Numerical Integration & Numerical Differentiation

Brassicaaa

2022 年 11 月 19 日

目录

第一章　绪论

现代研究方法包括：理论、实践、科学计算

函数 $f(x)$ 在 x_0 处的 n 次 Taylor 多项式展开：

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k \\ &= f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x-x_0) + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n \end{aligned} \tag{1.1}$$

误差：

$$\begin{aligned} R_n(x) &= f(x) - P_n(x) \\ &= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1} \end{aligned} \tag{1.2}$$

1.1　误差

误差的来源：模型误差、观测误差、截断误差、舍入误差

真实值：x

测量值：x^*

误差：$e^* = x^* - x$，$e^* > 0$ 近似值偏大，称为强近似值，$e^* < 0$ 近似值偏小，称为弱近似值

误差限：ε^*，$\left|e^*\right| = \left|x^* - x\right| \le \varepsilon^*$

相对误差：$e_r^* = \dfrac{e^*}{x} \approx \dfrac{e^*}{x^*}$ (e_r^* 较小)

相对误差限：$\varepsilon_r^* = \dfrac{\varepsilon^*}{|x^*|}$

n 位有效数字的标准写法：

$$x^* = \pm 10^m \times (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}) \tag{1.3}$$

其误差限：

$$\varepsilon^* = \left| x^* - x \right| \le \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1} \tag{1.4}$$

Theorem 1.1. 对具有 n 位有效数字的 x^* 其相对误差限为：

$$\varepsilon_r^* \le \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} \tag{1.5}$$

定理 1.1 表明，有效数字位数越多，相对误差限越小。

和的误差是误差之和，差的误差是误差之差

乘积的相对误差是各乘数的相对误差之和，商的相对误差是被除数与除数的相对误差之差

证明. 将 x^* 的误差 $e^* = x^* - x$ 看作是对 x 的微分：

$$\mathrm{d}x = x^* - x$$

则 x^* 的相对误差就为对数函数的微分：

$$e_r^* = \frac{x^* - x}{x} = \frac{\mathrm{d}x}{x} = \mathrm{d}\ln x$$

设 $u = xy$，则 $\ln u = \ln x + \ln y$，故:

$$\mathrm{d}\ln u = \mathrm{d}\ln x + \mathrm{d}\ln y$$

□

1.2 注意事项

1. **避免两个相近的数相减**

   设 $u = x - y$，则相对误差：

   $$\mathrm{dln}u = \frac{\mathrm{d}x - \mathrm{d}y}{x - y}$$

   如果下 x 和 y 很接近，就会导致 u 的相对误差很大。

   (a) 当 $x \to 0$，$\dfrac{1 - \cos x}{\sin x} \rightleftharpoons \dfrac{\sin x}{1 + \cos x}$

   (b) 当 $(x_1 - x_2) \to 0$，$(\lg x_1 - \lg x_2) \rightleftharpoons \lg\dfrac{x_1}{x_2}$

   (c) 当 $x \to \infty$，$\sqrt{x+1} - \sqrt{x} \rightleftharpoons \dfrac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}$

   (d) 当 $f(x) \approx f(x^*)$ 时，用 Taylor 级数展开：

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

2. **防止大数吃掉小数**

3. **避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法**

4. **简化运算步骤，较少运算次数**

第二章　函数的插值与逼近

在线性空间 $C[a,b]$ 上，$f(x) \in C[a,b]$，已知 $f(x_i) = y_i\ (i = 0, 1, \ldots, n)$，用 $\varphi(x) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i \varphi_i(x)$ 近似 $f(x)$。在给定插值条件：

$$\varphi(x_i) = y_i\ (i = 0, 1, \ldots, n) \tag{2.1}$$

的情况下，$\varphi(x)$ 是次数不超过 n 的代数插值多项式：

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n \tag{2.2}$$

用 $\boldsymbol{H}_n$ 表示所有次数不超过 n 的多项式集合，则有 $\varphi(x) \in \boldsymbol{H}_n$，满足如下定理：

