 为近似值 a 的相对误差。由于 x 未知, 实际上总把 $\frac{e}{a}$ 作为 a 的

相对误差, 并且也记为 $e_r = \frac{e}{a} = \frac{x-a}{a}$, 相对误差一般用百分比表示。 $|e_r|$ 的上界, 即 $\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|a|}$

称为近似值 a 的相对误差限或相对误差界。

定义 设数 a 是数 x 的近似值。如果 a 的绝对误差限时它的某一位的半个单位, 并且从该位到它的第一位非零数字共有 n 位, 则称用 a 近似 x 时具有 n 位有效数字。

1.2.3 函数求值的误差估计

设 $u = f(x)$ 存在足够高阶的导数, a 是 x 的近似值, 则 $\tilde{u} = f(a)$ 是 $u = f(x)$ 的近似值。

若 $f'(a) \neq 0$ 且 $|f''(a)|/|f'(a)|$ 不很大, 则有误差估计

$$\begin{aligned} \tilde{e}(u) &\approx f'(a)e(a) \\ \varepsilon(\tilde{u}) &\approx |f'(a)|\varepsilon(a) \end{aligned}$$

若 $f'(a) = f''(a) = \dots = f^{(k-1)}(a) = 0, f^{(k)}(a) \neq 0$, 且比值 $|f^{(k+1)}(a)|/|f^{(k)}(a)|$ 不很

大, 则有误差估计

$$\begin{aligned} \tilde{e}(u) &\approx \frac{f^{(k)}(a)}{k!} [e(a)]^k \\ \varepsilon(\tilde{u}) &\approx \frac{|f^{(k)}(a)|}{k!} [\varepsilon(a)]^k \end{aligned}$$

对于 n 元函数, 有误差估计

$$\begin{aligned} \tilde{e}(u) &\approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(a_1, a_2, \dots, a_n)}{\partial x_i} e(a_i) \\ \varepsilon(\tilde{u}) &\approx \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial f(a_1, a_2, \dots, a_n)}{\partial x_i} \right| \varepsilon(a_i) \end{aligned}$$

; 若一阶偏导全为零或很小, 则使用高阶项。

1.2.4 算法及其计算复杂性

- (1) 要有数值稳定性, 即能控制舍入误差的传播。
- (2) 两数相加要防止较小的数加不到较大的数中所引起的严重后果。
- (3) 要尽量避免两个相近的近似值相减, 以免严重损失有效数字。
- (4) 除法运算中, 要尽量避免除数的绝对值远远小于被除数的绝对值。

1.3 向量范数与矩阵范数

1.3.1 向量范数

定义 定义在 R^n 上的实值函数 $\|\bullet\|$ 称为向量范数, 如果对于 R^n 中的任意向量 x 和 y 满足:

- (1) 正定性: $\|x\| \geq 0$, 当且仅当 $x = 0$ 时, $\|x\| = 0$;

(2) 齐次性: 对任一数 $k \in R$, 有 $\|kx\| = |k|\|x\|$;

(3) 成立三角不等式: $\|x+y\| \leq \|x\| + \|y\|$ 。

定理 1.1 对 R^n 中的任一向量 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, 记

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

$$\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$$

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

则 $\|\bullet\|_1$, $\|\bullet\|_2$ 和 $\|\bullet\|_\infty$ 都是向量范数。

定理 1.2 设 $\|\bullet\|_\alpha$ 和 $\|\bullet\|_\beta$ 是 R^n 上的任意两种向量范数, 则存在与向量 x 无关的常数 m 和 M ($0 < m < M$), 使下列关系式成立

$$m\|x\|_\alpha \leq \|x\|_\beta \leq M\|x\|_\alpha, \forall x \in R^n$$

1.3.2 矩阵范数

定义 定义在 $R^{n \times n}$ 上的实值函数 $\|\bullet\|$ 称为矩阵范数, 如果对于 $R^{n \times n}$ 中的任意矩阵 A 和 B 满足:

(1) $\|A\| \geq 0$, 当且仅当 $A = 0$ 时, $\|A\| = 0$;

(2) 对任一数 $k \in R$, 有 $\|kA\| = |k|\|A\|$;

(3) $\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|$;

(4) $\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$ 。

定义 对于给定的向量范数 $\|\bullet\|$ 和矩阵范数 $\|\bullet\|$, 如果对于任一个 $x \in R^n$ 和任一个 $A \in R^{n \times n}$ 满足 $\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|$, 则称所给的矩阵范数与向量范数是相容的。

定理 1.3 设在 R^n 中给定了一种向量范数, 对任一矩阵 $A \in R^{n \times n}$, 令 $\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$, 则由

此定义的 $\|\bullet\|$ 是一种矩阵范数, 并且它与所给定的向量范数相容。

定理 1.4 设 $A = [a_{ij}] \in R^{n \times n}$, 则

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$$

$$\|A\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$

其中 $\lambda_{\max}(A^T A)$ 表示矩阵 $A^T A$ 的最大特征值 ($A^T A$ 是正定或半正定矩阵, 它的全部特征值非负)。

还有一种常见的矩阵范数 $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j=1}^n a_{ij}^2}$, 且与向量范数 $\|\bullet\|_2$ 相容, 但是不从属于任何

向量范数。单位矩阵 I 的任何一种算子范数 $\|I\| = \max_{\|x\|=1} \|Ix\| = 1$ 。

定理 1.5 设矩阵 $A \in R^{n \times n}$ 的某种范数 $\|A\| < 1$, 则 $I \pm A$ 为非奇异矩阵, 并且当该范数为算子

范数时, 还有 $\|(I \pm A)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|A\|}$ 成立。

2.1 Gauss 消去法

2.1.1 顺序 Gauss 消去法

定理 2.1 顺序 Gauss 消去法的前 $n-1$ 个主元素 $a_{kk}^{(k)} (k=1, 2, \dots, n-1)$ 均不为零的充分必要条

件是方程组的系数矩阵 A 的前 $n-1$ 个顺序主子式 $D_k = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & \dots & a_{1k}^{(1)} \\ \dots & & \dots \\ a_{k1}^{(1)} & \dots & a_{kk}^{(k)} \end{vmatrix} \neq 0, (k=1, 2, \dots, n-1)$

2.1.2 列主元素 Gauss 消去法

定理 2.2 设方程组的系数矩阵 A 非奇异, 则用列主元素 Gauss 消去法求解方程组时, 各个列主元素 $a_{i_k k}^{(k)} (k=1, 2, \dots, n-1)$ 均不为零。

2.2 直接三角分解法

2.2.1 Doolittle 分解法(单位下三角+上三角)与 Crout 分解法(下三角+单位上三角)

定理 2.3 矩阵 $A = [a_{ij}]_{n \times n} (n \geq 2)$ 有唯一的 Doolittle 分解的充分必要条件是 A 的前 $n-1$ 个顺序主子式 $D_k \neq 0, (k=1, 2, \dots, n-1)$ 。

推论 矩阵 $A = [a_{ij}]_{n \times n} (n \geq 2)$ 有唯一的 Crout 分解的充分必要条件是 A 的前 $n-1$ 个顺序主子式 $D_k \neq 0, (k=1, 2, \dots, n-1)$ 。

2.2.2 选主元的 Doolittle 分解法

定理 2.4 若矩阵 $A \in R^{n \times n}$ 非奇异, 则存在置换矩阵 Q , 使 QA 可做 Doolittle 分解。

2.2.3 三角分解法解带状线性方程组

定理 2.5(保带状结构的三角分解) 设 $A = [a_{ij}]_{n \times n}$ 是上半带宽为 s 、下半带宽为 r 的带状矩阵,

且 A 的前 $n-1$ 个顺序主子式均不为零, 则 A 有唯一的 Doolittle 分解

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & & a_{1,s+1} & & \\ \dots & \dots & & \dots & \\ a_{r+1,1} & & \dots & & \dots \\ & \dots & & \dots & a_{n-s,n} \\ & & \dots & \dots & \dots \\ & & & a_{n,n-r} & \dots & a \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{2,1} & 1 & & & \\ \dots & \dots & \dots & & \\ l_{r+1,1} & & \dots & \dots & \\ & \dots & & \dots & \dots \\ & & l_{n,n-r} & \dots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1,s+1} & \\ & \dots & \dots & & \dots \\ & & \dots & \dots & u_{n-s,n} \\ & & & \dots & \dots & \dots \\ & & & & \dots & u_{n-1,n} \\ & & & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

