

数值分析

期末复习要点总结



- 一. 误差的来源:
 - 1. 模型误差
 - 2. 观测误差
 - 3. 截断误差
 - 4. 舍入误差
- 二. 绝对误差、相对误差和有效数字

定义 设x为准确值x*的一个近似值,称

$$e(x) = x - x^*$$

为近似值 *x* 的绝对误差, 简称误差. 若

$$|e(x)| = |x - x^*| \le \varepsilon$$

通常称 ε 为近似值 x 的绝对误差限, 简称误差限.

定义 设 x为准确值 x^* 的近似值, 称绝对误差与

准确值之比为近似值x 的相对误差,记为 $e_r(x)$

$$e_r(x) = \frac{e(x)}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*}$$

由于在计算过程中准确值 x* 总是未知的,

故一般取相对误差为

$$e_r(x) = \frac{e(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x}$$

如果存在正数 ε_r 使得

$$|e_r(x)| = \left|\frac{e(x)}{x}\right| \le \varepsilon_r$$

则称 ε_r 为 x 的相对误差限.

有效数字

一般地,如果近似值 的规格化形式为

$$x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \cdots \times 10^m$$

其中m为整数,

如果

$$a_1 \neq 0, a_i (i = 为2) 之间的整数.$$

$$\left| x - x^* \right| \le \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

则称近似值 有n位有效数字.

误差插播规律

$$\begin{cases} e(x_1 \pm x_2) = e(x_1) \pm e(x_2) \\ e_r(x_1 \pm x_2) = \frac{x_1}{x_1 \pm x_2} e_r(x_1) \pm \frac{x_2}{x_1 \pm x_2} e_r(x_2) \\ e(x_1 x_2) \approx x_2 e(x_1) + x_1 e(x_2) \\ e_r(x_1 x_2) \approx e_r(x_1) + e_r(x_2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} e\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \frac{1}{x_2} e(x_1) - \frac{x_1}{x_2^2} e(x_2) \\ e_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx e_r(x_1) - e_r(x_2) \end{cases}$$

例 设近似数 a = 1.557 是某真值 x 经四舍五入

所得, 试求其绝对误差限和相对误差限.

解由于a经四舍五入得到,故

$$\left| e(a) \right| \le \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

$$\left| e_r(a) \right| = \left| \frac{e(a)}{a} \right| \le \frac{\frac{1}{2} \times 10^{-3}}{1.577}$$

$$=3.1705\times10^{-4}$$

数值计算中的一些原则

- 1. 避免两个相近的数相减
- 2. 避免大数"吃"小数的现象
- 3. 避免除数的绝对值远小于被除数的绝对值
- 4. 要简化计算,减少运算次数,提高效率
- 5. 要有数值稳定性,即能控制舍入误差的传播

例如 为提高数值计算精度, 当正数x充分大时,应将

$$\sqrt{2x+1} - \sqrt{2x-1}$$

改写为

$$\frac{(\sqrt{2x+1}-\sqrt{2x-1})(\sqrt{2x+1}+\sqrt{2x-1})}{\sqrt{2x+1}+\sqrt{2x-1}} = \frac{2}{\sqrt{2x+1}+\sqrt{2x-1}}$$



例 如何计算下列函数值才比较精确

(1)
$$\frac{1}{1+2x} - \frac{1}{1+x}$$
 $|x| << 1$ (2) $\sqrt{x+\frac{1}{x}} - \sqrt{x-\frac{1}{x}}$ $|x| >> 1$

解(1) 要使计算准确, 应避免两个相近的数相减故变换所给公式

$$\frac{1}{1+2x} - \frac{1}{1+x} = \frac{-x}{(1+2x)(1+x)}$$

(2) 要使计算准确, 应避免两个相近的数相减

故变换所给公式

$$\sqrt{x + \frac{1}{x}} - \sqrt{x - \frac{1}{x}} = \frac{(\sqrt{x + \frac{1}{x}} - \sqrt{x - \frac{1}{x}})(\sqrt{x + \frac{1}{x}} + \sqrt{x - \frac{1}{x}})}{\sqrt{x + \frac{1}{x}} + \sqrt{x - \frac{1}{x}}} = \frac{\frac{2}{x}}{\sqrt{x + \frac{1}{x}} + \sqrt{x - \frac{1}{x}}} = \frac{\frac{2}{x}}{\sqrt{x + \frac{1}{x}} + \sqrt{x - \frac{1}{x}}}$$

第二章 非线性方程求解

- •区间对分法(二分法)
- 1. 计算f(x)在有解区间[a, b]端点处的值,f(a),f(b)。
- 2. 计算f(x)在区间中点处的值 $f(x_1)$ 。
- 3. 判断若 $f(x_1) = 0$,则 x_1 即是根,否则检验:
 - (1) 若 $f(x_1)$ 与f(a)异号,则知解位于区间[a, x_1],

$$b_1 = x_1, a_1 = a;$$

(2) 若 $f(x_1)$ 与f(a)同号,则知解位于区间[x_1 , b],

$$a_1 = x_1, b_1 = b$$
.

反复执行步骤2、3,便可得到一系列有根区间:

$$(a, b), (a_1, b_1), ..., (a_k, b_k), ...$$

4、当
$$b_{n+1}-a_{n+1}<\varepsilon$$
 时

5、则
$$x_{n+1} = \frac{1}{2}(a_k + b_k)$$
 即为根的近似

先验误差估计:

$$\left|x_{k+1} - x^*\right| \le \frac{1}{2^{k+1}}(b-a)$$
 $(k=1,2,\cdots)$

理论基础:

定理1: 设函数 f(x) 在区间[a, b]上连续,如果 $f(a) \cdot f(b) < 0$,则方程 f(x) = 0 在[a, b]内至少有一实根 x^* 。

例 试用对分区间法求方程

$$x^5 + 3x - 1 = 0$$

在[0, 0.5]内的根,要求误差不超过 $\frac{1}{-\times10^{-2}}$.

[解] 令
$$f(x) = x^5 + 3x - 1$$
 则

$$f(0) = -1 < 0, f(0.5) = 0.531 > 0$$
 $f'(x) = 5x^4 + 3 > 0,$

故在[0,0.5]内
$$f(x) = x^5 + 3x - 1 = 0$$
 有唯一实根.
为达到要求 $\ln \frac{(b-a)}{}$

为达到要求

$$\ln \frac{(b-a)}{a}$$

$$n \ge \frac{\mathcal{E}}{\ln 2} - 1$$

即

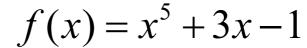
$$\ln \frac{(0.5-0)}{\frac{1}{2} \times 10^{-2}}$$

$$n \ge \frac{\frac{1}{2} \times 10^{-2}}{\ln 2} - 1 = \frac{\ln 10^2}{\ln 2} - 1 = 5.64$$

 $\mathbf{N} = 6$

计算结果见下表。





n	a_n	b_n	\mathcal{X}_n	$f(x_n)$
0	0	0.5	0.25	-0.249023
1	0.25	0.5	0.375	0.1324158
2	0.25	0.375	0.3125	-0.0595197
3	0.3125	0.375	0.34375	0.0360497
4	0.3125	0.34375	0.328125	-0.0118214
5	0.328125	0.34375	0.3359375	0.01209101
6	0.328125	0.3359375	0.33203125	0.00012923

故 $x_6 = 0.33203125$ 即为符合精度要求的解.





不动点迭代

- □基本思想
- 构造 f(x) = 0 的一个等价方程: $x = \varphi(x)$

$$f(x) = 0$$
 等价变换
$$x = \varphi(x)$$

$$f(x)$$
 的零点
$$\varphi(x)$$
 的不动点

不动点迭代

- □具体过程
 - 任取一个迭代初始值 x_0 ,计算

$$x_{k+1} = \varphi(x_k)$$
 $k = 0, 1, 2, ...$

得到一个迭代序列: $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n, \ldots$

几何含义:求曲线 $y = \varphi(x)$ 与直线 y = x 的交点

□收敛性分析

设 $\varphi(x)$ 连续,若 $\left\{x_k\right\}_{k=0}^{\infty}$ 收敛,即 $\lim_{k\to\infty}x_k=x^*$,则

$$\lim_{k\to\infty} x_{k+1} = \lim_{k\to\infty} \varphi(x_k) = \varphi\left(\lim_{k\to\infty} x_k\right)$$

$$x^* = \varphi(x^*) \quad \square \quad f(x^*) = 0$$

性质: 若 $\lim_{k\to\infty} x_k = x^*$,则不动点迭代收敛,且 x^* 是 f(x)=0 的解;否则迭代法发散。



不动点迭代的收敛性

定理: 设 $\varphi(x) \in C[a,b]$ 且满足

- (1) 对任意的 $x \in [a,b]$ 有 $\varphi(x) \in [a,b]$
- (2) 存在常数 0 < L < 1,使得任意的 $x, y \in [a,b]$ 有

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

则对任意初始值 $x_0 \in [a,b]$,不动点迭代 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 收敛,且

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

定理: 若 $\varphi(x) \in C^1[a,b]$ 且对任意 $x \in [a,b]$ 有

$$|\varphi'(x)| \leq L \leq 1$$

则上述定理中的结论成立。

收敛性结论表明: 收敛性与初始值的选取无关



例: 求 $f(x) = x^3 - x - 1 = 0$ 在区间 [1, 2] 中的根

(1)
$$\varphi(x) = x^3 - 1$$
 $0 \le \varphi(x) \le 7$ $(x \in [1, 2])$
 $\varphi'(x) = 3x^2$ $|\varphi'(x)| > 1$

(2)
$$\varphi(x) = \sqrt[3]{x+1}$$
 $1 \le \varphi(x) \le 2$ $(x \in [1,2])$ $\varphi'(x) = \frac{1}{3}(x+1)^{-\frac{2}{3}}$ $|\varphi'(x)| \le \frac{1}{3}\sqrt[3]{0.25} < 1$

局部收敛

定义:设 x^* 是 $\varphi(x)$ 的不动点,若存在 x^* 的某个 δ -邻域 $U(x^*) = [x^* - \delta, x^* + \delta]$,对任意 $x_0 \in U(x^*)$,不动点迭代 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$

产生的点列都收敛到 x^* ,则称该迭代局部收敛。

定理: 设 x^* 是 $\varphi(x)$ 的不动点,若 $\varphi'(x)$ 在 x^* 的某个邻域内 连续,且

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

则不动点迭代 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 局部收敛



定义: 设迭代 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 收敛到 $\varphi(x)$ 的不动点 x^* , 记 $e_k = x_k - x^*$, 若

$$\lim_{k\to\infty}\frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^r}=C$$

其中常数 C>0,则称该迭代为 r 阶收敛。

- (1) 当 r=1 时称为线性收敛,此时 C<1
- (2) 当 r=2 时称为二次收敛,或平方收敛
- (3) 当 r > 1 时称为超线性收敛
- 二分法是线性收敛的
- 若 $\varphi'(x^*) \neq 0$,则不动点迭代 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 线性收敛

定理: 设 x^* 是 $\varphi(x)$ 的不动点,若 $\varphi^{(p)}(x)$ 在 x^* 的某邻域内连续,且

$$\varphi'(x^*) = \varphi''(x^*) = \dots = \varphi^{(p-1)}(x^*) = 0,$$

 $\varphi^{(p)}(x^*) \neq 0$

则迭代 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 是 p 阶收敛的。

例: 求 $f(x) = x^2 - 3 = 0$ 的正根 $x^* = \sqrt{3}$

(1)
$$\varphi(x) = x^2 - 3 + x$$
 $\varphi'(x^*) = 2\sqrt{3} + 1 > 1$

(2)
$$\varphi(x) = x - \frac{x^2 - 3}{4}$$
 $\varphi'(x^*) = 1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \approx 0.314 < 1$

(3)
$$\varphi(x) = \frac{1}{2} \left(x + \frac{3}{x} \right)$$

$$\varphi'(x^*) = 0$$

$$\varphi''(x^*) = \frac{2}{\sqrt{3}} \neq 0$$

二次收敛

例 用简单迭代法求方程 $e^x - 4x = 0$ 在[0,1]内的根精确到3位有效数字.