Theorem 2.1. *满足插值条件 2.1 的插值多项式 2.2 存在且唯一。*

证明. 形如 2.2的 $\varphi(x)$ 满足插值条件 2.1 可知：

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + \cdots + a_n x_0^n = y_0, \\ a_0 + a_1 x_1 + \cdots + a_n x_1^n = y_1, \\ \cdots\cdots\cdots \\ a_0 + a_1 x_n + \cdots + a_n x_n^n = y_n. \end{cases} \tag{2.3}$$

转化为证明该方程组解的存在唯一行问题，即行列式不为 0。而该方程组的行列式是 Vandermonde 行列式：

$$V_n(x_0, x_1, \ldots, x_n) = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{i=1}^{n} \prod_{j=0}^{i-1} (x_i - x_j) = \prod_{0 \le j < i \le n} (x_i - x_j)$$

因节点 $x_i \neq x_j (i \neq j)$ 而不为 0。 □

Theorem 2.2 (Rolle Law)**.** *如果 R 上的函数 $f(x)$ 满足以下条件:*

1. *在闭区间 $[a,b]$ 上连续*
2. *在开区间 (a,b) 内可导*
3. *$f(a) = f(b)$*

则至少存在一个 $\xi \in (a,b)$，使得 $f'(\xi) = 0$

2.1 Lagrange 插值

对于 $n+1$ 个节点的函数插值，Lagrange 采用 n 次插值基函数与节点函数值的乘积再求和来表示。插值条件：

$$L_n(x_k) = y_k \ (k = 1, 2, \dots, n) \tag{2.4}$$

$$l_j(x_k) = \delta_{jk} = \begin{cases} 1, & k = j \\ 0, & k \neq j \end{cases} \quad (j, k = 0, 1, \dots, n) \tag{2.5}$$

$l(x)$ 称为 $f(x)$ 的 n 次插值基函数，$L_n(x)$ 称为 $f(x)$ 的 n 次 Lagrange 插值多项式，表示为：

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i l_i(x) \tag{2.6}$$

若记:

$$\begin{aligned} \omega_{n+1}(x) &= (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) \\ &= \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \end{aligned} \tag{2.7}$$

$$\omega'_{n+1}(x_k) = \prod_{i=0, i \neq k}^{n} (x_k - x_i) \tag{2.8}$$

则：

$$l_i(x) = \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_i)\omega'_{n+1}(x_i)} \quad (i = 0, 1, \dots, n) \tag{2.9}$$

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_i)\omega'_{n+1}(x_i)} \tag{2.10}$$

插值余项：

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \quad \xi = \xi(x) \in (a,b) \tag{2.11}$$

余项估计：

$$\left|R_n(x)\right| \leqslant \frac{M}{(n+1)!}\left|\omega_{n+1}(x)\right|$$

当 $f'(x) \in C[a,b]$ 时，可取 $M = \max_{a\leqslant x\leqslant b}\left|f^{(n+1)}(x)\right|$.

证明.

$$\begin{aligned} \because \quad & R_n(x_i) = f(x_i) - L_n(x_i) = 0 \\ \therefore \quad \text{设 } & R_n(x) = k(x)(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n) \\ & = k(x)\omega_{n+1}(x) \end{aligned}$$

将 x（不为插值节点）视为 $[a,b]$ 上一个固定点，做辅助函数：

$$\begin{aligned} \varphi(t) &= R_n(t) - k(x)\omega_{n+1}(t) \\ &= f(t) - L_n(t) - k(x)(t-x_0)(t-x_1)\dots(t-x_n) \end{aligned}$$

根据插值条件和余项定义知 φ 有 $n+2$ 个零点 $\{x_0, x_1, \dots, x_n, x\}$，由 Rolle 定理知 $\varphi^{(n+1)}$ 在 (a,b) 内至少有 1 个零点，记该零点为 ξ, $\xi(x) \in (a,b)$，使得：

$$\varphi^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - (n+1)!k(x) = 0$$

则：

$$k(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad \xi = \xi(x) \in (a,b)$$

□

2.2 Iteration 插值

两个 m 次插值多项式通过线性插值可得到一个 $m+1$ 次的插值多项式。

Aitken 逐次线性插值公式：

$$P_{0,1,\ldots,m,l}(x) = P_{0,1,\ldots,m}(x) + \frac{P_{0,1,\ldots,m-1,l}(x) - P_{0,1,\ldots,m}(x)}{x_l - x_m}(x - x_m) \tag{2.12}$$