为节省空间, 用 $C(m,n)$ 存储 A 的带内元素, 其中 $m=r+s+1$, 并且 $a_{ij} = c_{i-j+s+1,j}$ 。

2.2.5 拟三对角线性方程组的求解方法

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & c_1 & & & d_1 \\ d_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & \dots & \dots & \\ & & & d_{n-1} & a_{n-1} & c_{n-1} \\ c_n & & & d_n & a_n \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} p_1 & & & & \\ d_2 & p_2 & & & \\ & \dots & \dots & & \\ & & \dots & \dots & \\ & & & d_{n-1} & p_{n-1} \\ r_1 & r_2 & \dots & r_{n-2} & r_{n-1} & r_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & q_1 & & & s_1 \\ & 1 & q_2 & & s_2 \\ & & \dots & \dots & \dots \\ & & & \dots & q_{n-2} & s_{n-2} \\ & & & & 1 & s_{n-1} \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

2.3 矩阵的条件数与病态线性方程组

2.3.1 矩阵的条件数与线性方程组的性态

定义 对非奇异矩阵 A , 称量 $\|A\| \|A^{-1}\|$ 为矩阵 A 的条件数, 记作 $\text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$ 。

矩阵 A 的条件数与所取的矩阵范数有关, 常用的条件数是

$$\text{cond}(A)_{\infty} = \|A\|_{\infty} \|A^{-1}\|_{\infty}, \quad \text{cond}(A)_2 = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$$

性质 1 对任何非奇异矩阵 A , $\text{cond}(A) \geq 1$ 。

性质 2 设 A 是非奇异矩阵, $k \neq 0$ 是常数, 则有 $\text{cond}(kA) = \text{cond}(A)$ 。

性质 3 设 A 是非奇异的是对称矩阵, 则有 $\text{cond}(A)_2 = \left| \frac{\lambda_1}{\lambda_n} \right|$, 其中 λ_1 和 λ_n 分别是矩阵 A 的

模为最大和模为最小的特征值。

性质 4 设 A 是正交矩阵, 则有 $\text{cond}(A)_2 = 1$ 。

2.3.2 关于病态线性方程组的求解问题

- (1) 采用高精度的算术运算。
- (2) 平衡方法 (行平衡, 取每行绝对值最大数的倒数组成对角阵, 乘在原方程左右两边)。
- (3) 残差校正。

2.4 迭代法

2.4.1 迭代法的一般形式及其收敛性

$$x^{(k+1)} = Gx^{(k)} + d (k=0,1,\dots)$$

定义 设 $n \times n$ 矩阵 G 的特征值是 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, 称 $\rho(G) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$ 为矩阵 G 的谱半径。

定理 2.9 对任意的向量 d , 迭代法收敛的充分必要条件是 $\rho(G) < 1$ 。

定理 2.9 如果矩阵 G 的某种范数 $\|G\| < 1$, 则

- (1) 方程组的解 x^* 存在且唯一;
- (2) 对于迭代公式, 有 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^*, \forall x^{(0)} \in R$, 且下列两式成立

$$\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|G\|^k}{1 - \|G\|} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|$$

$$\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|G\|}{1 - \|G\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$$

2.4.2 Jacobi 迭代法

$$A = D + L + U$$

$$x^{(k+1)} = -D^{-1}(L + U)x^{(k)} + D^{-1}b (k=0,1,\dots)$$

$$G_J = -D^{-1}(L + U)$$

定理 2.10 Jacobi 迭代法收敛的充分必要条件是 $\rho(G_J) < 1$ 。

定理 2.11 如果 $\|G_J\| < 1$, 则 Jacobi 迭代法收敛。

引理 2.1 若矩阵 $A \in R^{n \times n}$ 是主对角线按行(或按列)严格占优阵, 则 A 是非奇异矩阵。

定理 2.12 如果方程组的系数矩阵式主对角线按行(或按列)严格占优阵, 则用 Jacobi 迭代法求解必收敛。

2.4.3 Gauss-Seidel 迭代法

$$A = D + L + U$$

$$x^{(k+1)} = -(D + L)^{-1}Ux^{(k)} + (D + L)^{-1}b(k = 0, 1, \dots)$$

$$G_G = -(D + L)^{-1}U$$

定理 2.13 GS 迭代法收敛的充分必要条件是 $\rho(G_G) < 1$ 。

定理 2.14 如果 $\|G_G\| < 1$, 则 Jacobi 迭代法收敛。

定理 2.15 如果方程组的系数矩阵式主对角线按行(或按列)严格占优阵, 则用 GS 法求解必收敛。

定理 2.16 如果方程组的系数矩阵 A 是正定矩阵, 则用 GS 法求解必收敛。

2.4.4 逐次超松弛迭代法

$$A = \frac{1}{\omega}D + L + (1 - \frac{1}{\omega})D + U$$

$$x^{(k+1)} = -(\frac{1}{\omega}D + L)^{-1}[(1 - \frac{1}{\omega})D + U]x^{(k)} + (\frac{1}{\omega}D + L)^{-1}b(k = 0, 1, \dots)$$

$$G_S = -(\frac{1}{\omega}D + L)^{-1}[(1 - \frac{1}{\omega})D + U]$$

实际使用的形式 $x^{(k+1)} = \omega\{-D^{-1}Lx^{(k+1)} - [(1 - \frac{1}{\omega})I + D^{-1}U]x^{(k)} + D^{-1}b\}(k = 0, 1, \dots)$

它的分量形式是 $x_i^{(k+1)} = \omega\{-\sum_{j=1}^{i-1} \frac{a_{ij}}{a_{ii}}x_j^{(k+1)} - (1 - \frac{1}{\omega})x_i^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n \frac{a_{ij}}{a_{ii}}x_j^{(k)} + \frac{b_i}{a_{ii}}\}(k = 0, 1, \dots)$

定理 2.17 SOR 方法收敛的充分必要条件是 $\rho(G_S) < 1$ 。

定理 2.18 如果 $\|G_S\| < 1$, 则 SOR 方法收敛。

定理 2.19 SOR 方法收敛的必要条件是 $0 < \omega < 2$ 。

定理 2.20 如果方程组的系数矩阵 A 是主对角线按行(或按列)严格占优阵, 则用 $0 < \omega \leq 1$ 的 SOR 方法求解必收敛。

定理 2.21 如果方程组的系数矩阵 A 是正定矩阵, 则用 $0 < \omega < 2$ 的 SOR 方法求解必收敛。

***实系数二次方程 $x^2 + px + q = 0$ 的两个根之模均小于 1 的充要条件是:

$$|q| < 1, 1 + p + q > 0, 1 - p + q > 0$$

***A 为正定矩阵 \Leftrightarrow A 的各阶顺序主子式全大于零。

3.1 幂法和反幂法

3.1.1 幂法 (用于计算矩阵的按模为最大的特征值和相应的特征向量)

第一种幂法迭代格式:

$$\begin{cases} \forall u_0 \in R^n \text{ \& } u_0 \neq 0 \\ \eta_{k-1} = \sqrt{u_{k-1}^T u_{k-1}} \\ y_{k-1} = u_{k-1} / \eta_{k-1} \\ u_k = Ay_{k-1} \\ \beta_k = y_{k-1}^T u_k \\ (k=1, 2, \dots) \end{cases}$$

第二种幂法迭代格式:

$$\begin{cases} \forall u_0 = (h_1^{(0)}, \dots, h_n^{(0)})^T \text{ \& } u_0 \neq 0 \\ |h_r^{(k-1)}| = \max_{1 \leq j \leq n} |h_j^{(k-1)}| \\ y_{k-1} = u_{k-1} / |h_r^{(k-1)}| \\ u_k = Ay_{k-1} = (h_1^{(k)}, \dots, h_n^{(k)})^T \\ \beta_k = \text{sgn}(h_r^{(k-1)}) h_r^{(k)} \\ (k=1, 2, \dots) \end{cases}$$