[Fig.
$$f(x) = e^x - 4x$$
, $f(0) = 1 > 0$, $f(1) = e - 4 < 0$

f(x) 在[0,1]内连续, $f'(x) = e^x - 4 < 0, x \in [0,1]$ 故 f(x) = 0 在[0,1]内有唯一 实根.

$$e^{x} - 4x = 0$$
 的等价方程为 $x = \frac{1}{4}e^{x}$ $\varphi(x) = \frac{1}{4}e^{x}, |\varphi'(x)| = \frac{1}{4}e^{x} \le \frac{1}{4}e^{x} < 1, x \in [0,1]$

又当 $x \in [0,1], \varphi(x) \in [0,1]$

故
$$x_{n+1} = \frac{1}{4}e^{x_n}$$
 对 $\forall x_0 \in [0,1]$ 均收敛. 取 $x_0 = 0.5$ 计算得

$$x_{n+1} = \frac{1}{4}e^{x_n} \qquad x_0 = 0.5$$

$$x_0 = 0.5$$

$$x_1 = 0.4122,$$

$$x_2 = 0.3775, \quad x_3 = 0.3675,$$

$$x_3 = 0.3675$$

$$x_4 = 0.3600,$$

$$x_5 = 0.3583$$

$$x_5 = 0.3583, \quad x_6 = 0.3571,$$

$$x_7 = 0.3575$$

故,
$$x^* = 0.358$$

Newton 法

□基本思想

将非线性方程线性化

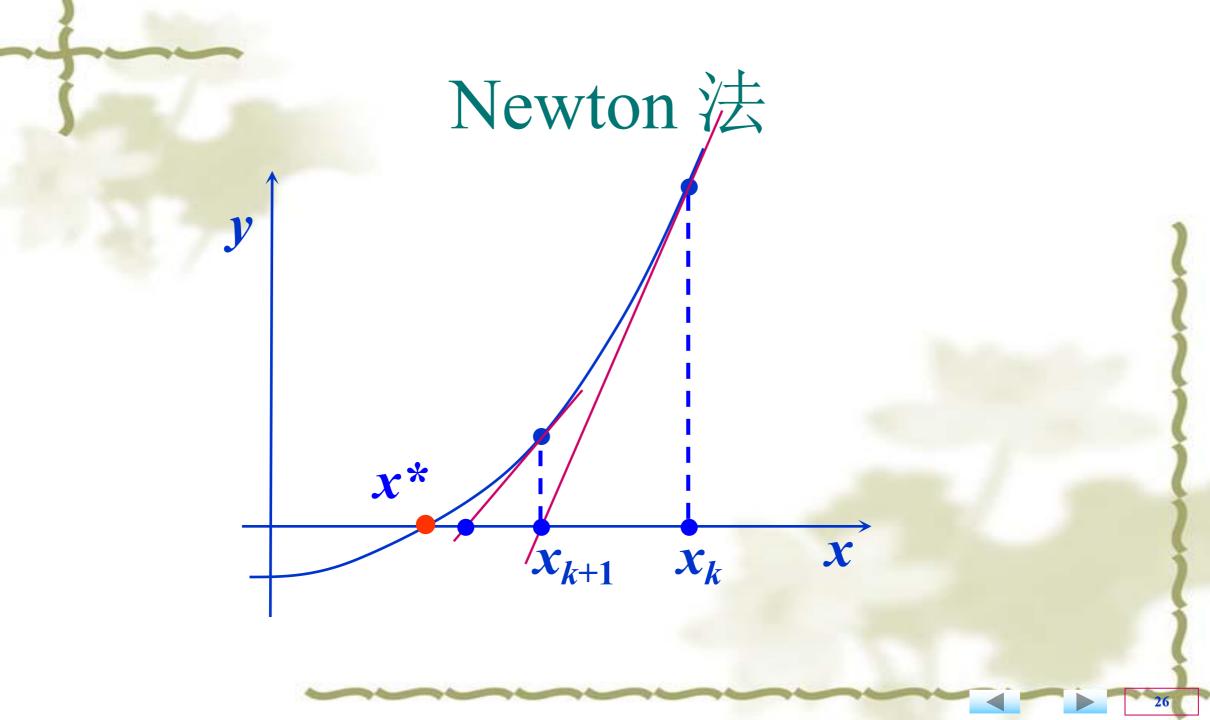
• 设 x_k 是f(x)=0的近似根,将f(x)在 x_k 处 Taylor 展开

$$f(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_k)^2$$

$$\approx f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) \triangleq P(x)$$

$$P(x) = 0$$

条件: $f'(x) \neq 0$



例7 用Newton法求方程 $f(x) = x^3 + 2x^2 + 10x - 20 = 0$ 在(1,2)的根, 取初值 $x_0 = 1$

[解] 因为
$$f(1) = -7$$
, $f(2) = 16$
 $f'(x) = 3x^2 + 4x + 10 > 0$, $x \in [1, 2]$
故在[1,2]内方程有唯一实根

根据 Newton 迭代
$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$
 得生脑迭化公式为

得牛顿迭代公式为

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^3 + 2x_n^2 + 10x_n - 20}{3x_n^2 + 4x_n + 10}$$

取初值 $x_0 = 1$ 得

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^3 + 2x_n^2 + 10x_n - 20}{3x_n^2 + 4x_n + 10} \qquad x_0 = 1$$

代入初值得

$$x_1 = 1.411764706$$
, $x_2 = 1.369336471$

$$x_3 = 1.368808189, \qquad x_4 = 1.368808108,$$

$$x_5 = 1.368808108$$

$$\left| x_5 - x_4 \right| < \frac{1}{2} \times 10^{-9}$$

故取

$$x \approx x_5 = 1.368808108$$

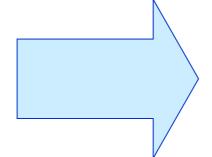
$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

● 迭代函数

$$k = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \implies \varphi'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$$

$$\varphi'(x^*) = 0, \quad \varphi''(x^*) = \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}$$



牛顿法至少二阶局部收敛

$$\lim_{k\to\infty} \frac{x_{k+1} - x^*}{(x_k - x^*)^2} = \frac{\varphi''(x^*)}{2!} = \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}$$

那牛顿法的全局部收敛性呢?

例 证明牛顿迭代法对于重根为线性收敛。

例3. 设x*是方程f(x) = 0的 $m(\geq 2)$ 重根,证明迭代法

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

为线性收敛

证明: 因为x*是方程f(x) = 0的m重根,故

$$f(x) = (x - x^*)^m g(x)$$
 $\exists g(x^*) \neq 0, m \geq 2$

所以
$$f'(x) = m(x-x^*)^{m-1}g(x) + (x-x^*)^m g'(x)$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{(x_k - x^*)^m g(x_k)}{m(x_k - x^*)^{m-1} g(x_k) + (x_k - x^*)^m g'(x_k)}$$
$$= x_k - \frac{(x_k - x^*)g(x_k)}{mg(x_k) + (x_k - x^*)g'(x_k)}$$

$$x_{k+1} - x * = (x_k - x^*)(1 - \frac{g(x_k)}{mg(x_k) + (x_k - x^*)g'(x_k)})$$

$$\lim_{k \to \infty} \frac{x_{k+1} - x^*}{x_k - x^*} = \lim_{k \to \infty} \left(1 - \frac{g(x_k)}{mg(x_k) + (x_k - x^*)g'(x_k)}\right) = 1 - \frac{1}{m}$$

该迭代法对 m(≥2)重根是线性收敛的

第三章 线性方程组的直接方法

Gauss 消去法

例: 直接法解线性方程组
$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 + 2x_3 = -2\\ 2x_1 - 3x_2 - 3x_3 = 4\\ 4x_1 + x_2 + 6x_3 = 3 \end{cases}$$

$$(A,b) = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 2 & -3 & -3 & 4 \\ 4 & 1 & 6 & 3 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 9 & -2 & 11 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 0 & 61 & -61 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{cases} x_3 = -1 \\ x_2 = 8 + 7x_3 = 1 \\ x_1 = -2 + 2x_2 - 2x_3 = 2 \end{cases}$$





Gauss 消去法

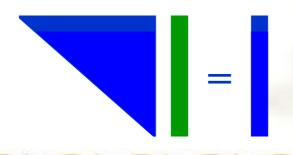
考虑 n 阶线性方程组:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$
矩阵形式

$$Ax = b$$

高斯消去法的主要思路:

将系数矩阵 A 化为上三角矩阵, 然后回代求解。



计算 LU 分解

利用矩阵乘法直接计算 LU 分解

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & u_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$L \times U = A$$

- ①比较等式两边的第一行得: 比较等式两边的第一列得:
- ②比较等式两边的第二行得: 比较等式两边的第二列得:

$$u_{1j} = a_{1j}$$
 ($i = 1, ..., n$) U 的第一行 $l_{i1} = a_{i1}/u_{11}$ $4i = 2, ..., n$ L 的第一列

$$u_{2j} = a_{2j} - l_{21}u_{1j}$$
 ($j = U$ 的第二行 $l_{i2} = (a_{i2} - l_{i1}u_{12})/u_{22}$ (L 的第二列

LU分解算法

例求下列矩阵的LU分解

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

解:设

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \\ 2 & -2 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ & u_{22} & u_{23} \\ & & u_{33} \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow u_{11} = 3, u_{12} = -1, u_{13} = 2$$



向量范数

■常见的向量范数

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

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

③ 无穷范数(最大范数)