Neville 算法:

$$P_{0,1,\ldots,m+1}(x) = P_{0,1,\ldots,m}(x) + \frac{P_{1,2,\ldots,m+1}(x) - P_{0,1,\ldots,m}(x)}{x_{m+1} - x_0}(x - x_0) \tag{2.13}$$

验证 (Aitken 公式)：

当 $i = 0, 1, \ldots, m-1$ 时：

$$P_{0,1,\ldots,m,l}(x_i) = P_{0,1,\ldots,m}(x_i) = f(x_i)$$

当 $i = m$ 时：

$$P_{0,1,\ldots,m,l}(x_i) = P_{0,1,\ldots,m}(x_m) = f(x_m)$$

当 $i = l$ 时：

$$\begin{aligned} P_{0,1,\ldots,m,l}(x_i) &= P_{0,1,\ldots,m}(x_l) + \frac{f(x_l) - P_{0,1,\ldots,m}(x_l)}{x_l - x_m}(x_l - x_m) \\ &= f(x_l) \end{aligned}$$

2.3 Newton 插值

2.3.1 Newton 均差

定义零阶均差：

$$f[x_i] = f(x_i)$$

一阶均差：

$$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f[x_{i+1}] - f[x_i]}{x_{i+1} - x_i}$$

k 阶均差：

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \dots, x_{i+k}] - f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$$

Theorem 2.3. *均差有如下基本性质：*

1. *均差可以表示为函数的线性组合*

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \sum_{j=0}^{n} \frac{f(x_j)}{(x_j - x_0)(x_j - x_1)\dots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\dots(x_j - x_n)}$$

2. *均差所含节点对称（与排列次序无关）*

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = f[x_1, x_0, x_2, \dots, x_n] \tag{2.14}$$

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f[x_0, \dots, x_{k-2}, x_k] - f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_{k-1}} \tag{2.15}$$

3. *均差与导数的关系：设 f 在 $[a, b]$ 上的 n 阶导数存在，且 $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$，则存在 $\xi \in (a, b)$，使得*

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \tag{2.16}$$

将直线的点斜式方程：

$$P_1(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0)$$

推广到 $n+1$ 个插值节点 $(x_0, y_0)(x_1, y_1)\dots(x_n, y_n)$ 情形：

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \cdots + a_n(x-x_0)\dots(x-x_{n-1}) \tag{2.17}$$

Theorem 2.4. 若形如 $P_n(x)$ 的 n 次多项式 $N_n(x)$ 满足插值条件：

$$N_n(x_i) = f(x_i) \quad (i = 0, 1, \dots, n) \tag{2.18}$$

则：

$$N_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x-x_0) + \cdots + f[x_0, \dots, x_n](x-x_0)\dots(x-x_{n-1}) \tag{2.19}$$

余项：

$$\begin{aligned} R_n(x) &= f(x) - N_n(x) \\ &= f[x, x_0, x_1, \dots, x_n]\omega_{n+1}(x) \end{aligned} \tag{2.20}$$

2.3.2 Newton 差分

Ignore it...

2.4 Hermite 插值

一般地，给定 $n+1$ 个节点上的函数值和一阶导数值：$f(x_i)=y_i$，$f'(x_i)=m_i$，$(i=0,1,\ldots,n)$，则可以构造出 $2n+1$ 次的标准 Hermite 插值多项式 $H_{2n+1}(x)$ 满足插值条件：

1. $H_{2n+1}(x)$ 是不超过 $2n+1$ 次的代数多项式；
2. $H_{2n+1}(x_i)=y_i,\quad H'_{2n+1}(x_i)=m_i,\qquad (i=0,1,\ldots,n)$

其基函数:

$$\begin{cases}\alpha_j(x)=[1-2(x-x_j)\sum\limits_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n}\frac{1}{x_j-x_k}]l_j^2(x)\\ \beta_j(x)=(x-x_j)l_j^2(x)\quad (j=0,1,\ldots,n)\end{cases}\tag{2.21}$$