β_k 作为 λ_1 的近似值, y_{k-1} 作为 A 的属于 λ_1 的特征向量。

3.1.2 反幂法

第一种反幂法迭代格式:

$$\begin{cases} \forall u_0 \in R^n \text{ \& } u_0 \neq 0 \\ \eta_{k-1} = \sqrt{u_{k-1}^T u_{k-1}} \\ y_{k-1} = u_{k-1} / \eta_{k-1} \\ Au_k = y_{k-1} \\ \beta_k = y_{k-1}^T u_k \\ (k=1, 2, \dots) \end{cases}$$

$\frac{1}{\beta_k}$ 作为 λ_n 的近似值, y_{k-1} 作为 A 的属于 λ_n 的特征向量。还可以用带原点平移的反幂法求

矩阵 A 的某个特征值 λ_s 。

3.3 QR 方法

3.3.1 矩阵的 QR 分解

设 $v \in R^n$ 是单位向量, 令 $H = I - 2vv^T$, 则 H 是对称正交矩阵, 称为 Householder 矩阵。

引理 3.1 设有非零向量 $s \in R^n$ 和单位向量 $e \in R^n$, 必存在 Householder 矩阵 H , 使得

$$Hs = \alpha e, \text{ 其中 } \alpha \text{ 是实数, 并且 } |\alpha| = \sqrt{s^T s}. \text{ (可取 } v = \frac{s - \alpha e}{\sqrt{(s - \alpha e)^T (s - \alpha e)}} \text{)}$$

定理 3.2 任何 $n \times n$ 实矩阵 A 总可以分解为一个正交矩阵 Q 与一个上三角矩阵 R 的乘积。

设 $a_{i1} (i = 2, 3, \dots, n)$ 不全为零, 令

$$s_1 = (a_{11}, \dots, a_{n1})^T$$

$$c_1 = -\text{sgn}(a_{11})\sqrt{s_1^T s_1} \text{ (取 } \text{sgn}(0) = -1 \text{)}$$

$$u_1 = s_1 - c_1 e_1$$

$$H_1 = I - 2u_1 u_1^T / (u_1^T u_1)$$

$$A_2 = H_1 A = \begin{bmatrix} c_1 & a_{12}^{(2)} & \dots & a_{1n}^{(2)} \\ 0 & \dots & & \dots \\ \dots & \dots & & \dots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}$$

对第 j 列, $a_{ij} (i = j+1, \dots, n)$ 不全为零, 令 $s_j = (0, \dots, 0, a_{jj}^{(j)}, \dots, a_{nj}^{(j)})^T$, 并继续计算。

最终得到 $A_n = H_{n-1} H_{n-2} \dots H_1 A$ 是一个上三角矩阵。则 $Q = H_1 H_2 \dots H_{n-1}$, $R = A_n$, 且

$$A = QR.$$

3.3.2 矩阵的拟上三角化

设 $a_{i1} (i = 3, 4, \dots, n)$ 不全为零, 令

$$s_1 = (0, a_{21}, \dots, a_{n1})^T$$

$$c_1 = -\text{sgn}(a_{21})\|s_1\|_2 \text{ (取 } \text{sgn}(0) = -1 \text{)}$$

$$u_1 = s_1 - c_1 e_2$$

$$H_1 = I - 2u_1 u_1^T / (u_1^T u_1)$$

$$A^{(2)} = H_1 A H_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12}^{(2)} & \dots & a_{1n}^{(2)} \\ c_1 & \dots & & \dots \\ 0 & \dots & & \dots \\ \dots & \dots & & \dots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}$$

对第 j 列, $a_{ij} (i = j+2, \dots, n)$ 不全为零, 令 $s_j = (0, \dots, 0, a_{j+1,j}^{(j)}, \dots, a_{nj}^{(j)})^T$, 并继续计算。

最终得到 $A^{(n-1)} = H_{n-2} \dots H_2 H_1 A H_1 H_2 \dots H_{n-2}$ 为拟上三角矩阵, 令 $P = H_1 H_2 \dots H_{n-2}$,

则 $A^{(n-1)} = P^T A P$ 。

3.3.3 带双步位移的 QR 方法

基本 QR 方法的迭代公式是

$$\begin{cases} A_1 = A \in R^{n \times n} \\ A_k = Q_k R_k \\ A_{k+1} = R_k Q_k \\ (k = 1, 2, \dots) \end{cases}$$

4.1 非线性方程的迭代解法

4.1.2 简单迭代法及其收敛性

定理 4.1 设函数 $\varphi(x) \in C[a, b]$, 在 (a, b) 内可导, 且满足两个条件:

- (1) 当 $x \in [a, b]$ 时, $\varphi(x) \in [a, b]$;
- (2) 当 $x \in (a, b)$ 时, $|\varphi'(x)| \leq L < 1$, 其中 L 为一常数。

则有如下结论:

- (1) 方程 $x = \varphi(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上有唯一的根 s ;
- (2) 对任取 $x_0 \in [a, b]$, 简单迭代法 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 产生的序列 $\{x_k\} \subset [a, b]$ 且收敛于 s ;
- (3) 成立误差估计式

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

$$|s - x_k| \leq \frac{L}{1-L} |x_k - x_{k-1}|$$

定理 4.2 设 $s = \varphi(s)$, $\varphi'(x)$ 在包含 s 的某个开区间内连续。如果 $|\varphi'(s)| < 1$, 则存在 $\delta > 0$,

当 $x_0 \in [s - \delta, s + \delta]$ 时, 由简单迭代法 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 产生的序列 $\{x_k\} \subset [s - \delta, s + \delta]$ 且收敛于 s 。

4.1.3 简单迭代法的收敛速度

定理 4.3 设函数 $\varphi(x) \in C[a, b]$, $\varphi'(x) \in C[a, b]$, 且满足如下条件:

- (1) 当 $x \in [a, b]$ 时, $\varphi(x) \in [a, b]$;
- (2) 当 $x \in (a, b)$ 时, $\varphi'(x) \neq 0$, $|\varphi'(x)| \leq L < 1$, 其中 L 为一常数。

则对任取对任取 $x_0 \in [a, b]$, 简单迭代法 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 产生的序列 $\{x_k\}$ 收敛于方程 $x = \varphi(x)$ 在 $[a, b]$ 内的唯一的根 s , 并且当 $x_0 \neq s$ 时 $\{x_k\}$ 是线性收敛的。

定理 4.4 设 $s = \varphi(s)$, $\varphi^{(m)}(x)$ 在包含 s 的某个开区间内连续 ($m \geq 2$)。如果

$$\begin{aligned}\varphi^{(i)}(s) &= 0 (i=1, 2, \dots, m-1) \\ \varphi^{(m)}(s) &\neq 0\end{aligned}$$

则存在 $\delta > 0$ ，当 $x_0 \in [s - \delta, s + \delta]$ 但 $x_0 \neq s$ 时，由简单迭代法 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 产生的序列 $\{x_k\}$ 以 m 阶收敛速度收敛于 s 。

4.1.4 Steffensen 迭代法

$$\begin{aligned}y_k &= \varphi(x_k), z_k = \varphi(y_k) \\ x_{k+1} &= x_k - \frac{(y_k - x_k)^2}{z_k - 2y_k + x_k} (k=0, 1, \dots)\end{aligned}$$

定理 4.5 (局部) 设 $s = \varphi(s)$ ， $\varphi(x)$ 在包含 s 的某个开区间内具有连续的二阶导数，并且 $\varphi'(s) \neq 1$ ，则存在 $\delta > 0$ ，当 $x_0 \in [s - \delta, s + \delta]$ 但 $x_0 \neq s$ 时，由 Steffensen 迭代法产生的序列 $\{x_k\}$ 至少以二阶收敛速度收敛于 s 。

4.1.5 Newton 法

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} (k=0, 1, \dots)$$

定理 4.6 (局部) 设 s 是方程 $f(x) = 0$ 的根，在包含 s 的某个开区间内 $f''(x)$ 连续且 $f'(x) \neq 0$ ，则存在 $\delta > 0$ ，当 $x_0 \in [s - \delta, s + \delta]$ 时，由 Newton 法产生的序列 $\{x_k\}$ 收敛于 s ；若 $f''(s) \neq 0$ 且 $x_0 \neq s$ ，则序列 $\{x_k\}$ 是平方收敛的。