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



范数性质

■范数的性质

(1) 等价性

设 $\|\cdot\|_{\mathrm{S}}$ 和 $\|\cdot\|_{\mathrm{t}}$ 是 R^n 上的任意两个范数,则存在常数 c_1 和 c_2 ,使得对任意的xe R^n 有

$$|c_1||x||_s \le ||x||_t \le |c_2||x||_s$$

范数性质

(2) Cauchy-Schwarz 不等式

$$|(x,y)| \le ||x||_2 \times ||y||_2$$

(3) 向量序列的收敛性

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x * \qquad \Longrightarrow \qquad \lim_{k\to\infty} \left\| x^{(k)} - x * \right\| = 0$$

- 矩阵的谱: $\sigma(A) = \{A \text{ 的所有特征值}\}$
- 矩阵的谱半径: $\rho(A) = \max_{\lambda \in \sigma(A)} \{|\lambda|\}$

矩阵范数

■常见的矩阵范数

(1) F-范数 (Frobenious 范数)

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

(2) 算子范数 (从属范数、诱导范数)

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

其中 ||·|| 是 Rⁿ 上的任意一个范数



算子范数

■常见的算子范数

- ① 1-范数 (列范数) $||A||_1 = \max_{1 \le j \le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$
- ② 2-范数(谱范数) $||A||_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$
- ③ 无穷范数(行范数) $||A||_{\infty} = \max_{1 \le i \le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$

例: 设
$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -3 & 4 \end{pmatrix}$$
 计算 $||A||_1, ||A||_2, ||A||_\infty, ||A||_F$

矩阵范数性质

■矩阵范数的性质

(1) 等价性: 设 $\|\cdot\|_s$ 和 $\|\cdot\|_t$ 是 $R^{n\times n}$ 上的任意两个矩阵范数,则存在常数 c_1 和 c_2 ,使得对任意的 $A\in R^{n\times n}$ 有

$$|c_1||A||_s \le ||A||_t \le |c_2||A||_s$$

(2) 若 A 是对称矩阵,则 $\rho(A) = ||A||_2$

算子范数性质

■算子范数的性质

定理:设 $\|\cdot\|$ 是 R^n 上的任一向量范数,其对应的算子范数也记为 $\|\cdot\|$,则有

$$||Ax|| \le ||A|| \times ||x||$$

定理:设 $\|\cdot\|$ 是任一算子范数,则 $\rho(A) \leq \|A\|$

稳定性理论分析

□理论分析:

(1)由于右端项的扰动而引起的解的变化

Ax = b 的条件数 矩阵A 的条件数

矩阵条件数

Cond(
$$A$$
) = $||A|| \cdot ||A^{-1}||$

■条件数与范数有关,常用的有无穷范数和2-范数

$$\mathbf{Cond}(A)_{\infty} = \left\| A^{-1} \right\|_{\infty} \left\| A \right\|_{\infty}$$

Cond
$$(A)_2 = ||A||_2 ||A^{-1}||_2$$

 \bullet Cond(A)₂ 称为谱条件数,当 A 对称时有

Cond(A)₂ =
$$||A||_2 ||A^{-1}||_2 = \frac{\max_{1 \le i \le n} |\lambda_i|}{\min_{1 \le i \le n} |\lambda_i|}$$



举例

例:
$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix}$$
 计算 $Cond(A)_{\infty}$ 和 $Cond(A)_{2}$

解:

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 10001 & -10000 \\ -10000 & 10000 \end{bmatrix}$$

第四章 线性方程组的迭代方法

矩阵分裂迭代法

矩阵分裂迭代法基本思想

A 的一个 矩阵分裂

$$Ax = b$$

$$M$$
非奇异

$$Mx = Nx + b$$

$$x = M^{-1}Nx + M^{-1}b$$

给定一个初始向量 $x^{(0)}$,可得 迭代格式

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$$
 $k = 0, 1, 2, ...$

$$k = 0, 1, 2, ...$$



收敛性分析

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$$

基本收 敛定理

定理:对任意初始向量 $x^{(0)}$,上述迭代格式收敛的充要条件是

$$\rho(B) < 1$$

定理: 若存在算子范数 $\|\cdot\|$,使得 $\|B\|<1$,对任意的初始向量 $\mathcal{X}^{(0)}$,上述迭代格式收敛。

例:考虑迭代法 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 的收敛性,其中

$$B = \begin{bmatrix} 0.9 & 0 \\ 0.3 & 0.8 \end{bmatrix}$$

充分条件

Jacobi 迭代

考虑线性方程组

$$Ax = b$$

其中 $A=(a_{ij})_{n\times n}$ 非奇异,且对角线元素全不为 0。

• 将A分裂成 A = D - L - U, 其中

$$D = diag(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn})$$

$$L = \begin{bmatrix} 0 & & & & \\ -a_{21} & 0 & & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ 0 & \ddots & \vdots \\ & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & 0 \end{bmatrix}$$

Jacobi 迭代

Jacobi 迭代

令 M = D, N = L + U, 可得 雅可比 (Jacobi) 迭代方法

$$x^{(k+1)} = D^{-1}(L+U)x^{(k)} + D^{-1}b \qquad k = 0, 1, 2, ...$$

- 迭代矩阵记为: $J = D^{-1}(L+U)$

• 分量形式:
$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j \right) / a_{ii}$$

$$i = 1, 2, ..., n, k = 0, 1, 2, ...$$

Gauss-Seidel 迭代

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \left(b_1 - a_{12} x_2^{(k)} - a_{13} x_3^{(k)} - \dots - a_{1n} x_n^{(k)}\right) / a_{11} \\ x_2^{(k+1)} = \left(b_2 - a_{21} x_1^{(k)} - a_{23} x_3^{(k)} - \dots - a_{2n} x_n^{(k)}\right) / a_{22} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = \left(b_n - a_{n1} x_1^{(k)} - a_{n2} x_2^{(k)} - \dots - a_{n,n-1} x_{n-1}^{(k)}\right) / a_{nn} \end{cases}$$

ullet 在计算 $oldsymbol{x}_{i}^{(k+1)}$ 时,如果用 $oldsymbol{x}_{1}^{(k+1)},\cdots,oldsymbol{x}_{i-1}^{(k+1)}$ 代替 $oldsymbol{x}_{1}^{(k)},\cdots,oldsymbol{x}_{i-1}^{(k)}$,则可能 会得到更好的收敛效果。

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \left(b_1 - a_{12} x_2^{(k)} - a_{13} x_3^{(k)} - \dots - a_{1n} x_n^{(k)}\right) / a_{11} \\ x_2^{(k+1)} = \left(b_2 - a_{21} x_1^{(k+1)} - a_{23} x_3^{(k)} - \dots - a_{2n} x_n^{(k)}\right) / a_{22} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = \left(b_n - a_{n1} x_1^{(k+1)} - a_{n2} x_2^{(k+1)} - \dots - a_{n,n-1} x_{n-1}^{(k+1)}\right) / a_{nn} \end{cases}$$

Gauss-Seidel 迭代

写成矩阵形式:

$$x^{(k+1)} = D^{-1} \left(b + L x^{(k+1)} + U x^{(k)} \right)$$

可得

$$x^{(k+1)} = (D-L)^{-1} Ux^{(k)} + (D-L)^{-1} b \qquad k = 0, 1, 2, \dots$$

此迭代方法称为 高斯-塞德尔 (Gauss-Seidel) 迭代法

• 迭代矩阵记为: $G = (D-L)^{-1}U$

$$\begin{vmatrix} x^{(k+1)} = (D-L)^{-1} (D-L-A) x^{(k)} + (D-L)^{-1} b \\ = (I-(D-L)^{-1} A) x^{(k)} + (D-L)^{-1} b = x^{(k)} + (D-L)^{-1} (b-Ax^{(k)}) \end{vmatrix}$$



收敛性

收敛性定理

- Jacobi 迭代收敛的充要条件 $\rho(J)<1$
- G-S 迭代收敛的充要条件 $\rho(G)$ <1
- Jacobi 迭代收敛的充分条件 ||J|| <1
- G-S 迭代收敛的充分条件 ||G|| < 1

定理: 若 A 对称,且对角线元素均大于 0,则

- (1) Jacobi 迭代收敛的充要条件是 A 与 2D-A 均正定;
- (2) G-S 迭代收敛的充要条件是 A 正定。

举例

例: 设
$$A = \begin{bmatrix} 1 & a & a \\ a & 1 & a \\ a & a & 1 \end{bmatrix}$$
, 给出 Jacobi 和 G-S 收敛的充要条件

解: A对称,且对角线元素均大于0,故

- (1) Jacobi 收敛的充要条件是 A 和 2D-A 均正定
- (2) G-S 收敛的充要条件是 A 正定

$$D_1 = 1 > 0, D_2 = 1 - a^2 > 0, D_3 = (1 + a)^2 (1 - 2a) > 0$$

$$\langle -0.5 < a < 0.5 \rangle$$



Jacobi 收敛的充要条件是: -0.5 < a < 0.5

G-S 收敛的充要条件是: -0.5 < a < 1



解法二: Jacobi 的迭代矩阵为

$$J = \begin{bmatrix} 0 & -a & -a \\ -a & 0 & -a \\ -a & -a & 0 \end{bmatrix}$$

设 λ 是 J 的特征值,则由 $det(\lambda I - J) = 0$ 可得

$$(\lambda - a)^2(\lambda + 2a) = 0$$



Jacobi 收敛的充要条件是 $\rho(J)$ <1 \Leftrightarrow $|\lambda|$ <1,即 -0.5<a<0.5

极小化方法

设A对称正定,求解的线性方程组为

$$Ax = b \tag{1}$$

其中
$$A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}, x = (x_1, x_2, ..., x_n)^T, b = (b_1, b_2, ..., b_n)^T$$

对应的二次函数 $\varphi: R^{n \times n} \to R$,称为模函数,定义为

$$\varphi(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j - \sum_{i=1}^{n} b_i x_i$$
 (2)

例: 设
$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix}$$
, $b = \begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix}$

$$\varphi(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 6x_2^2 + 4x_1x_2) - (4x_1 + 10x_2)$$



(2) 对一切
$$x, y \in R^n, \alpha \in R$$

$$\varphi(x + \alpha y) = \frac{1}{2}(A(x + \alpha y), x + \alpha y) - (b, x + \alpha y)$$

$$= \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x) + \alpha(Ax, y) - \alpha(b, y) + \frac{\alpha^{2}}{2}(Ay, y)$$

$$= \varphi(x) + \alpha(Ax - b, y) + \frac{\alpha^2}{2}(Ay, y)$$

$$\varphi(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$$

定理1 设 $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 为**实对称正定矩阵**, $b, x \in R^n$, 则 x使二次函数

$$f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$$

取极小值 $\Leftrightarrow x$ 是线性方程组Ax = b 的解。

求二次函数 $\varphi(x)$ 极小值点的一般方法是:

构造一个向量序列 $\{x^{(k)}\}$,使 $\varphi(x^{(k)}) \to \min \varphi(x)$ 可以采取以下方法:

- (1) 任取一个初始向量 $x^{(0)}$,
- (2) 构造迭代格式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, \qquad (k = 0,1,...)$$

其中 $p^{(k)}$ 是搜索方向, α_k 是搜索步长,

(3) 选择 $p^{(k)}$ 和 α_k 使得

$$\varphi(x^{(k+1)}) = \varphi(x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}) < \varphi(x^{(k)})$$

则当 $k \to \infty$ 时,有 $\varphi(x^{(k)}) \to \varphi(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \varphi(x)$

(4) 算出误差限 ε , 直到

$$\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\| < \varepsilon \mathbf{R} \left\|\mathbf{r}^{(k)}\right\| = \left\|\mathbf{b} - \mathbf{A} x^{(k)}\right\| < \varepsilon$$

迭代为止。



最速下降法

最速下降算法:

$$(1)$$
选取 $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$

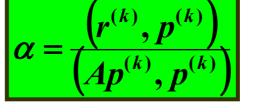
(2)
$$\forall k = 0,1,2,...$$

$$r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$$

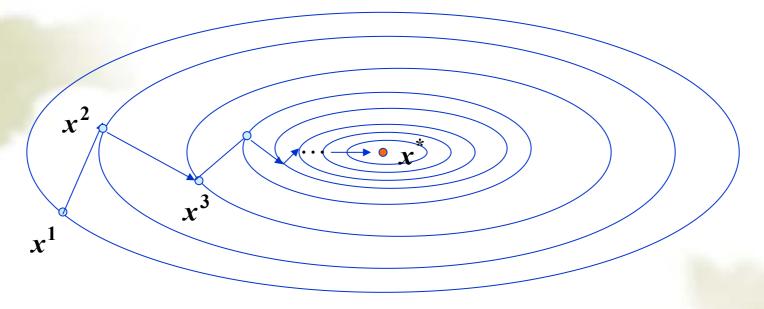
$$\alpha_{k} = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ar^{(k)}, r^{(k)})}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k r^{(k)}$$

$$(3)$$
当 $||x^{(k+1)}-x^{(k)}|| < \varepsilon$ 时,终止迭代。



目标函数为二次函数, 其等值面为椭球面。



注 最速下降方向反映了目 标函数的一种局部性质 。它只是 局部目标函数值下降最 快的方向。 最速下降法是线性收敛 的算法。

不难验证,相邻两次的搜索方向是正交的,即

$$(r^{(k+1)}, r^{(k)}) = 0$$



容易看到, $\{\varphi(x^{(k)})\}$ 是单调下降有界序列,它存在极限,

可以证明
$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x^* = A^{-1}b$$

而且
$$\|x^{(k)} - x^*\|_A \le \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_n}{\lambda_1 + \lambda_n}\right)^k \|x^{(0)} - x^*\|_A$$

其中 λ_1,λ_n 分别是对称正定阵A的最大、最小特征值,

$$\left\|u\right\|_{A}=\left(Au,u\right)^{\frac{1}{2}}$$

当 $\lambda_1 >> \lambda_n$ 时,收敛是很慢的,

当 $\|r^{(k)}\|$ 很小时,因舍入误差的影响,计算将出现不稳定现象。

共轭梯度法

定义 A对称正定,若 R^n 中向量组 $\left\{p^{(0)},...,p^{(l)}\right\}$ 满足 $(Ap^{(i)},p^{(j)})=0, \qquad i\neq j$

则称它为 R^n 中的一个A-共轭向量组,或称A-正交向量组。

注:

- 1、当*l* < *n*时,不含零向量的*A* 共轭向量组线性无关;
- 2、当A = I时,A 共轭性质就是一般的正交性;
- 3、给了一组线性无关的向量,可以按Schmidt正交化的方法得到对应的A-共轭向量组。



原始的 CG算法:

$$(1)x^{(0)} \in R^{(n)}$$

$$(2)r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, p^{(0)} = r^{(0)}$$

$$(3)k = 0,1,...,$$

$$\alpha_{k} = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})},$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_{k} p^{(k)},$$

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_{k} A p^{(k)},$$

$$\beta_{k} = -\frac{(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})},$$

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_{k} p^{(k)},$$

改进的CG算法:

$$(1)x^{(0)} \in R^{(n)}$$

$$(2)r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, p^{(0)} = r^{(0)}$$

$$(3)k = 0,1,...,$$

$$\alpha_{k} = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})},$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_{k} p^{(k)},$$

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_{k} A p^{(k)},$$

$$\beta_k = \frac{(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{(r^{(k)}, r^{(k)})},$$

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)},$$

注:

- (1) 剩余向量相互正交,而 R^n 中至多有n个相互正交的非零向量,所以 $r^{(0)}, r^{(1)}, ..., r^{(n)}$ 中至少有一个向量为零。若 $r^{(k)} = 0$,则 $x^{(k)} = x*$.
- (2)实际计算中,由于舍入误差的影响,n步内得不到准确解,故还需继续迭代。一般因 $p^{(0)}, p^{(1)}, ..., p^{(n-1)}$ 是一组A-共轭向量组,继续迭代时,要取 $x^{(0)} = x^{(n)}$.

$$\|x^{(k)} - x^*\|_A \le 2 \left[\frac{\sqrt{cond(A)_2} - 1}{\sqrt{cond(A)_2} + 1} \right]^k \|x^{(0)} - x^*\|_A$$

当A的条件数很小时,共轭斜量法收敛很快,但当A 是病态严重的矩阵时,共轭斜量法收敛速度很慢。 可采用预处理技术,降低A的条件数。

非线性方程组的牛顿法

$$\min F(x,y) \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial f(x,y)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial f(x,y)}{\partial y} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} f_1(x,y) = 0 \\ f_2(x,y) = 0 \end{cases}$$

在点 (x_0,y_0) 作二元Taylor展开,

$$\begin{cases} f_1(x,y) = f_1(x_0,y_0) + \frac{\partial f_1(x_0,y_0)}{\partial x}(x-x_0) + \frac{\partial f_1(x_0,y_0)}{\partial y}(y-y_0) \approx 0 \\ f_2(x,y) = f_2(x_0,y_0) + \frac{\partial f_2(x_0,y_0)}{\partial x}(x-x_0) + \frac{\partial f_2(x_0,y_0)}{\partial y}(y-y_0) \approx 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial f_1(x_0,y_0)}{\partial x}(x-x_0) + \frac{\partial f_1(x_0,y_0)}{\partial y}(y-y_0) \approx -f_1(x_0,y_0) \\ \frac{\partial f_2(x_0,y_0)}{\partial x}(x-x_0) + \frac{\partial f_2(x_0,y_0)}{\partial y}(y-y_0) \approx -f_2(x_0,y_0) \end{cases}$$

若

$$J(X_0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix} \Big|_{\substack{x=x_0 \\ y=y_0}} |J(X_0)| = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial y=y_0} \end{pmatrix} \neq 0$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = x - x_0, \Delta y = y - y_0,
X = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, X_0 = \begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix}, \Delta X = \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} -f_1(x_0, y_0) \\ -f_2(x_0, y_0) \end{bmatrix}$$

则求解非线性方程组的牛顿迭代格式

$$J(X) \cdot \Delta X = B$$
 $\Delta X = J^{-1}(X) \cdot B$

例 解非线性方程组

$$\begin{cases} f_1(x,y) = 4 - x^2 - y^2 = 0 \\ f_2(x,y) = 1 - e^x - y = 0 \end{cases}$$
 initial values
$$\begin{cases} x_0 = 1 \\ y_0 = -1.7 \end{cases}$$

解 Jacobi矩阵:

$$J(x,y) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2x & -2y \\ -e^x & -1 \end{pmatrix}$$

$$J(x_0, y_0) = \begin{pmatrix} -2x & -2y \\ -e^x & -1 \end{pmatrix}_{(x_0, y_0)} = \begin{pmatrix} -2 & -3.4 \\ -2.71828 & -1 \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.11 \\ -0.01828 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} -2\Delta x + 3.4\Delta y = -0.11 \\ -2.71828\Delta x - \Delta y = -0.01828 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \Delta x = 0.004256 \\ \Delta y = -0.029846 \end{cases}$$

$$\int_{1}^{1} x_{1} = x_{0} + \Delta x = 1 + 0.004256 = 1.004256$$

$$\int_{1}^{1} y_{1} = y_{0} + \Delta y = -1.7 - 0.029846 = -1.729849$$

继续做下去,直到 $\max(|\Delta x|, |\Delta y|) < 10^{-6}$ 时停止。



第五章 特征值求解

§1 幂法和反幂法

1.1 幂法

用于求矩阵的按模最大的特征值与相应的特征向量的近似值。

设A为n阶实矩阵,

 λ_i, u_i ($i = 1, 2, \dots, n$)为A的特征值和相应的特征 向量,

且满足:
$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge |\lambda_3| \ge \cdots \ge |\lambda_n|$$

 u_1, u_2, \cdots, u_n ,线性无关.



对任意向量 $x^{(0)}$, 有 $x^{(0)} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i u_i$, α_i 不全为零.

$$x^{(k+1)} = Ax^{(k)} = A^{k+1}x^{(0)}$$

$$=\sum_{i=1}^n A^{k+1}\alpha_i u_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^{k+1} u_i$$

$$= \lambda_1^{k+1} \left[\alpha_1 u_1 + (\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^{k+1} a_2 u_2 + \dots + (\frac{\lambda_n}{\lambda_1})^{k+1} a_n u_n \right]$$

$$\approx \lambda_1^{k+1} \alpha_1 u_1$$



定理: 设 $A \in R^{n \times n}$,特征值 $\lambda_i (i = 1, 2, \dots n)$ 满足 $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|$,

且与 λ_i 对应的特征向量 $u_1, u_2, \cdots u_n$ 线性无关,

则对任意非零初始向量 $x^{(0)}(\alpha_1 \neq 0)$,向量序列

$$x^{(k)} = A^k x^{(0)} \to \lambda_1^{\ k} \alpha_1 u_1, \qquad \frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}} \to \lambda_1(k \to \infty).$$

相应的特征向量为 $x^{(k+1)}$.

注: $x^{(k+1)} \approx \lambda_1^{k+1} \alpha_1 u_1$, 实际计算时将 $x^{(k+1)}$ 标准化。

幂法的收敛速度取决于 比值 $\frac{\lambda_2}{\lambda_1}$,比值越小,收敛越快.