标准 Hermite 插值多项式：

$$H_{2n+1}(x)=\sum_{j=0}^{n}[a_jf(x_j)+\beta_jf'(x_j)]\tag{2.22}$$

插值余项：

$$R_{2n+1}(x)=f(x)-H_{2n+1}(x)=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)\tag{2.23}$$

特别地，当 $n=1$，即给定两个节点 x_i,x_i+1 的函数值和一阶导数值：

$$\alpha_i(x)=(1+2\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i})(\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}})^2$$

$$\alpha_{i+1}(x)=(1+2\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}})(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i})^2$$

$$\beta_i(x)=(x-x_i)(\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}})^2$$

$$\beta_{i+1}(x)=(x-x_{i+1})(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i})^2$$

唯一性的证明可设 $H_3(x),\bar{H}_3(x)$ 都满足插值条件，作辅助函数 $g(x)=H_3(x)-\bar{H}_3(x)$，因为 $g(x)$ 存在 *2* 个二阶零点，与插值条件中次数不超过三次相矛盾，故 $g(x)\equiv 0$.

2.5　分段多项式插值

2.5.1　Segmented Linear Interpolation

定义 $f(x)$ 是区间 $[a,b]$ 上的函数，已知 $f(x)$ 在节点 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ 上的函数值 $f_0,f_1,\ldots,f_n$，记 $h_k=x_{k+1}-x_k$，$h=\max\limits_{0\leqslant k\leqslant n-1} h_k$，如果函数 $I_h(x)$ 满足条件：

1. $I_h(x)\in C^0[a,b]$
2. $I_h(x_k)=f_k \quad (k=0,1,\ldots,n)$
3. 在每个子区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上，$I_h(x)$ 是线性多项式

则称 $I_h(x)$ 为 $f(x)$ 的**分段线性插值函数**，其形式为:

$$I_h(x)=\sum_{k=0}^{n} f_k l_{h,k}(x) \tag{2.24}$$

它在子区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上的形式为：

$$I_h(x)=f_k(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}})+f_{k+1}(\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}) \quad x\in[x_k,x_{k+1}] \tag{2.25}$$

利用线性插值的余项可得分段线性插值函数的余项估计：

$$|R(x)|=\left|f(x)-I_h(x)\right|\leqslant\frac{h^2}{8}M \tag{2.26}$$

其中，$M=\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}\left|f''(x)\right|$.

2.5.2　Segmented Three-Hermite Interpolation

定义 $f(x)$ 是区间 $[a,b]$ 上的函数，已知 $f(x)$ 在节点 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ 上的函数值 $f_0,f_1,\ldots,f_n$，导数值为 $f'(x_k)=m_k$ $(k=0,1,\ldots,n)$，$h=\max\limits_{0\leqslant k\leqslant n-1}(x_{k+1}-x_k)$，如果函数 $I_h(x)$ 满足条件：

1. $I_h(x)\in C^1[a,b]$
2. $I_h(x_k)=f_k$，$I_h'(x_k)=m_k \quad (k=0,1,\ldots,n)$
3. 在每个子区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上，$I_h(x)$ 是三次多项式

则称 $I_h(x)$ 为 $f(x)$ 的**分段三次 Hermite 插值函数**，其形式为:

$$I_h(x) = \sum_{k=0}^{n}[\alpha_k(x)f_k + \beta_k(x)m_k] \tag{2.27}$$

它在子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上的形式为：

$$I_h(x) = \alpha_k(x)f_k + \alpha_{k+1}(x)f_{k+1} + \beta_k(x)m_k + \beta_{k+1}(x)m_{k+1} \tag{2.28}$$

余项估计：

$$|R(x)| = \left|f(x) - I_h(x)\right| \leqslant \frac{h^4}{384}M_4 \tag{2.29}$$

其中，$M_4 = \max\limits_{x\in[a,b]}\left|f^{(4)}(x)\right|$. 同时还有下式成立：

Theorem 2.5.

$$\|D(f - I_h)\|_\infty \leqslant \frac{\sqrt{3}}{216}h^3\|D^4 f\|_\infty \tag{2.30}$$

$$\|D^2(f - I_h)\|_\infty \leqslant \frac{\sqrt{1}}{12}h^2\|D^4 f\|_\infty \tag{2.31}$$

$$\|D^3(f - I_h)\|_\infty \leqslant \frac{\sqrt{1}}{12}h\|D^4 f\|_\infty \tag{2.32}$$

这里 $D^i(i = 1,2,3,4)$ 表示 i 阶微分算子，$\|f\|_\infty = \max\limits_{x\in[a,b]}|f(x)|$.