定理 4.7 (大范围) 设函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上存在二阶连续导数，且满足条件：

- (1) $f(a)f(b) < 0$ ；
- (2) $f''(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上不变号；
- (3) 当 $x \in [a, b]$ 时， $f'(x) \neq 0$ ；
- (4) $x_0 \in [a, b]$ ， $f(x_0)f''(x_0) > 0$ 。

则由 Newton 法产生的序列 $\{x_k\}$ 单调收敛于方程 $f(x) = 0$ 在 $[a, b]$ 内唯一的根 s ，并且至少是平方收敛的。

4.1.7 割线法

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})} (k=0, 1, \dots)$$

定理 4.8 设 $f(s)=0$, 在 s 地某邻域内 $f''(x)$ 连续且 $f'(x) \neq 0$, 则存在 $\varepsilon > 0$, 当 $x_{-1}, x_0 \in I_\varepsilon$ 时, 由割线法产生的序列 $\{x_k\}$ 收敛于 s , 且收敛速度的阶至少为 1.618。

4.1.8 单点割线法

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_0)}{f(x_k) - f(x_0)} (k = 1, 2, \dots)$$

定理 4.9 设函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上存在二阶连续导数, 且满足条件:

- (1) $f(a)f(b) < 0$;
- (2) $f''(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上不变号;
- (3) 当 $x \in [a, b]$ 时, $f'(x) \neq 0$;
- (4) $x_0, x_1 \in [a, b]$ 且 $f(x_0)f''(x_0) > 0$, $f(x_0)f(x_1) < 0$ 。

则有单点割线法产生的序列 $\{x_k\}$ 单调收敛于方程 $f(x)=0$ 在 $[a, b]$ 内唯一的根 s , 并且收敛速度是一阶的。

4.2 非线性方程组的迭代解法

4.2.2 简单迭代法

定理 4.13 (压缩映像原理) 设 $G: D \subset R^n \rightarrow R^n$ 在闭区域 $D_0 \subset D$ 上满足两个条件:

- (1) G 把 D_0 映入它自身, $G(D_0) \subset D_0$;
- (2) G 在 D_0 上是压缩映射, 即存在常数 $L \in (0, 1)$, 使对任意的 $x, y \in D_0$, 有

$$\|G(x) - G(y)\| \leq L \|x - y\|$$

则有下列结论:

- (1) 对任取的 $x^{(0)} \in D_0$, 由迭代公式 $x^{(k+1)} = G(x^{(k)}) (k = 0, 1, \dots)$ 产生的序列 $\{x^{(k)}\} \subset D_0$,

且收敛于方程组 $x = G(x)$ 在 D_0 内的唯一解 x^* ;

- (2) 成立误差估计式

$$\begin{aligned} \|x^* - x^{(k)}\| &\leq \frac{L^k}{1-L} \|x^{(1)} - x^{(0)}\| \\ \|x^* - x^{(k)}\| &\leq \frac{L}{1-L} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \end{aligned}$$

定理 4.14 (局部) 设 $G: D \subset R^n \rightarrow R^n$, $x^* \in \text{int}(D)$ 是方程组 $x = G(x)$ 的解, G 在 x^* 处

可微。若 $G'(x^*)$ 的谱半径 $\rho(G'(x^*)) < 1$ ，则存在开球 $D_0 = \{x \mid \|x - x^*\| < \delta, \delta > 0\} \subset D$ ，使对任意的 $x^{(0)} \in D_0$ ，由迭代法 $x^{(k+1)} = G(x^{(k)}) (k=0,1,\dots)$ 产生的序列 $\{x^{(k)}\} \subset D_0$ 且收敛于 x^* 。

4.2.3 Newton 法

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

定理 4.15 设 $x^* \in \text{int}(D)$ 是方程组 $F(x)=0$ 的解， $F: D \subset R^n \rightarrow R^n$ 在包含 x^* 的某个开区间 $S \subset D$ 内连续可微，且 $F'(x^*)$ 非奇异，则存在闭球 $D_0 = \{x \mid \|x - x^*\| \leq \delta, \delta > 0\} \subset S$ ，使对任意的 $x^{(0)} \in D_0$ ，由 Newton 法产生的序列 $\{x^{(k)}\} \subset D_0$ 且超线性收敛于 x^* ；若更有 $F(x)$ 在域 S 内二次连续可微，则序列 $\{x^{(k)}\}$ 至少是平方收敛的。

5.1 代数插值

5.1.1 一元函数插值 (Lagrange、Newton)

定理 5.1 设 x_0, x_1, \dots, x_n 是互异的实数，对于给定的实数 x ，实值函数 $f(t)$ 在区间 I_x 上具有 $n+1$ 阶导数，则插值公式 $f(x) \approx p_n(x)$ 的余项为

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

其中 $\xi \in I_x$ 且依赖于 x ， $\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)$ 。

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

定理 5.2 设 x_0, x_1, \dots, x_n 是互异的实数，对于给定的实数 x ，实值函数 $f(t)$ 在区间 I_x 上具有

$m+n+2$ 阶导数， $H_{m+n+1}(x)$ 则是满足条件 $\begin{cases} H_{m+n+1}(x_i) = y_i, (i=0,1,\dots,n) \\ H'_{m+n+1}(x_{i_k}) = y'_{i_k}, (k=0,1,\dots,m) \end{cases}$ 的 Hermite 插

值多项式，则用 $H_{m+n+1}(x)$ 近似代替 $f(x)$ 的余项为

$$R(x) = \frac{f^{(m+n+2)}(\xi)}{(m+n+2)!} \omega_{n+1}(x) \prod_{k=0}^m (x-x_{i_k})$$

其中 $\xi \in I_x$ 且依赖于 x 。

5.3 样条插值

5.3.1 样条函数

定义 步长为 1、内节点等距的 k 次 B 样条

$$\Omega_k(x) = \frac{1}{k!} \sum_{j=0}^{k+1} (-1)^j \binom{k+1}{j} \left(x + \frac{k+1}{2} - j\right)_+^k, -\infty < x < +\infty$$

性质 1 $\Omega_k(-x) = \Omega_k(x)$ 。

性质 2 当 $|x| \geq \frac{k+1}{2}$ 时, $\Omega_k(x) \equiv 0$; 当 $|x| < \frac{k+1}{2}$ 时, $\Omega_k(x) > 0$ 。

定义 步长为 h、内节点等距的 k 次 B 样条

$$\Omega_k\left(\frac{x - x_{i-(k-1)/2}}{h}\right) = \frac{1}{k!h^k} \sum_{j=0}^{k+1} (-1)^j \binom{k+1}{j} (x - x_{i-k+j})_+^k, -\infty < x < +\infty$$

性质 1 对称轴为 $x = x_{i-(k-1)/2}$ 。

性质 2 $\Omega_k\left(\frac{x - x_{i-(k-1)/2}}{h}\right) \begin{cases} \equiv 0, x \notin (x_{i-k}, x_{i+1}) \\ > 0, x \in (x_{i-k}, x_{i+1}) \end{cases}$

空间 $\mathcal{D}_{k,\pi}$ 常用的两组基底及表示

$$\mathcal{L} = \{1, x, \dots, x^k, (x - x_1)_+^k, \dots, (x - x_{n-1})_+^k\}$$

$$s(x) = \sum_{j=0}^k a_j x^j + \frac{1}{k!} \sum_{j=1}^{n-1} c_j (x - x_j)_+^k, a \leq x \leq b$$

$$\mathcal{L} = \{\Omega_k\left(\frac{x - x_{j-(k-1)/2}}{h}\right), a \leq x \leq b (j = 0, 1, \dots, n+k-1)\}$$

$$s(x) = \sum_{j=0}^{n+k-1} c_j \Omega_k\left(\frac{x - x_{j-(k-1)/2}}{h}\right), a \leq x \leq b$$

5.3.3 B 样条为基底的三次样条插值函数

第一种边界条件 $s''(x_0) = y_0'', s''(x_n) = y_n''$:

$$\begin{cases} c_0 = 2c_1 - c_2 + h^2 y_0'' \\ c_1 = y_0 - \frac{h^2}{6} y_0'' \\ c_{n+1} = y_n - \frac{h^2}{6} y_n'' \\ c_{n+2} = 2c_{n+1} - c_n + h^2 y_n'' \end{cases}$$