1.2 幂法的加速

(一) 原点移位法

 λ_i 是A的特征值,则 $\lambda_i - \lambda_0$ 是A - λ_0 I的特征值

$$x^{(k+1)} = (A - \lambda_0 I) x^{(k)}$$

$$= (\lambda_1 - \lambda_0)^{k+1} [\alpha_1 \mathbf{u}_1 + (\frac{\lambda_2 - \lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0})^{k+1} \alpha_2 \mathbf{u}_2 + \cdots (\frac{\lambda_n - \lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0})^{k+1} \alpha_n \mathbf{u}_n]$$



(二)幂法的埃特肯(Aitken)加速

若
$$\{a_k\}$$
收敛与 a , 且 $\lim_{k\to\infty} \frac{a_{k+1}-a}{a_k-a} = c \neq 0$ 即 $\{a_k\}$ 线性收敛,当 k 充分大时,有

$$\frac{a_{k+1}-a}{a_k-a}\approx \frac{a_{k+2}-a}{a_{k+1}-a}$$

$$y_{n+2} = x_{n+2} - \frac{(x_{n+2} - x_{n+1})^2}{x_{n+2} - 2x_{n+1} + x_n}$$

$$\Rightarrow a \approx a_k - \frac{(a_{k+1} - a_k)^2}{a_{k+2} - 2a_{k+1} + a_k} := \hat{a}_k$$

用 \hat{a}_k 逼近a,这种方法称为Aitken加速法.

。3. 对称矩阵的Rayleigh商加速法

❖定义设A对称,x ≠ 0,则称

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

❖为x关于A的Rayleigh商

$$\begin{cases} y^{(k)} = \frac{x^{(k)}}{\max(x^{(k)})} = \frac{A^k x^{(0)}}{\max(A^k x^{(0)})} \\ x^{(k+1)} = Ay^{(k)} = \frac{A^{k+1} x^{(0)}}{\max(A^k x^{(0)})} \\ R(y^{(k)}) = \frac{(y^{(k)})^T Ay^{(k)}}{(y^{(k)})^T (y^{(k)})} = \frac{(A^k x^{(0)})^T A^{k+1} x^{(0)}}{(A^k x^{(0)})^T A^k x^{(0)}} \end{cases}$$

$$R(y^{(k)}) = \frac{(A^k x^{(0)})^T A^{k+1} x^{(0)}}{(A^k x^{(0)})^T A^k x^{(0)}} = \frac{\sum_{j=1}^n \alpha_j^2 \lambda_j^{2k+1}}{\sum_{j=1}^n \alpha_j^2 \lambda_j^{2k}} \approx \lambda_1 + O\left(\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{2k}\right)$$

反幂法

基本思想: $Ax = \lambda x \Rightarrow x = A^{-1}(\lambda x)$, 则 $A^{-1}x = \frac{1}{\lambda}x$

 $(1)A与A^{-1}$ 的特征值互为倒数,特征向量不变,求A的按模最小的特征值 λ_n

 \Leftrightarrow 求 A^{-1} 的按模最大的特征值 $\frac{1}{\lambda_n}$.

(2)计算 $x^{(k+1)} = A^{-1}y^{(k)} \Leftrightarrow 解方程组 Ax^{(k+1)} = y^{(k)}$



例:用反幂法求矩阵
$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

求按模最小的特征值及 特征向量, $取x^{(0)} = (0,0,1)^T$;

解:求A按模最小的特征值及其 特征向量

用反幂法

$$x^{(k+1)} = A^{-1}y^{(k)} \Leftrightarrow Ax^{(k+1)} = y^{(k)}$$

将A进行LU分解,

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{3}{2} \end{bmatrix} = LU$$

$$y^{(0)} = x^{(0)} = (0,0,1)^{7}$$

$$y^{(0)} = x^{(0)} = (0,0,1)^{T}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{3}{2} \end{bmatrix}$$

$$x^{(1)} = A^{-1}y^{(0)} \Leftrightarrow LUx^{(1)} = y^{(0)}$$

$$U = \begin{vmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{3}{2} \end{vmatrix}$$

$$Lz = y^{(0)}$$
 $z = (0,0,1)^T$

$$Ux^{(1)} = z$$
 $x^{(1)} = (\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{2}{3})^T$ $\mu = \frac{2}{3}$

$$\mu = \frac{2}{3}$$

$$\lambda^{(1)} = \frac{1}{\mu} = 1.5$$
 $y^{(1)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 1)^T$

$$y^{(1)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 1)^T$$

$$Lz = y^{(1)}$$
 $z = (\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{5}{4})^T$

$$Ux^{(2)} = z$$
 $x^{(2)} = (\frac{11}{24}, \frac{2}{3}, \frac{5}{6})^T$ $\mu = \frac{5}{6}$

$$\lambda^{(2)} = \frac{1}{\mu} = 1.2$$
 $y^{(2)} = (\frac{11}{20}, \frac{4}{5}, 1)^T$

第六章插值

插值区间

已知函数 y = f(x) 在 [a, b] 上有定义,且已经测得在点

$$a \le x_0 < x_1 < \dots < x_n \le b$$

处的函数值为 $y_0 = f(x_0)$, ..., $y_n = f(x_n)$

插值节点

如果存在一个简单易算的函数 P(x),使得

$$P(x_i) = f(x_i), i = 1, 2, ..., n$$

则称 P(x) 为 f(x) 的插值函数

插值节点无需递增排列,但必须确保互不相同!

插值条件

求插值函数 P(x) 的方法就称为插值法

基函数法

n+1 维线性空间

记 $Z_n(x) = \{ 次数不超过 n 的多项式的全体 \}$

设 $z_0(x), z_1(x), \dots, z_n(x)$ 构成 $\mathbf{Z}_n(x)$ 的一组基,则插值多项式

$$P(x) = a_0 z_0(x) + a_1 z_1(x) + \cdots + a_n z_n(x)$$

通过基函数来构造插值多项式的方法就称为基函数插值法

基函数法基本步骤

- ① 寻找合适的基函数
- ② 确定插值多项式在这组基下的表示系数

Lagrange插值

Lagrange插值基函数

设 $l_k(x)$ 是 n 次多项式,在插值节点 x_0, x_1, \ldots, x_n 上满足

$$l_k(x_j) = \begin{cases} 1, & j = k \\ 0, & j \neq k \end{cases}$$

则称 $l_k(x)$ 为节点 x_0, x_1, \ldots, x_n 上的拉格朗日插值基函数

线性与抛物线插值

两种特殊情形

$$n=1$$

线性插值多项式(一次插值多项式)

$$n=2$$

$$L_2(x) = y_0 \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + y_1 \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + y_2 \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

抛物线插值多项式 (二次插值多项式)

例:已知函数 $y = \ln x$ 的函数值如下

X	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
lnx	-0.9163	-0.6931	-0.5108	-0.3567	-0.2231

试分别用线性插值和抛物线插值计算 ln 0.54 的近似值

解: 为了减小截断误差,通常选取插值点 x 邻接的插值节点

线性插值: 取 $x_0=0.5, x_1=0.6$ 得

$$L_1(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = 0.1823x - 1.6046$$

将 x=0.54 代入可得: $\ln 0.54 \approx L_1(0.54) = -0.6202$

抛物线插值: 取 $x_0=0.4$, $x_1=0.5$, $x_2=0.6$, 可得

 $\ln 0.54 \approx L_2(0.54) = -0.6153$

□ ln 0.54 的精确值为: -0.616186··· 可见, 抛物线插值的精度比线性插值要高

Lagrange插值多项式简单方便,只要取定节点就可 写出基函数,进而得到插值多项式,易于计算机实现。

Lagrange插值

$l_k(x)$ 的表达式

由构造法可得

$$l_{k}(x) = \frac{(x - x_{0}) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_{n})}{(x_{k} - x_{0}) \cdots (x_{k} - x_{k-1})(x_{k} - x_{k+1}) \cdots (x_{k} - x_{n})}$$

$$= \prod_{j=1, j \neq k}^{n} \frac{x - x_{j}}{x_{k} - x_{j}}$$

性质 $l_0(x), l_1(x), \ldots, l_n(x)$ 构成 $Z_n(x)$ 的一组基

注意 $l_0(x), l_1(x), \ldots, l_n(x)$ 与插值节点有关, 但与函数 f(x) 无关

误差估计

如何估计误差

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x)$$

定理

插值余项

设 $f(x) \in C^n[a, b]$ (n 阶连续可微),且 $f^{(n+1)}(x)$ 在 (a, b) 内存在,则对 $\forall x \in [a, b]$,有

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

其中 $\xi_x \in (a, b)$ 且与 x 有关, $\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$



插值余项

几点说明

- 余项公式只有当 f(x) 的高阶导数存在时才能使用
- ξ_x 与x有关,通常无法确定,实际使用中通常是估计其上界

如果
$$|f^{(n+1)}(x)| \le M_{n+1}$$
 , 则 $R_n(x) \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n |x-x_i|$

● 计算插值点 x 上的近似值时, 应选取与 x 相近插值节点



插值误差举例

例:已知函数 $y = \ln x$ 的函数值如下

X	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
lnx	-0.9163	-0.6931	-0.5108	-0.3567	-0.2231

试估计线性插值和抛物线插值计算 ln 0.54 的误差

解

$$R_1(x) = \frac{f^{(2)}(\xi)}{2}(x - x_0)(x - x_1)$$

$$x_0=0.5, x_1=0.6, \xi \in (0.5, 0.6)$$
 $|f^{(2)}(\xi)| \le |-\xi^{-2}| \le 4$

$$|R_1(0.54)| \le |2(0.54 - 0.5)(0.54 - 0.6)| = 0.0048$$

Newton 插值

为什么 Newton 插值

Lagrange 插值简单易用,但若要增加一个节点时,全部基函数 $l_k(x)$ 都需重新计算,不太方便。

解决办法

设计一个可以逐次生成插值多项式的算法,即 n 次插值多项式可以通过 n-1 次插值多项式生成 —— Newton 插值法



什么是差商

设函数 f(x), 节点 x_0, \ldots, x_n

$$f[x_{i}, x_{j}, x_{k}] = \frac{f[x_{j}, x_{k}] - f[x_{i}, x_{j}]}{x_{k} - x_{i}}$$

 $\longrightarrow f(x)$ 关于点 x_i, x_j, x_k 的 二阶差商

差商的一般定义

$$f[x_0, x_1, ..., x_k] = \frac{f[x_1, ..., x_k] - f[x_0, ..., x_{k-1}]}{x_k - x_0} \longrightarrow k \text{ M } \not\equiv \vec{n}$$

差商的性质

● k 阶差商与 k 阶导数之间的关系: 若 f(x) 在 [a,b] 上具有 k 阶导数,则至少存在一点 $\xi \in (a,b)$,使得

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$$

差商举例

例:已知y = f(x)的函数值表,试计算其各阶差商

i	0	1	2	3
x_i	-2	-1	1	2
$f(x_i)$	5	3	17	21

解: 差商表如下

x_i	$f(x_i)$	一阶差 商	二阶差 商	三阶差商
-2	5			4
-1	3	-2		
1	17	7	3	200
2	21	4	-1	-1

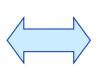
Newton / Lagrange

Newton 插值多项式与 Lagrange 插值多项式

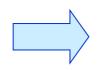
f(x) 在 x_0, x_1, \ldots, x_n 上的 n 次插值多项式是唯一的!

$$N_n(x) \equiv L_n(x)$$

余项也相同



$$f[x, x_0, \dots, x_n] \prod_{i=0}^n (x - x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$



$$f[x,x_0,...,x_n] = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}$$
将 x 看作节点
$$f[x_0,...,x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$$

$$f[x_0, ..., x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$$



插值节点无需递增排列,但必须确保互不相同!