2.6 Spline 插值

2.6.1 Define Function

设 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 为区间 $[a, b]$ 上给定的一个划分，若函数 $s(x)$ 满足下列条件：

1. $s(x) \in C^2[a, b]$
2. 在每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ $(k = 0, 1, \ldots, n-1)$ 上，$s(x)$ 是三次多项式

则称 $s(x)$ 为关于节点 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 的**三次样条函数**，若进一步满足插值条件：

3. $s(x_k) = f(x_k) = y_k \quad (k = 0, 1, \ldots, n)$

则称 $s(x)$ **为三次样条插值函数**。

每个区间上是三次多项式需要确定 4 个参数，则 $s(x)$ 一共需要确定 $4n$ 个参数。根据 $n+1$ 个插值点以及中间 $(n-1)$ 个点的连续性可确定 $4n-2$ 个参数，还需要两个条件，可分为三种情况：

1. **已知两端点处的一阶导数值, 称为固支边界条件**

$$s'(x_0) = f_0' = f'(x_0), \quad s'(x_n) = f_n' = f'(x_n) \tag{2.33}$$

2. **已知两端点处的二阶导数值**

$$s''(x_0) = f_0'' = f''(x_0), \quad s''(x_n) = f_n'' = f''(x_n) \tag{2.34}$$

   当特殊情形时：

$$s''(x_0) = s''(x_n) = 0 \tag{2.35}$$

   称为**自然边界条件**

3. **当 $f(x)$ 是以 $x_n - x_0$ 为周期的周期函数时，称为周期边界条件**

$$s^{(k)}(x_0 + 0) = s^{(k)}(x_n - 0) \quad (k = 0, 1, 2) \tag{2.36}$$

2.6.2 Construct Function

1. 三转角方程

由 Hermite 插值，记 $h_k = x_{k+1} - x_k$，则 $s(x)$ 在区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上为：

$$s(x) = \frac{(x-x_{k+1})^2[h_k+2(x-x_k)]}{h_k^3}y_k + \frac{(x-x_k)^2[h_k+2(x_{k+1}-x)]}{h_k^3}y_{k+1} \tag{2.37}$$

$$+\frac{(x-x_{k+1})^2(x-x_k)}{h_k^2}m_k + \frac{(x-x_k)^2(x-x_{k+1})}{h_k^2}m_{k+1} \tag{2.38}$$

计算:

$$h_k = x_{k+1} - x_k \tag{2.39}$$

$$f[x_k, x_{k+1}] = \frac{y_{k+1}-y_k}{h_k} \tag{2.40}$$

$$\lambda_k = \frac{h_k}{h_{k-1}+h_k} \tag{2.41}$$

$$\mu_k = \frac{h_{k-1}}{h_{k-1}+h_k} \tag{2.42}$$

$$e_k = 3(\lambda_k f[x_{k-1}, x_k] + \mu_k f[x_k, x_{k+1}]) \tag{2.43}$$

(a) 若给定固支边界条件，则 m_0, m_n 已知，仅有 $m_1, m_2, \ldots, m_{n-1}$ 共 $4n-1$ 个未知数组成方程组：

$$\begin{bmatrix} 2 & \mu_1 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_2 & 2 & \mu_2 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_3 & 2 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & \lambda_{n-2} & 2 & \mu_{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & \lambda_{n-1} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ \vdots \\ m_{n-2} \\ m_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1 - \lambda_1 f_0' \\ e_2 \\ e_3 \\ \vdots \\ e_{n-2} \\ e_{n-1} \end{bmatrix} \tag{2.44}$$