解线性方程组 $Ac = d$

$$\text{其中 } A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & \dots & \dots & \dots \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & 1 & 4 \end{bmatrix}, c = \begin{bmatrix} c_2 \\ c_3 \\ \dots \\ c_n \end{bmatrix}, d = \begin{bmatrix} 6y_1 - y_0 + \frac{h^2}{6} y_0'' \\ 6y_2 \\ 6y_3 \\ \dots \\ 6y_{n-2} \\ 6y_{n-1} - y_n + \frac{h^2}{6} y_n'' \end{bmatrix}$$

第二种边界条件 $s'(x_0) = y_0', s'(x_n) = y_n'$:

$$\begin{cases} c_0 = c_2 - 2hy_0' \\ c_{n+2} = c_n + 2hy_n' \end{cases}$$

解线性方程组 $Bc = v$

$$\text{其中 } B = \begin{bmatrix} 4 & 2 & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & \dots & \dots & \dots \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & 2 & 4 \end{bmatrix}, c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_{n+1} \end{bmatrix}, v = \begin{bmatrix} 6y_0 + 2hy_0' \\ 6y_1 \\ 6y_2 \\ \dots \\ 6y_{n-1} \\ 6y_n - 2hy_n' \end{bmatrix}$$

第三种边界条件 $s'(x_0^+) = s'(x_n^-), s''(x_0^+) = s''(x_n^-)$:

$$c_{n+2} = c_2, c_1 = c_{n+1}, c_0 = c_n$$

解线性方程组 $Pc = u$

$$\text{其中 } P = \begin{bmatrix} 4 & 1 & & & 1 \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & \dots & \dots & \dots \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ 1 & & & & 1 & 4 \end{bmatrix}, c = \begin{bmatrix} c_2 \\ c_3 \\ \dots \\ c_{n+1} \end{bmatrix}, v = \begin{bmatrix} 6y_1 \\ 6y_2 \\ 6y_3 \\ \dots \\ 6y_{n-1} \\ 6y_0 \end{bmatrix}$$

$$\text{则 } s(x) = \sum_{j=0}^{n+2} c_j \Omega_3\left(\frac{x-x_{j-1}}{h}\right), a \leq x \leq b$$

5.3.4 三弯矩法求三次样条插值函数

$$h_i = x_i - x_{i-1}$$

$$s(x) = \frac{M_{i-1}}{6h_i}(x_i - x)^3 + \frac{M_i}{6h_i}(x - x_{i-1})^3 + \left(\frac{y_{i-1}}{h_i} - \frac{M_{i-1}}{6}h_i\right)(x_i - x) + \left(\frac{y_i}{h_i} - \frac{M_i}{6}h_i\right)(x - x_{i-1})$$

其中 $x_{i-1} \leq x \leq x_i (i=1, 2, \dots, n)$

由定义得到 n-1 个三弯矩方程: $\gamma_i M_{i-1} + 2M_i + \alpha_i M_{i+1} = \beta_i, (i=1, 2, \dots, n-1)$

$$\alpha_i = \frac{h_{i+1}}{h_i + h_{i+1}}, \gamma_i = 1 - \alpha_i$$

其中

$$\beta_i = \frac{6}{h_i + h_{i+1}} \left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \right)$$

第一种边界条件:

$$\begin{aligned} 2M_0 + \alpha_0 M_1 &= \beta_0 \\ \gamma_n M_{n-1} + 2M_n &= \beta_n \end{aligned}$$

其中

$$\alpha_0 = 0, \beta_0 = 2y_0'', \gamma_n = 0, \beta_n = 2y_n''$$

$$\therefore \begin{bmatrix} 2 & \alpha_0 & & & \\ \gamma_1 & 2 & \alpha_1 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & \gamma_{n-1} & 2 & \alpha_{n-1} \\ & & & \gamma_n & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ \dots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \dots \\ \beta_{n-1} \\ \beta_n \end{bmatrix}$$

第二种边界条件:

$$\alpha_0 = 1, \beta_0 = \frac{6}{h_1} \left(\frac{y_1 - y_0}{h_1} - y_0' \right)$$

形式与第一种边界条件相同, 其中

$$\gamma_n = 1, \beta_n = \frac{6}{h_n} \left(y_n' - \frac{y_n - y_{n-1}}{h_n} \right)$$

第三种边界条件:

$$\begin{aligned} \alpha_n M_1 + \gamma_n M_{n-1} + 2M_n &= \beta_n \\ M_0 &= M_n \end{aligned}$$

$$\alpha_n = \frac{h_1}{h_1 + h_n}, \gamma_n = 1 - \alpha_n$$

其中

$$\beta_n = \frac{6}{h_1 + h_n} \left(\frac{y_1 - y_0}{h_1} - \frac{y_n - y_{n-1}}{h_n} \right)$$

$$\therefore \begin{bmatrix} 2 & \alpha_1 & & \gamma_1 \\ \gamma_2 & 2 & \alpha_2 & \\ & \dots & \dots & \dots \\ & & \gamma_{n-1} & 2 & \alpha_{n-1} \\ \alpha_n & & & \gamma_n & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \dots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \dots \\ \beta_{n-1} \\ \beta_n \end{bmatrix}$$

5.5 正交多项式

5.5.1 正交多项式概念与性质

幂函数系 $\{x^k (k=0,1,\dots)\}$ 在任何区间上线性无关, 可采用 Gram-Schmidt 正交化方法由幂函数系产生在指定区间 $[a,b]$ 上带权函数 $\rho(x)$ 的正交多项式系 $\{\varphi_k(x) (k=0,1,\dots)\}$, 其中 $\varphi_k(x)$ 是最高次项系数为 1 的 k 次多项式。方法如下:

$$\begin{cases} \varphi_0(x) \equiv 1 \\ \varphi_{k+1}(x) = x^{k+1} - \sum_{j=1}^k \frac{(x^{k+1}, \varphi_j)}{(\varphi_j, \varphi_j)} \varphi_j(x) (k=0,1,\dots) \end{cases}$$

5.5.2 几种常见的正交多项式

1、Legendre 多项式

$$\begin{cases} L_0(x) \equiv 1 \\ L_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2-1)^n] (n=1,2,\dots) \end{cases}$$

性质 1 $\{L_n(x)\}$ 是区间 $[-1,1]$ 上的正交多项式系

$$\int_{-1}^1 L_m(x) L_n(x) dx = \begin{cases} 0, m \neq n \\ \frac{2}{2n+1}, m = n \end{cases}$$

性质 2 $L_n(x)$ 的最高次项系数为 $a_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}$

性质 3 n 为奇数时 $L_n(x)$ 为奇函数, n 为偶数时 $L_n(x)$ 为偶函数。

性质 4 满足递推关系: 当 $n \geq 1$ 时, 有 $L_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x L_n(x) - \frac{n}{n+1} L_{n-1}(x)$

$$L_0(x) \equiv 1$$

$$L_1(x) = x$$

2、Chebyshev 多项式

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x), -1 \leq x \leq 1$$

性质 1 $T_n(x)$ 是 x 的 n 次多项式, 并且当 $n \geq 1$ 时, $T_n(x)$ 的最高次项系数为 $a_n = 2^{n-1}$

性质 2 $T_n(x)$ 是区间 $[-1,1]$ 上带权 $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的正交多项式系

$$\int_{-1}^1 \frac{T_m(x)T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \begin{cases} 0, m \neq n \\ \frac{\pi}{2}, m = n \neq 0 \\ \pi, m = n = 0 \end{cases}$$

性质 3 满足递推关系
$$\begin{cases} T_0(x) \equiv 1 \\ T_1(x) = x \\ T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) (n=1, 2, \dots) \end{cases}$$