例: 已知函数 $y = \ln x$ 的函数值如下

X	0.4	0.5	9.6	0.7	0.8
lnx	-0.9163	-0.6931	-0.5108	-0.3567	-0.2231

试分别用牛顿线性插值和抛物线插值计算 ln 0.54 的近似值

解: 取节点 0.5, 0.6, 0.4 作差商表

$$N_1(x) = -0.6931 + 1.8230(x-0.5)$$

$$N_1(0.54) = -0.6202$$

$$N_2(x) = -0.6931 + 1.8230(x-0.5) -$$

$$N_2(0.54) = -0.6153$$

x_i	$f(x_i)$	一阶差 商	二阶差商
0.5	-0.6931		
0.6	-0.5108	1.8230	
0.4	-0.9163	2.0275	-2.0450
.0450	(x-0.5)	(x-0.6)	

分段线性插值

插值节点满足: $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$ 已知 $y_j = f(x_j)$ $(j = 0,1,2,\cdots,n)$

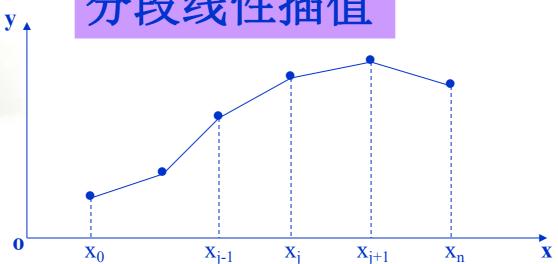
 $x \in [x_j, x_{j+1}]$ 时,线性插值函数

$$L_h(x) = \frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j} y_j + \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j} y_{j+1}$$

$$(j=0,1,\dots,n-1)$$



分段线性插值



$$L_n(x) = \sum_{j=0}^n y_j l_j(x)$$

$$\lim_{n\to\infty} L_n(x) = g(x), x_0 \le x \le x_n$$



定义 5.4 给定区间[a,b]上的一个分划:

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$$

已知 $f(x_j) = y_j$ $(j = 0,1,\dots,n)$, 如果

$$S(x) = \begin{cases} S_1(x), x \in [x_0, x_1] \\ S_2(x), x \in [x_1, x_2] \\ \dots \\ S_n(x), x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases}$$

满足: (1) S(x)在 $[x_j, x_{j+1}]$ 上为三次多项式;

- (2) S"(x)在区间[a, b]上连续;
- (3) $S(x_j) = y_j \ (j = 0,1,\dots,n).$

则称 S(x)为三次样条插值函数.

(1)自然边界条件:
$$S''(x_0)=0$$
, $S''(x_n)=0$

(2)周期边界条件:
$$S'(x_0)=S'(x_n)$$
, $S''(x_0)=S''(x_n)$

(3)固定边界条件:
$$S'(x_0)=f'(x_0)$$
, $S'(x_n)=f'(x_n)$

例2 5.7 已知f(-1) = 1, f(0) = 0, f(1) = 1.求[-1, 1]上的三次自然样条(满足自然边界条件).

解设
$$S(x) = \begin{cases} a_1 x^3 + b_1 x^2 + c_1 x + d_1, & x \in [-1, 0] \\ a_2 x^3 + b_2 x^2 + c_2 x + d_2, & x \in [0, 1] \end{cases}$$
则有:
$$-a_1 + b_1 - c_1 + d_1 = 1, \qquad d_1 = d_2,$$

$$d_1 = 0, \qquad c_1 = c_2,$$

$$a_2 + b_2 + c_2 + d_2 = 1 \qquad b_1 = b_2$$

由自然边界条件:

$$-6a_1+2b_1=0, 6a_2+2b_2=0$$

解方程组,得

$$a_1 = -a_2 = 1/2,$$
 $b_1 = b_2 = 3/2,$ $c_1 = c_2 = d_1 = d_2 = 0.$

问题的解

$$S(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}x^3 + \frac{3}{2}x^2, & x \in [-1, 0] \\ -\frac{1}{2}x^3 + \frac{3}{2}x^2, & x \in [0, 1] \end{cases}$$

三次Hermite插值

$$H(x) = y_0 \alpha_0(x) + y_1 \alpha_1(x) + m_0 \beta_0(x) + m_1 \beta_1(x)$$

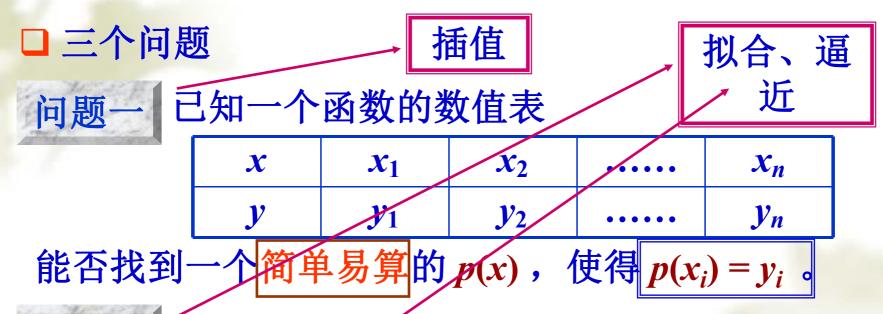
$$\alpha_0(x) = (1 + 2\frac{x - x_0}{x_1 - x_0})(\frac{x_1 - x}{x_1 - x_0})^2 \quad \beta_0(x) = (x - x_0)(\frac{x_1 - x}{x_1 - x_0})^2$$

$$\alpha_1(x) = (1 + 2\frac{x_1 - x}{x_1 - x_0})(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0})^2 \beta_1(x) = (x - x_1)(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0})^2$$

X	x_0	\boldsymbol{x}_1
$\alpha_0(x)$	1	0
$\alpha'_0(x)$	0	0
$\alpha_1(x)$	0	1
$\alpha'_1(x)$	0	0

X	x_0	x_1
$\beta_0(x)$	0	0
$\beta_0'(x)$	1	0
$\beta_1(x)$	0	0
$\beta_1'(x)$	0	1

第七章拟合、函数逼近



问题二 函数 f(x) 的表达式非常复杂,能否找到一个简单易算的 p(x) 使得p(x) 是 f(x) 的一个合理的逼近。

问题三 问题一的表中的数值带有误差,能否找到一个简单易算的 p(x) ,可以近似地表示这些数据。

曲线拟合

已知f(x) 在某些点的函数值:

X	x_0	x_1	• • •	x_m
f(x)	y ₀	y_1	•••	y_m

能否找到一个简单易算的p(x), 使得 $f(x) \approx p(x)$

但是 (1) m 通常很大

(2) y_i 本身是测量值,不准确,即 $y_i \neq f(x_i)$

这时不要求 $p(x_i) = y_i$,而只要

 $p(x_i) - y_i$ 总体上尽可能小



最小二乘

曲线拟合的最小二乘问题

已知函数值表 (x_i, y_i) , 在函数空间 Φ 中求 $S^*(x)$, 使得

$$\sum_{i=0}^{m} \omega_{i} [S^{*}(x_{i}) - y_{i}]^{2} = \min_{s(x) \in \Phi} \sum_{i=0}^{m} \omega_{i} [S(x_{i}) - y_{i}]^{2}$$

其中 ω_i 是点 x_i 处的权。

● 这个问题实质上是最佳平方逼近问题的离散形式。 可以将求连续函数的最佳平方逼近函数的方法直接用 于求解该问题。

最小二乘求解

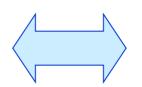
对任意
$$S(x) \in \Phi = \operatorname{span}\{\varphi_0, \varphi_1, ..., \varphi_n\}$$
,可设
$$S(x) = a_0 \varphi_0 + a_1 \varphi_1 + \cdots + a_n \varphi_n(x)$$

则求 S*(x) 等价于求下面的多元函数的最小值点

$$I(a_0, a_1, ..., a_n) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left[S(x_i) - y_i \right]^2$$

$$= \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left[\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) - y_i \right]^2$$

最小值点

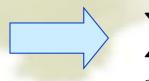


$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 0$$

$$k = 0, 1, ..., n$$

$$k = 0, 1, ..., n$$

最小二乘求解

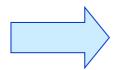


$$\sum_{j=0}^{n} (\varphi_j, \varphi_k) a_k = (f, \varphi_k)$$

$$(k = 0, 1, \dots, n)$$

这里的内积是离散带权内积,即

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=0}^m \omega_i \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i) , \quad (f, \varphi_k) = \sum_{i=0}^m \omega_i f(x_i) \varphi_k(x_i)$$



法方程

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_n) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

法方程

$$d_k = (\varphi_k, f)$$



最小二乘求解

设法方程的解为: $a_0^*, a_1^*, ..., a_n^*, 则$

$$S^*(x) = a_0^* \varphi_0 + a_1^* \varphi_1 + \cdots + a_n^* \varphi_n(x)$$

结论 $S^*(x)$ 是 f(x) 在 Φ 中的 最小二乘解

举例

例: 求下面数据表的二次最小二乘拟合多项式

x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
$f(x_i)$	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

设二次拟合多项式为
$$p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

得法方程

$$\begin{bmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3828 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.7680 \\ 5.4514 \\ 4.4015 \end{bmatrix}$$

解得
$$a_0 = 1.0052, a_1 = 0.8641, a_2 = 0.8437$$

所以此组数据的二次最小二乘拟合多项式为

$$p_2(x) = 1.0052 + 0.8641x + 0.8437x^2$$

函数逼近

最佳逼近 $_{i}$ H_{n} 为所有次数不超过 $_{i}$ n 的多项式组成的集合,给定函

数 $f(x) \in C[a, b]$, 若 $P^*(x) \in H_n$ 使得

$$||f(x)-P*(x)|| = \min_{P\in H_n} ||f(x)-P(x)||$$

则称 $P^*(x)$ 为 f(x) 在 C[a,b] 上的 最佳逼近多项式



函数逼近

最佳平方逼近

$$||f(x)-P*(x)||_{2}=\min_{P\in H_{n}}||f(x)-P(x)||_{2}$$

最小二乘拟合

给定 $f(x) \in C[a, b]$ 的数据表

x	x_0	x_1	•••	x_n
y	y ₀	<i>y</i> ₁	• • •	y_n

寻找 $P^*(x)$, 使得下面的离散 2-范数最小

$$\sum_{i=1}^n \left| f(x_i) - P(x_i) \right|^2$$



正交多项式

定义 设 $\varphi_n(x)$ 是首项系数不为 0 的 n 次多项式,若

$$(\varphi_{j},\varphi_{k}) = \int_{a}^{b} \rho(x)\varphi_{j}(x)\varphi_{k}(x)dx = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ A_{k} \neq 0, & j = k \end{cases}$$
则称
$$\{\varphi_{n}\}_{n=0}^{\infty} \ \text{为 } [a,b] \perp 带权 \rho(x) \text{ 正交}$$