(b) 若给定自然边界条件，则 $e_0 = 3f[x_0, x_1]$，$e_n = 3f[x_{n-1}, x_n]$ 已知，则：

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_1 & 2 & \mu_1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_{n-1} & 2 & \mu_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ m_{n-1} \\ m_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_0 \\ e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_{n-1} \\ e_n \end{bmatrix} \tag{2.45}$$

在非特殊情形时，第二类边界条件是：

$$\begin{cases} 2m_0 + m_1 = 3f[x_0, x_1] - \frac{h_0}{2} f_0'' \triangleq e_0 \\ m_{n-1} + 2m_n = 3f[x_{n-1}, x_n] + \frac{h_{n-1}}{2} f_n'' \triangleq e_n \end{cases} \tag{2.46}$$

(c) 若给定周期边界条件，$m_0 = m_n$，$\mu_n m_1 + \lambda_n m_{n-1} + 2m_n = e_n$，此处 $\mu_n = \frac{h_{n-1}}{h_0 + h_{n-1}}$，$\lambda_n = \frac{h_0}{h_0 + h_{n-1}}$，$e_n = 3(\mu_n f[x_0, x_1] + \lambda_n f[x_{n-1}, x_n])$，则：

$$\begin{bmatrix} 2 & \mu_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \lambda_1 \\ \lambda_2 & 2 & \mu_2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_{n-1} & 2 & \mu_{n-1} \\ \mu_n & 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda_n & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ m_{n-1} \\ m_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_{n-1} \\ e_n \end{bmatrix} \tag{2.47}$$

2. 三弯矩方程: 略

2.7 最小二乘拟合

对 (x_k, y_k) $(k = 1, \ldots, n)$ 共 n 个数据点，不要求拟合曲线 $\varphi(x)$ 通过所有数据点，但要反映 $f(x_i)$ 的总体特征，一般用误差 $\delta_i = y(x_i) - y_i$ 衡量 $\varphi(x)$ 的好坏，常用**最小二乘原理** $\sum\limits_i \delta_i^2$ 达到最小来确定参数。

1. **一次函数拟合** $y = ax + b$. 记：

$$\varphi(a, b) = \sum_{i=1}^{n} \delta_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2 \tag{2.48}$$

   (a) 通过微积分方法求解**正规方程组**:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \varphi(a, b)}{\partial a} = 0 \\ \dfrac{\partial \varphi(a, b)}{\partial b} = 0 \end{cases} \tag{2.49}$$

   (b) 通过矩阵方法写出**矛盾方程组**：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{2.50}$$

   其中：

$$A = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{bmatrix}, \ x = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}, \ b = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

   则相应的正规方程组为：

$$\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{b} \tag{2.51}$$

   即可求出待定参数 a 和 b.

2. **二次函数拟合** $y = ax^2 + bx + c$.

$$\varphi(a, b, c) = \sum_{i=1}^{n} \delta_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (ax_i^2 + bx_i + c - y_i)^2 \tag{2.52}$$

(a) 通过微积分方法求解**正规方程组**:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\varphi(a,b,c)}{\partial a} = 0 \\ \dfrac{\partial\varphi(a,b,c)}{\partial b} = 0 \\ \dfrac{\partial\varphi(a,b,c)}{\partial c} = 0 \end{cases} \tag{2.53}$$

(b) 通过矩阵方法写出**矛盾方程组**：

$$A = \begin{bmatrix} x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^2 & x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_n^2 & x_n & 1 \end{bmatrix},\ x = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix},\ b = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

相应的正规方程组：

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$$

即可求出待定参数 a, b, c.

3. **一般情形最小二乘拟合**

将线性多项式系 $\{1, x\}$ 进行推广，对已知数据为 $\{(x_j, y_j)\}_{j=0}^m$ 的集合，取函数类为 $\Phi = \mathrm{Span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}(n < m)$，求 $y = F^*(x) \in \Phi$，使得误差平方和为：

$$\sum_{j=0}^m \delta_j^2 = \sum_{j=0}^m [F^*(x_j) - y_j]^2 = \min_{F(x)\in\Phi} \sum_{j=0}^m [F(x_j) - y_j]^2 \tag{2.54}$$