性质 4 当 $n \geq 1$ 时, $T_n(x)$ 在开区间 $(-1,1)$ 内有 n 个互异实零点, 它们是

$$x_i = \cos \frac{2(n-i)+1}{2n} \pi (i=1, 2, \dots)$$

性质 5 当 n 为奇数时 $T_n(x)$ 是奇函数, 当 n 为偶数时 $T_n(x)$ 为偶函数。

3、Laguerre 多项式

$$U_n(x) = e^x \frac{d^n(x^n e^{-x})}{dx^n} (n=0, 1, \dots)$$

性质 1 $U_n(x)$ 是 x 的 n 次多项式, 并且最高次项系数为 $a_n = (-1)^n$

性质 2 $\{U_n(x)\}$ 是在区间 $[0, \infty)$ 上带权 e^{-x} 的正交多项式系

$$\int_0^\infty e^{-x} U_m(x) U_n(x) dx = \begin{cases} 0, m \neq n \\ (n!)^2, m = n \end{cases}$$

性质 3 $U_n(x)$ 满足递推关系
$$\begin{cases} U_0(x) \equiv 1 \\ U_1(x) = -x + 1 \\ U_{n+1}(x) = (2n+1-x)U_n(x) - n^2 U_{n-1}(x) (n=1, 2, \dots) \end{cases}$$

4、Hermite 多项式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n(e^{-x^2})}{dx^n} (n=0, 1, \dots)$$

性质 1 $H_n(x)$ 是 x 的 n 次多项式, 并且它的最高次项系数为 $a_n = 2^n$

性质 2 $\{H_n(x)\}$ 是在区间 $(-\infty, +\infty)$ 上带权 e^{-x^2} 的正交多项式系

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx = \begin{cases} 0, m \neq n \\ 2^n n! \sqrt{\pi}, m = n \end{cases}$$

$$\text{性质 3 } H_n(x) \text{ 满足递推关系 } \begin{cases} H_0(x) \equiv 1 \\ H_1(x) = 2x \\ H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) (n=1, 2, \dots) \end{cases}$$

5.6 函数的最佳平方逼近

5.6.1 最佳平方逼近的概念与解法

定理 5.7 设 $f(x) \in C[a, b]$, $p^*(x) \in H_n$ 是子空间 H_n 中对于 $f(x)$ 的最佳平方逼近元素的充分必要条件是

$$(f - p^*, \varphi_j) = 0, j = (0, 1, \dots, n)$$

或对任一个 $p(x) \in H_n$, 总有

$$(f - p^*, p) = 0$$

***除 Legendre、Chebyshev(最经济展开), 还可以用 $\{1, \cos x, \sin x, \dots, \cos nx, \sin nx\}$, 它是区间 $[0, 2\pi]$ 上的正交函数系。

5.6.3 样条函数在最佳平方逼近中的应用

可以选用空间 $\mathcal{D}_{k,\pi}$ 的 k 次 B 样条函数组, 但是由于这一函数组不是正交函数系, 所以使用过程稍有不同, 但仍然遵循定理 5.7。

5.6.4 曲线拟合与曲面拟合 (最小二乘)

1、曲线拟合

定理 5.11 设函数组 $\{\varphi_j(x) (j=0, 1, \dots, n)\}$ 在点集 $\{x_i (i=0, 1, \dots, m)\} (n \leq m)$ 上线性无关, 则

$c^* \in R^{n+1}$ 实现最小二乘法求拟合曲线的充分必要条件是 $A^T A c^* = A^T y$ 。

$$\phi_j = (\varphi_j(x_0), \varphi_j(x_1), \dots, \varphi_j(x_n))^T (j=0, 1, \dots, n)$$

$$A = [\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n]$$

$$y = (y_0, y_1, \dots, y_m)^T$$

$$c^* = (c_0^*, c_1^*, \dots, c_n^*)^T$$

拟合函数为 $y^*(x) = \sum_{j=1}^n c_j^* \varphi_j(x)$, 拟合精度用误差平方和描述, 即 $\sigma = \sum_{i=0}^m [y^*(x_i) - y_i]^2$ 。

2、曲面拟合

设在三维直角坐标系 Oxyu 中给定 $(m+1) \times (n+1)$ 个点 $(x_i, y_j, u_{ij}) (i=0, 1, \dots, m; j=0, 1, \dots, n)$

乘积型基函数 $\{\varphi_r(x) \psi_s(y) (r=0, 1, \dots, M; s=0, 1, \dots, N)\}$

$$\begin{aligned}
B &= [\varphi_r(x_i)]_{(m+1) \times (M+1)} \\
U &= [u_{ij}]_{(m+1) \times (n+1)} \\
G &= [\psi_s(y_j)]_{(n+1) \times (N+1)} \\
C &= (B^T B)^{-1} B^T U G (G^T G)^{-1}
\end{aligned}$$

拟合函数为 $p^*(x, y) = \sum_{s=0}^N \sum_{r=0}^M c_{rs}^* \varphi_r(x_i) \psi_s(y_j)$, 拟合精度为 $\sigma = \sum_{j=0}^n \sum_{i=0}^m [p^*(x_i, y_j) - u_{ij}]^2$ 。

6.2 插值型求积公式

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

其中 $\lambda_k^{(n)} = \int_a^b l_k(x) dx (k=0, 1, \dots, n)$

$$R_n = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \left[\prod_{j=0}^n (x - x_j) \right] dx$$

其中 $\xi \in (a, b)$

定理 6.1 $n+1$ 个节点的插值型求积公式至少具有 n 次代数精度。

推论 对于 $n+1$ 个节点的插值型求积公式的求积系数, 必满足 $\sum_{k=0}^n \lambda_k^{(n)} = b - a$

定理 6.2 $n+1$ 个节点的求积公式如果具有 n 次或者大于 n 次的代数精度, 则它是插值型求积公式。

6.3 Newton-Cotes 求积公式

如果节点等距, 且 $x_0 = a, x_n = b, x_k = a + kh (k=0, 1, \dots, n)$ $h = \frac{b-a}{n}$, 则相应的插值型求

积公式称为 Newton-Cotes 求积公式, 相应的求积系数称为 Newton-Cotes 求积系数。

令 $x = a + th$

$$\therefore \lambda_k^{(n)} = (b-a) c_k^{(n)} (k=0, 1, \dots, n)$$

$$c_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!n} \int_0^n \left[\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (t-j) \right] dt$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n \lambda_k^{(n)} f\left(a + k \frac{b-a}{n}\right)$$

$$R_n = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} \int_0^n f^{(n+1)}(\xi) \left[\prod_{j=0}^n (t-j) \right] dt$$

$$c_k^{(1)}: \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

$$c_k^{(2)}: \frac{1}{6}, \frac{4}{6}, \frac{1}{6}$$

$$c_k^{(3)}: \frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{1}{8}$$

$$c_k^{(4)}: \frac{7}{90}, \frac{16}{45}, \frac{2}{15}, \frac{16}{45}, \frac{7}{90}$$

定理 6.3 当 n 为偶数时, $n+1$ 个节点的 Newton-Cotes 求积公式的代数精度至少是 $n+1$ 。

1、梯形公式($n=1$)

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

$$R_1 = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \eta \in (a, b)$$

2、Simpson 公式($n=2$)

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

$$R_2 = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta), \eta \in (a, b)$$

3、Simpson3/8 公式($n=3$)

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{8} [f(a) + 3f(\frac{2a+b}{3}) + 3f(\frac{a+2b}{3}) + f(b)]$$

$$R_3 = -\frac{(b-a)^5}{6480} f^{(4)}(\eta), \eta \in (a, b)$$

4、Cotes 公式($n=4$)

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{90} [7f(a) + 32f(\frac{3a+b}{4}) + 12f(\frac{a+b}{2}) + 32f(\frac{a+3b}{4}) + 7f(b)]$$

$$R_4 = -\frac{(b-a)^7}{1935360} f^{(6)}(\eta), \eta \in (a, b)$$

6.4 Newton-Cotes 求积公式的收敛性与数值稳定性

如果对于任何 n , $\sum_{k=0}^n |\lambda_k^{(n)}| \leq K$, 则 Newton-Cotes 求积公式具有数值稳定性。

6.5 复化求积法

6.5.1 复化梯形公式与复化 Simpson 公式

1、复化梯形公式

$$x_k = a + kh (k = 0, 1, \dots, n), h = \frac{b-a}{n}$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(a) + f(b) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh)]$$

$$R_T = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\eta), \eta \in [a, b]$$