 $\pi \varphi_n(x)$ 为 n 次正交多项式

Chebyshev 多项式

Chebyshev 多项式

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

在 [-1,1] 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式称为切比雪夫多项式

● 切比雪夫多项式的表达式

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x)$$

 $x \in [-1, 1], n = 0, 1, 2, ...$

$$T_n(x) = \cos^n \theta - C_n^2 \cos^{n-2} \theta \sin^2 \theta + C_n^4 \cos^{n-4} \theta \sin^4 \theta + \cdots$$
$$= x^n - C_n^2 x^{n-2} (1 - x^2) + C_n^4 x^{n-4} (1 - x^2)^2 + \cdots$$



Chebyshev 零点插值多项式

Chebyshev 插值

以 Chebyshev 多项式的零点作为插值节点进行插值

好处:误差最小

$$x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi\right)$$

定理 设
$$f(x) \in C^{n+1}[-1,1]$$
,插值节点 x_0, x_1, \ldots, x_n 为

$$T_{n+1}(x)$$
 的 $n+1$ 个零点,则

$$||f(x)-L_n(x)||_{\infty} = \min_{p\in H_n(x)} ||f(x)-p(x)||_{\infty}$$

Legendre 多项式

Legendre 多项式

在 [-1,1] 上带权 $\rho(x)=1$ 的正交多项式称为 **勒**让德多项式

记号: P₀, P₁, P₂, ...

$$P_0(x) = 1, P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n$$
 $x \in [-1, 1], n = 1, 2, ...$

$$x \in [-1, 1], n = 1, 2, ...$$

Legendre多项式

$$P_0(x) = 1$$
 $(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)x P_n(x) - nP_{n-1}(x)$
 $P_1(x) = x$ $\sharp + P_0(x) = 1, P_1(x) = x,$

$$P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$$

$$P_3(x) = (5x^3 - 3x)/2$$

$$P_4(x) = (35x^4 - 30x^2 + 3)/8$$

$$P_5(x) = (63x^5 - 70x^3 + 15x)/8$$

•

最佳平方逼近

 $\Phi = \operatorname{span}\left\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\right\}$

 $\bar{x} S^*(x) \in \Phi$, 使得

$$||f(x) - S*(x)||_{2}^{2} = \min_{s \in \Phi} ||f(x) - S(x)||_{2}^{2}$$

 $S^*(x)$ 称为 f(x) 在 Φ 中的 最佳平方逼近函数

其中

$$||f(x) - S(x)||_{2}^{2} = (f - S, f - S)$$

$$= \int_{a}^{b} \rho(x) (f(x) - S(x))^{2} dx$$



最佳平方逼近

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 2 \int_a^b \rho(x) \left(f(x) - \sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x) \right) \varphi_k(x) dx = 0$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_j \int_a^b \rho(x) \varphi_j(x) \varphi_k(x) dx = \int_a^b \rho(x) f(x) \varphi_k(x) dx$$

$$\sum_{j=0}^{n} a_j(\varphi_k, \varphi_j) = (\varphi_k, f)$$

$$k = 0, 1, ..., n$$

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_n) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{k} \hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$







举例

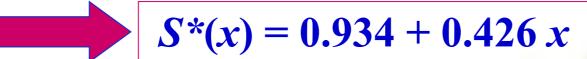
例: 求
$$f(x) = \sqrt{1+x^2}$$
 在 [0,1]上的一次最佳平方逼近多项式

$$d_0 = (\varphi_0, f) = (1, f) = \int_0^1 \sqrt{1 + x^2} \, dx \approx 1.147$$

$$d_1 = (\varphi_1, f) = (x, f) = \int_0^1 x \sqrt{1 + x^2} \, dx \approx 0.609$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_0 = 0.934, \ a_1 = 0.426 \end{bmatrix}$$



$$\|\delta(x)\|_{2}^{2} = \|f(x)\|_{2}^{2} - \sum_{j=0}^{n} a_{j}^{*}(\varphi_{j}, f) = 0.0026$$
$$\|\delta(x)\|_{\infty} \approx 0.066$$



第8章 数值积分



$$I(f) = \int_a^b f(x) \, \mathrm{d}x$$

- 微积分基本公式: $\int_a^b f(x) dx = F(b) F(a)$
- 但是在许多实际计算问题中
 - (1) F(x) 表达式较复杂时,计算较困难。如 $f(x) = \frac{1}{1+x^6}$
 - (2) F(x) 难求! 甚至有时不能用初等函数表示。 如 $f(x) = \frac{1}{1} \sin x$, e^{-x^2}
 - (3) f(x) 表达式未知,只有通过测量或实验得来的数据表





数值积分公式的一般形式

一般地,用 f(x) 在 [a,b] 上的一些离散点

$$a \le x_0 < x_1 < \dots < x_n \le b$$

上的函数值的加权平均作为 $f(\xi)$ 的近似值,可得

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_{i} f(x_{i})$$
 机械求积方法 求积系数 求积节点

- 将定积分计算转化成被积函数的函数值的计算
- 无需求原函数
- 易于计算机实现



定义:如果对于所有次数不超过m的多项式f(x),公式

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

精确成立,但对某个次数为m+1的多项式不精确成立,则称该求积公式具有m次代数精度

代数精度的验证方法

- 将 $f(x) = 1, x, x^2, ..., x^m$ 依次代入, 公式精确成立;
- 但对 $f(x) = x^{m+1}$ 不精确成立。即:

$$\sum_{i=0}^{n} A_i x_i^k = \int_a^b x^k \, dx = \frac{b^{k+1} - a^{k+1}}{k+1} \qquad \sum_{i=0}^{n} A_i x_i^{m+1} \neq \int_a^b x^{m+1} \, dx = \frac{b^{m+2} - a^{m+2}}{m+2}$$

$$(k = 0, 1, ..., m)$$

例: 试确定系数 A_i ,使得下面的求积公式具有尽可能高的代数精度,并求出此求积公式的代数精度。

$$\int_{-1}^{1} f(x) dx \approx A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1)$$

解: 将 $f(x)=1, x, x^2$ 代入求积公式, 使其精确成立, 可得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = (b^1 - a^1) / 1 = 2 \\ -A_0 + A_2 = (b^2 - a^2) / 2 = 0 \\ A_0 + A_2 = (b^3 - a^3) / 3 = 2 / 3 \end{cases}$$

解得 $A_0=1/3$, $A_1=4/3$, $A_2=1/3$ 。 所以求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x) dx \approx [f(-1) + 4f(0) + f(1)]/3$$

易验证该公式对 $f(x)=x^3$ 也精确成立,但对 $f(x)=x^4$ 不精确成立,所以此求积公式具有 3 次代数精度。



设求积节点为: $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$

若 $f(x_i)$ 已知,则可做n次多项式插值: $L_n(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x) f(x_i)$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b L_n(x) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b l_i(x) dx \equiv \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$$

其中
$$A_i = \int_a^b l_i(x) dx$$
 $\sum_{k=0}^n A_k = b - a$

插值型求积公式

误差:
$$R[f] = \int_a^b (f(x) - L_n(x)) dx = \int_a^b R_n(x) dx$$

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

Newton-Cotes 求积公式

基于等分点的插值型求积公式

● 积分区间: [a, b]

• 求积节点: $x_i = a + i \times h$

$$h = \frac{b-a}{n}$$

● 求积公式:

$$\int_a^b f(x) \, \mathrm{d}x \approx (b-a) \sum_{i=0}^n C_i^{(n)} f(x_i)$$

$$n = 1$$
: $C_0^{(1)} = \frac{1}{2}$, $C_1^{(1)} = \frac{1}{2}$
$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] \triangleq T$$

梯形公式 代数精度 = 1

$$n = 2$$
: $C_0^{(2)} = \frac{1}{6}$, $C_1^{(2)} = \frac{2}{3}$, $C_2^{(2)} = \frac{1}{6}$

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

抛物线公式 Simpson公式

代数精度=3

● 梯形公式 (n=1) 的余项

$$R[f] = -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\eta)$$
 $\eta \in (a,b)$

● Simpson公式 (n=2) 的余项

$$R[f] = -\frac{1}{180} \left(\frac{b-a}{2} \right)^4 f^{(4)}(\eta) \qquad \qquad \eta \in (a,b)$$

- □提高积分计算精度的常用两种方法
 - 用 复合公式
 - 用 非等距节点

复合求积公式

- 将积分区间分割成多个小区间
- 在每个小区间上使用低次牛顿一科特斯求积公式

• 将 [a, b] 分成 n 等分 $[x_i, x_{i+1}]$,其中

$$x_i = a + i \cdot h, \quad h = \frac{b-a}{n}$$
 $(i = 0, 1, ..., n)$

复合梯形公式

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_{i}}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{2} [f(x_{i}) + f(x_{i+1})]$$
$$= \frac{h}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{i}) + f(b) \right] \triangleq T_{n}$$

●余项

$$R[f] = -\frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\eta) \qquad \eta \in (a,b)$$

复合 Simpson 公式

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_{i}}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \int_{a}^{b} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{6} [f(x_{i}) + 4f(x_{i+\frac{1}{2}}) + f(x_{i+1})]$$

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

• 余项

$$R[f] = -\frac{h^5}{2880} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_i) = -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\eta) \quad \boxed{\eta \in (a,b)}$$

性质:复合梯形公式和复合Simpson 公式都是收敛的,也都是稳定的。

例2 分别用复化梯形公式与复化Simpson公式

计算积分

$$I = \int_0^1 e^x dx$$

的近似值,为使截断误差的绝对值不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-4}$ 至少应将[0,1]的多少等份.

[解] (1)用复化梯形公式,截断误差为

$$R_{T}(f) = -\frac{b-a}{12}h^{2} f''(\xi), \quad \xi \in (a,b) \qquad \left| f^{(k)}(x) \right| = e^{x} \le e, \quad x \in [0,1]$$

$$|R_{T}| = \frac{1}{12}h^{2} |f''(\xi)| \le \frac{h^{2}}{12}e \quad = \frac{1}{12}\frac{1}{n^{2}}e \quad \le \frac{1}{2} \times 10^{-4},$$

$$n^{2} \ge \frac{2}{12} \times 10^{4}e, \quad n \ge 67.3$$

故取 n=68

(2)若用复化Simpson公式,截断误差为

$$R_{S}(f) = -\frac{b-a}{180}h^{4}f^{(4)}(\xi) \qquad \xi \in (a,b)$$

$$|R_{S}(f)| = \left| -\frac{b-a}{180}h^{4}f^{(4)}(\xi) \right| = \frac{1-0}{180}h^{4}e^{\xi} \leq \frac{1}{180}\frac{1}{n^{4}}e^{\xi}$$

$$\leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}, \xi \in (0,1)$$

$$n^{4} \geq \frac{2e}{180} \times 10^{4}, \qquad n \geq 4.1688$$

故取 n=6

定义 如果一组节点 $x_1, x_2, \dots, x_n \in [a, b]$ 比使求积公式 $x_1, x_2, \dots, x_n \in [a, b]$

能使求积公式
$$\int_{a}^{b} \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_{k} f(x_{k})$$

具有 2n+1次代数精确度,则称这组节点 $\{x_k\}$ 为Gauss点, 称为带权函数 $\rho(x)$ 的Gauss型求积公式.