只要函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上可积, 则当 $n \rightarrow \infty$ 时, 复化梯形公式右端 (称为复化梯形

值) 收敛于积分 $\int_a^b f(x)dx$ 。 $\sum_{k=0}^n |\lambda_k^{(n)}| = b-a$, 具有数值稳定性。

2、复化 Simpson 公式

$$x_k = a + kh (k = 0, 1, \dots, 2m), h = \frac{b-a}{2m}$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[f(a) + f(b) + 4\sum_{i=1}^m f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i})]$$

$$R_S = -\frac{(b-a)}{180} h^4 f^{(4)}(\eta), \eta \in [a, b]$$

只要函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上可积, 则当 $m \rightarrow \infty$ 时, 复化 Simpson 公式右端 (称为复化

Simpson 值) 收敛于积分 $\int_a^b f(x)dx$ 。 $\sum_{k=0}^n |\lambda_k^{(n)}| = b-a$, 具有数值稳定性。

6.5.2 区间逐次分半法

用 T_m 表示积分区间 $[a, b]$ 被分为 $n = 2^m$ 等分后所形成的复化梯形值, $h_m = (b-a)/2^m$, 有如下递推公式

$$\begin{cases} T_0 = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] \\ T_m = \frac{1}{2}T_{m-1} + h_m \sum_{i=1}^{2^{m-1}} f(a + (2i-1)h_m), (m = 1, 2, \dots) \end{cases}$$

给定 T_m 的绝对误差限 $\varepsilon > 0$, 当满足 $|T_{m+1} - T_m| < \frac{3}{4}\varepsilon$ 时停止计算, 并认为 T_m 已满足精度要求。

6.6 Romberg 积分法

利用 Richardson 外推算法, 得到如下的求积方法 (只产生四个序列 $\{T_m^{(0)}\}$ $\{T_m^{(1)}\}$ $\{T_m^{(2)}\}$ $\{T_m^{(3)}\}$)

$$\left\{ \begin{array}{l} T_0^{(0)} = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] \\ \text{for } m = 1, 2, \dots \\ (1) h_m = \frac{b-a}{2^m} \\ (2) T_m^{(0)} = \frac{1}{2} T_{m-1}^{(0)} + h_m \sum_{i=1}^{2^{m-1}} f(a + (2i-1)h_m) \\ (3) T_{m-j}^{(j)} = \frac{4^j T_{m-j+1}^{(j-1)} - T_{m-j}^{(j-1)}}{4^j - 1}, [j = 1, 2, \dots, \min(3, m)] \end{array} \right.$$

迭代结束的准则是 $\frac{|T_m^{(3)} - T_{m-1}^{(3)}|}{|T_m^{(3)}|} \leq \varepsilon$ ，并认为 $T_m^{(3)}$ 就是所求积分的近似值。

6.7 Gauss 型求积公式（带权函数求积公式）

6.7.1 一般理论

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$$

$$A_i = \int_a^b \frac{\rho(x) \omega_n(x)}{(x - x_i) \omega_n'(x_i)} dx \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$R = \int_a^b \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \rho(x) \omega_n(x) dx$$

定义 如果 n 个节点的求积公式的代数精度为 $2n-1$ 次，则称它为 Gauss 型求积公式。

定理 6.5 设 $\{g_k(x)\} (k=0, 1, \dots)$ 是区间 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式系，则上述求积公式是 Gauss 型求积公式的充分必要条件是它的求积节点是 n 次正交多项式 $g_n(x)$ 的 n 个零点 $x_i (i=1, 2, \dots, n)$ 。

定理 6.6 设 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上有 $2n$ 阶连续导数，则 Gauss 型求积公式的截断误差为

$$R = \frac{f^{(2n)}(\eta)}{a_n^2(2n)!} \int_a^b \rho(x) g_n^2(x) dx$$

定理 6.7 设上述求积公式是 Gauss 型求积公式，则它的求积系数 A_i 满足

$$(1) \quad A_i > 0 (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$(2) \quad \sum_{i=1}^n A_i = \int_a^b \rho(x) dx$$

6.7.2 几种 Gauss 型求积公式

1、Gauss-Legendre 求积公式

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$$

$$A_i = \frac{2}{(1-x_i^2)[L'_n(x_i)]^2} (i=1,2,\dots,n)$$

$$R = \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \cdot \frac{2^{2n}(n!)^4}{[(2n)!]^2} \cdot \frac{2}{2n+1}, \quad \eta \in (-1,1)$$

n	x_i	A_i
1	0	2
2	$\pm 0.577\ 350\ 269\ 2$	1
3	$\pm 0.774\ 596\ 669\ 2$ 0	0.555 555 555 6 0.888 888 888 9
4	$\pm 0.861\ 136\ 311\ 6$ $\pm 0.339\ 981\ 043\ 6$	0.347 854 845 1 0.652 145 154 9

2、Gauss-Laguerre 求积公式

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$$

$$A_i = \frac{(n!)^2}{x_i [U'_n(x_i)]^2} (i=1,2,\dots,n)$$

$$R = \frac{(n!)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\eta), \quad \eta \in (0, \infty)$$

n	x_i	A_i
1	1	1
2	0.585 786 437 6 3.414 213 562 4	0.853 553 390 6 0.146 446 609 4
3	0.415 774 556 8 2.294 280 360 3 6.289 945 082 9	0.711 093 009 9 0.278 517 733 6 0.010 389 256 5
4	0.322 547 689 6 1.745 761 101 2 4.563 620 296 9 9.395 070 912 3	0.603 154 104 3 0.357 418 692 4 0.038 887 908 5 0.000 539 294 7

3、Gauss-Hermite 求积公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$$

$$A_i = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{[H'_n(x_i)]^2} (i=1, 2, \dots, n)$$

$$R = \frac{n! \sqrt{\pi}}{2^n (2n)!} f^{(2n)}(\eta), \quad \eta \in (-\infty, \infty)$$

n	x_i	A_i
1	0	1.772 453 850 0
2	$\pm 0.707 106 781 2$	0.886 226 925 5
3	$\pm 1.224 744 871 4$ 0	0.295 408 975 2 1.181 635 900 6
4	$\pm 1.650 680 123 9$ $\pm 0.524 647 623 3$	0.081 312 835 5 0.804 914 090 0

4、Gauss-Chebyshev 求积公式

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$$

$$x_i = \cos \frac{2(n-i)+1}{2n} \pi, (i=1, 2, \dots, n)$$

$$A_i = \frac{\pi}{n} (i=1, 2, \dots, n)$$

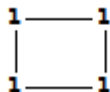
$$R = \frac{2\pi}{2^{2n} (2n)!} f^{(2n)}(\eta), \quad \eta \in (-1, 1)$$

6.8 二重积分的数值求积法

6.8.1 矩形域上的二重积分

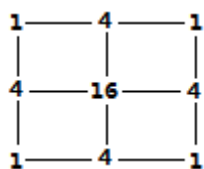
1、复化梯形公式

$$I(f) = \frac{h\tau}{4} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \lambda_{ij} f_{ij}$$



2、复化 Simpson 公式

$$I(f) = \frac{h\tau}{9} \sum_{i=0}^{2m} \sum_{j=0}^{2n} \lambda_{ij} f_{ij}$$



7.1 常微分方程初值问题的数值解法一般概念

步长 h , 取节点 $t_n = t_0 + nh, (n=0, 1, \dots, M)$, 且 $t_M \leq T$, 则初值问题 $\begin{cases} y' = f(t, y), t_0 \leq t \leq T \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$

的数值解法的一般形式是

$$F(t_n, y_n, y_{n+1}, \dots, y_{n+k}, h) = 0, (n=0, 1, \dots, M-k)$$

7.2 显示单步法

7.2.1 显示单步法的一般形式

$$y_{n+1} = y_n + h\varphi(t_n, y_n, h), (n=0, 1, \dots, M-1)$$

定理 7.2.1 设增量函数 $\varphi(t_n, y_n, h)$ 在区域 $D = \{(t, y, h) | t_0 \leq t \leq T, |y| < \infty, 0 \leq h \leq h_0\}$ 内对变量 y 满足 Lipschitz 条件, 即存在常数 K , 使对 D 内任何两点 (t, u_1, h) 和 (t, u_2, h) , 不等式 $|\varphi(t, u_1, h) - \varphi(t, u_2, h)| \leq K |u_1 - u_2|$ 成立, 那么, 若单步法的局部截断误差 R_{n+1} 与 $h^{p+1} (p \geq 1)$ 同阶, 即 $R_{n+1} = O(h^{p+1})$, 则单步法的整体截断误差 ε_{n+1} 与 h^p 同阶, 即 $\varepsilon_{n+1} = O(h^p)$ 。(且称单步法为 p 阶方法)

7.2.2 Runge-Kutta 方法(显式单步法)

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^N c_i k_i \\ k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_i = f(t_n + a_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j) (i=2, 3, \dots, N) \\ a_i = \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} (i=2, 3, \dots, N) \\ (n=0, 1, \dots, M-1) \end{cases}$$

N 级 R-K 方法的局部截断误差为 $R_{n+1} = y(t_{n+1}) - y(t_n) - h \sum_{i=1}^N c_i k_i$, 其中 k_1, k_2, \dots, k_N 中的 y_n 都换成 $y(t_n)$ 。

一级一阶 R-K (Euler 方法)

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n)$$

$$R_{n+1} = \frac{h^2}{2} y''(t_n) + O(h^3)$$

二级 R-K

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(c_1 k_1 + c_2 k_2) \\ k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + a_2 h, y_n + a_2 h k_1) \end{cases}$$

最高阶数是二阶，需满足条件

$$\begin{cases} 1 - c_1 - c_2 = 0 \\ \frac{1}{2} - a_2 c_2 = 0 \end{cases}$$

$$R_{n+1} = \left(\frac{1}{6} - \frac{a_2}{4}\right) h^3 y'''(t_n) + \frac{a_2}{4} h^3 y''(t_n) f_y' + O(h^4)$$

	c_1	c_2	a_2
改进 Euler 法	1/2	1/2	1
中点公式	0	1	1/2
Heun(休恩)方法	1/4	3/4	2/3

四级 R-K

经典 R-K 方法（四阶）

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1) \\ k_3 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2) \\ k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3) \end{cases}$$

Gill(基尔)方法（四阶）

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + (2 - \sqrt{2})k_2 + (2 + \sqrt{2})k_3 + k_4) \\ k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1) \\ k_3 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{\sqrt{2}-1}{2}hk_1 + \frac{2-\sqrt{2}}{2}hk_2) \\ k_4 = f(t_n + h, y_n - \frac{\sqrt{2}}{2}hk_2 + \frac{2+\sqrt{2}}{2}hk_3) \end{cases}$$

7.2.3 相容性、收敛性和绝对稳定性

相容性条件： $\varphi(t, y(t), 0) = f(t, y(t))$ 。

定理 7.2 设增量函数 $\varphi(t, y, h)$ 在区域 $D = \{(t, y, h) | t_0 \leq t \leq T, |y| < \infty, 0 \leq h \leq h_0\}$ 上连续，

且对变量 h 满足 Lipschitz 条件, 则单步法与微分方程相容的充分必要条件是单步法至少是一阶的方法。

定理 7.3 设增量函数 $\varphi(t, y, h)$ 在区域 $D = \{(t, y, h) | t_0 \leq t \leq T, |y| < \infty, 0 \leq h \leq h_0\}$ 上连续,

并对变量 y 和 h 满足 Lipschitz 条件。如果单步法与微分方程相容, 则单步法是收敛的。

绝对稳定区域、绝对稳定区间: 将 $y' = \lambda y$ 带入方法中, 求得 $y_{n+1} = (***)y_n$, 则绝对稳定

区域为 $||**|| < 1$, 当 λ 为实数时, 可以求得稳定区间。对于一般微分方程, 对其右端函数

$f(t, y)$ 进行线性化处理后可知 $\lambda = \frac{\partial f}{\partial y}$ 。

	绝对稳定区域	绝对稳定区间
一级一阶 R-K(Euler 法)	$ 1+h\lambda < 1$	$-2 < h\lambda < 0$
二级二阶 R-K	$ 1+h\lambda + \frac{(h\lambda)^2}{2} < 1$	$-2 < h\lambda < 0$
三级三阶 R-K	$ 1+h\lambda + \frac{(h\lambda)^2}{2} + \frac{(h\lambda)^3}{6} < 1$	$-2.51 < h\lambda < 0$
四级四阶 R-K	$ 1+h\lambda + \frac{(h\lambda)^2}{2} + \frac{(h\lambda)^3}{6} + \frac{(h\lambda)^4}{24} < 1$	$-2.78 < h\lambda < 0$

7.3 线性多步法

7.3.1 线性多步法的一般形式

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j}, (n = 0, 1, \dots, M-k)$$

若 $\beta_k = 0$, 则线性多步法是显式方法; 若 $\beta_k \neq 0$, 则线性多步法是隐式方法。

$$R_{n+k} = c_0 y(t_n) + c_1 h y'(t_n) + c_2 h^2 y''(t_n) + \dots + c_r h^r y^{(r)}(t_n) + \dots$$

$$\text{其中} \begin{cases} c_0 = \alpha_0 + \alpha_1 + \dots + \alpha_k \\ c_1 = \alpha_1 + 2\alpha_2 + \dots + k\alpha_k - (\beta_0 + \beta_1 + \dots + \beta_k) \\ \dots \\ c_r = \sum_{j=1}^k \frac{j^r \alpha_j}{r!} - \sum_{j=1}^k \frac{j^{r-1} \beta_j}{(r-1)!}, (r = 2, 3, \dots) \end{cases}$$

若 $c_0 = c_1 = \dots = c_p, c_{p+1} \neq 0$, 此时 k 步法是 p 阶方法。此外, 计算开始值 y_1, y_2, \dots, y_{k-1} 的单步法应至少与该线性 k 步法同阶。

7.3.2 预报校正公式

Euler 法与梯形法构成的预报-校正格式（实际是改进的 Euler 法）：

$$\begin{cases} \tilde{y}_{n+1} = y_n + hf_n \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f_n + f(t_{n+1}, \tilde{y}_{n+1})] \\ (n = 0, 1, \dots, M-1) \end{cases}$$

7.3.3 相容性和收敛性

相容性条件： $\rho(1) = 0, \rho'(1) = \sigma(1), \rho(\xi) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \xi^j, \sigma(\xi) = \sum_{j=0}^k \beta_j \xi^j$

根条件： $\rho(\xi) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \xi^j$ 的零点的模不大于 1，并且模为 1 的零点都是单零点。

定理 7.4 设线性 k 步法满足相容性条件和根条件，则当计算开始值的单步法收敛时，k 步法也是收敛的；此外，若 k 步法是 p 阶的，并且开始所用的单步法是不低于 p 阶的，则 k 步法的整体截断误差为

$$\varepsilon_m = y(t_m) - y_m = O(h^p), m \geq k$$

7.3.4 绝对稳定性

$$y' = \lambda y, \mu = h\lambda$$

线性 k 步法的特征方程： $\rho(\xi) - \mu\sigma(\xi) = 0$

绝对稳定区域： $G = \{\mu \mid |\xi| < 1, \sum_{j=0}^k (\alpha_j - \mu\beta_j)\xi^j = 0\}$

7.5 常微分方程组与刚性问题

7.5.1 常微分方程初值问题的数值解法

记 $y = (y_1, y_2, \dots, y_s)^T$, $y_0 = (y_{10}, y_{20}, \dots, y_{s0})^T$, $f = (f_1, f_2, \dots, f_s)^T$, 则一阶常微分方程组

初值问题可表示为向量形式 $\begin{cases} y' = f(t, y), t_0 \leq t \leq T \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$ 。

设此初值问题的方程组是一般微分方程组，并设 f 关于 y 的 Jacobi 矩阵 $\frac{\partial f}{\partial y} = \left[\frac{\partial f_i}{\partial y_j} \right]_{s \times s}$

在区间 $t_0 \leq t \leq T$ 内有 s 个线性无关的特征向量。然后求出 Jacobi 矩阵的所有特征值 λ ，所选的 h 要使 $h\lambda$ 位于所用方法的绝对稳定区域。（ λ 可能为复数的情况要加以讨论）