例5 试确定求积公式

$$\int_{-4}^{4} f(x)dx \approx \frac{8}{3} [2f(-2) - f(0) + 2f(2)]$$

代数精确度,它是否是 Gauss型求积公式.

$$\int_{-4}^{4} f(x) dx \approx \frac{8}{3} [2f(-2) - f(0) + 2f(2)]$$

解 由于当 f(x) 分别取 $1, x, x^2, x^3$ 有

$$\int_{-4}^{4} dx = 8 = \frac{8}{3} [2 - 1 + 2] = 8$$

$$\int_{-4}^{4} x dx = 0 = \frac{8}{3} [2 \times (-2) - 0 + 2 \times 2] = 0$$

$$\int_{-4}^{4} x^{2} dx = \frac{1}{3} x^{3} \Big|_{-4}^{4} = \frac{128}{3} = \frac{8}{3} [2 \times (-2)^{2} - 0 + 2 \times 2^{2}] = \frac{128}{3}$$

$$\int_{-4}^{4} x^3 dx = \frac{1}{4} x^4 \Big|_{-4}^{4} = 0 = \frac{8}{3} [2 \times (-2)^3 - 0 + 2 \times (2)^3] = 0$$

即求积公式精确成立. 而当 $f(x)=x^4$

而当
$$f(x) = x^4$$

$$\int_{-4}^{4} x^4 dx = \frac{1}{5} x^5 \Big|_{-4}^{4} = \frac{2048}{5}, \quad \frac{8}{3} [2 \times (-2)^4 - 0 + 2 \times (2)^4] = \frac{512}{3} \neq \frac{2048}{5}$$

因此,求积公式的代数精度为3.

它不是Gauss型求积公式.



第九章 常微分方程数值解法

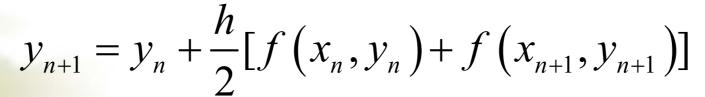
$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) & (n = 0, 1, \dots) \\ y_0 = y(a) & \end{cases}$$

上式称为显式欧拉公式.

Euler法的局部截断误差也可表示为

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

Euler方法是一阶方法.



这就是梯形公式.

梯形公式的局部截断误差为

$$R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - \frac{h}{2} [f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))]$$

$$= -\frac{h^3}{12} y'''(\xi)$$

$$x_n < \xi < x_{n+1}$$

故梯形公式为二阶方法.



$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{p} c_i K_i \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_i = f(x_n + a_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} K_j) & (i = 2, 3, \dots, p) \end{cases}$$

其中 a_i , b_{ij} , c_i , 都是参数,确定它们的原则是使近似公式在 (x_n, y_n) 处的Taylor展开式与y(x) 在 x_n 处的Taylor展开式的前面的项尽可能多地重合,这样就使近似公式有尽可能高的精度。

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1) \end{cases}$$

这就是改进Euler公式,它是一种二阶龙格-库塔公式。

$$\begin{cases} \overline{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) & \text{55} \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \overline{y}_{n+1})] & \text{55} \end{cases}$$

上式称为由Euler公式和梯形公式得到的预测—校正公式,也叫改进Euler法,它是显式单步法。

改进Euler法的局部截断误差为 $O(h^3)$, 故它是二阶方法。

例1用欧拉法求初值问题

$$\begin{cases} y' = -\frac{0.9}{1 + 2x} y\\ y(x_0) = 1 & x_0 = 0 \end{cases}$$

当h = 0.02时在区间[0, 0.10]上的数值解。

解 把
$$f(x,y) = -\frac{0.9}{1+2x}y$$
 代入欧拉法计算公式。就得

$$y_{n+1} = y_n - h \frac{0.9}{1 + 2x_n} y_n = \left(1 - \frac{0.018}{1 + 2x_n}\right) y_n$$
 $n = 0, 1, \dots, 5$

具体计算结果如下表:

n	X_n	\mathcal{Y}_n	$y(x_n)$	$\varepsilon_n = y(x_n) - y_n$
0	0	1.0000	1.0000	0
1	0.02	0.9820	0.9825	0.0005
2	0.04	0.9650	0.9660	0.0005
3	0.06	0.9489	0.9503	0.0014
4	0.08	0.9336	0.9354	0.0018
5	0.10	0.9192	0.923	0.0021

例 用改进的Euler法求初值问题

 $\begin{cases} y' = x^2 + x - y & 0 \le x \le 0.3 \\ y(0) = 0 \end{cases}$

的数值解,取 h=0.1.

解 改进的Euler公式为

$$\begin{cases} \overline{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \overline{y}_{n+1})] \end{cases}$$

$$f(x, y) = x^2 + x - y \qquad \text{Ff id}$$

$$\overline{y}_{n+1} = y_n + 0.1(x_n^2 + x_n - y_n) = 0.9 y_n + 0.1(x_n^2 + x_n)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{0.1}{2} [x_n^2 + x_n - y_n + x_{n+1}^2 + x_{n+1} - \overline{y}_{n+1}]$$

$$= y_n + \frac{0.1}{2} [x_n^2 + x_n - y_n + (x_n + 0.1)^2 + (x_n + 0.1) - 0.9 y_n - 0.1(x_n^2 + x_n)]$$

$$= y_n + 0.05 [1.9 x_n^2 + 2.1 x_n - 1.9 y_n + 0.11]$$

常微分方程数值解法

$$y_{n+1} = y_n + \frac{0.1}{2} [x_n^2 + x_n - y_n + x_{n+1}^2 + x_{n+1} - \overline{y}_{n+1}]$$

= $y_n + 0.05[1.9x_n^2 + 2.1x_n - 1.9y_n + 0.11]$

将 $x_0 = 0, y_0 = 0$ 代入上式得

$$y_1 = y_0 + 0.05[1.9x_0^2 + 2.1x_0 - 1.9y_0 + 0.11]$$
$$= 0.05 \times 0.11 = 0.00550$$

将
$$x_1 = 0.1, y_1 = 0.00550$$
 代入上式得

$$y_2 = y_1 + 0.05[1.9x_1^2 + 2.1x_1 - 1.9y_1 + 0.11]$$

$$y_2 = 0.00550 + 0.05[1.9 \times 0.1^2 + 2.1 \times 0.1 - 1.9 \times 0.0055 + 0.11]$$

= 0.021927

将
$$x_2 = 0.2$$
, $y_2 = 0.021927$ 代入上式得 $y_3 = y_2 + 0.05[1.9x_2^2 + 2.1x_2 - 1.9y_2 + 0.11] = 0.050144$

例12 用二阶方程初值问题 y''=3y'-2y,y(0)=y'(0)=1 化为一阶方程组初值问题,并写出欧拉方法求解的计算公式.

解令
$$z = y'$$
 可得 $y' = z$, $y(0) = 1$ $z' = 3z - 2y$, $z(0) = 1$

计算公式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hz_n \\ z_{n+1} = z_n + h(3z_n - 2y_n) \end{cases}$$
$$y_0 = 1, z_0 = 1$$

例4.3 对初值问题
$$\begin{cases} y' + y = 0 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

y(0) = 1证明用梯形公式求得的近似解为 $y_n = \left(\frac{2-h}{2+h}\right)^n, x = nh$

并证明当步长 $h\to 0$ 时, y_n 收敛于精确解 e^{-x}

证明:解初值问题的梯形公式为:

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

$$f(x,y) = -y$$
 $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[-y_n - y_{n+1}]$

整理成显式
$$y_{n+1} = \left(\frac{2-h}{2+h}\right)y_n$$
 反复迭代,得到:



$$y_{n+1} = \left(\frac{2-h}{2+h}\right) y_n$$

$$y_{n+1} = \left(\frac{2-h}{2+h}\right) y_n = \left(\frac{2-h}{2+h}\right)^2 y_{n-1}$$

$$= \left(\frac{2-h}{2+h}\right)^3 y_{n-2} = \dots = \left(\frac{2-h}{2+h}\right)^{n+1} y_0$$

$$y_0 = 1 \qquad y_n = \left(\frac{2-h}{2+h}\right)^n$$



$$y_n = \left(\frac{2-h}{2+h}\right)^n$$
 由于 $x=nh$,有:

由于
$$x = nh$$
 ,有

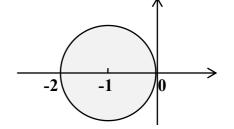
$$\lim_{h\to 0} y_n = \lim_{h\to 0} \left(\frac{2-h}{2+h}\right)^{\frac{x}{h}}$$

$$= \lim_{h \to 0} \frac{\left(1 - \frac{h}{2}\right)^{\left(-\frac{2}{h}\right)\left(-\frac{x}{2}\right)}}{\left(1 + \frac{h}{2}\right)^{\left(\frac{2}{h}\right)\left(\frac{x}{2}\right)}} = \frac{e^{-\frac{x}{2}}}{e^{\frac{x}{2}}} = e^{-x}$$

$$\lim_{h\to 0} y_n = \mathrm{e}^{-x}$$

例: 考察显式欧拉法 $y_{i+1} = y_i + h\lambda y_i = (1 + \overline{h})^{i+1} y_0$

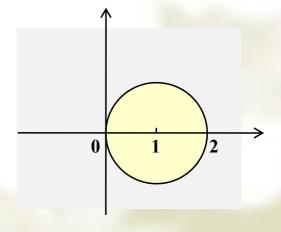
$$\varepsilon_0 = y_0 - \overline{y}_0 \longrightarrow \overline{y}_{i+1} = (1 + \overline{h})^{i+1} \overline{y}_0$$



由此可见,要保证初始误差 ε_0 以后逐步衰减, $\overline{h}=\lambda h$ 必须满足: $|1+\overline{h}|<1$

例: 考察隐式欧拉法
$$y_{i+1} = y_i + h\lambda y_{i+1}$$

$$y_{i+1} = \left(\frac{1}{1-\overline{h}}\right) y_i \longrightarrow \varepsilon_{i+1} = \left(\frac{1}{1-\overline{h}}\right)^{i+1} \varepsilon_0$$



可见绝对稳定区域为: $|1-\overline{h}|>1$

注:一般来说, 隐式欧拉法的绝对稳定性比同阶的显式法的好。