此处 $F(x)$ 的形式为基函数 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ 的线性组合：

$$F(x) = \sum_{j=0}^n C_j \varphi_j(x) \tag{2.55}$$

若用欧式范数的平方来表示误差的平方和，考虑不同点的权重 $\omega(x_j)$，则有：

$$\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2 = \min_{F(x)\in\Phi} \sum_{j=0}^m \omega(x_j)[F(x_j) - y_j]^2, \quad \omega(x_j) \geqslant 0 \tag{2.56}$$

等价于求如下多元函数：

$$I(C_0, C_1, \dots, C_n) = \sum_{j=0}^{m} \omega(x_j)[\sum_{i=0}^{n} C_i\varphi_i(x_j) - y_j]^2 \tag{2.57}$$

的极小值点问题，各个参数的一阶偏导数为零，得到 $n+1$ 个方程构成的正规方程组：

$$\frac{\partial I}{\partial C_k} = 2\sum_{j=0}^{m} \omega(x_j)[\sum_{i=0}^{n} C_i\varphi_i(x_j) - y_j]\varphi_k(x_j) = 0 \quad (k = 0, 1, \dots, n) \tag{2.58}$$

若引入记号：

$$(\varphi_i, \varphi_k) = \sum_{j=0}^{m} \omega(x_j)\varphi_i(x_j)\varphi_k(x_j)$$

$$b_k = \sum_{j=0}^{m} \omega(x_j)y_j\varphi_k(x_j),\ (k = 0, 1, \dots, n)$$

可简化为：

$$\sum_{i=0}^{n}(\varphi_k, \varphi_i)C_i = b_k \quad (k = 0, 1, \dots, n) \tag{2.59}$$

其矩阵形式：

$$\boldsymbol{G}_n\boldsymbol{C} = \boldsymbol{b} \tag{2.60}$$

其中 $\boldsymbol{G}_n$ 为离散 Gram 矩阵：

$$\boldsymbol{G}_n = \begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \dots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \dots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \dots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} C_0 \\ C_1 \\ \dots \\ n \end{bmatrix}^T, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \dots \\ n \end{bmatrix}^T$$

第三章　数值积分与数值微分

3.1　数值积分的概念

微积分中的积分定义：

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \lim_{\substack{n\to\infty \\ \max \Delta x_k \to 0}} \sum_{k=1}^{n} \Delta x_k f(x_k) \tag{3.1}$$

Newton-Leibniz 公式:

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = F(b) - F(a) \tag{3.2}$$

数值积分的基本思想是将其转化为**函数值的线性组合**：

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x &= \lim_{\substack{n\to\infty \\ \max \Delta x_k \to 0}} \sum_{k=1}^{n} \Delta x_k f(x_k) \approx \sum_{k=1}^{n} \Delta x_k f(x_k) \\ &\overset{\text{推广}}{\approx} \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \quad (\text{机械求积法}) \end{aligned} \tag{3.3}$$

代数精度用来衡量数值求积公式的准确程度，若某个求积公式对于次数 $\leqslant m$ 的代数多项式都能精确成立，但对 $m+1$ 次代数多项式不一定精确成立，则称该求积公式具有 m 次**代数精度**，即：

$$\begin{cases} f(x) = x^{\mu}, & \sum\limits_{k=0}^{n} A_k x_k^{\mu} = \frac{1}{\mu+1}(b^{\mu+1} - a^{\mu+1}) \quad (\mu \leqslant m) \\ f(x) = x^{m+1}, & \sum\limits_{k=0}^{n} A_k x_k^{m+1} \neq \frac{1}{m+2}(b^{m+2} - a^{m+2}) \end{cases} \tag{3.4}$$

3.2 插值型数值积分公式

3.2.1 Lagrange Integral Formula

根据 Lagrange 插值：

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b \sum_{k=0}^n l_k(x)f(x_k)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^n [\int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x] f(x_k) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) \tag{3.5}$$

该式称为**插值型求积公式**，其中:

$$A_k = \int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x$$

插值型求积公式的余项：

$$R(f) = \int_a^b [f(x) - L_n(x)]\,\mathrm{d}x = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x \quad \xi = \xi(x) \in [a, b] \tag{3.6}$$

Theorem 3.1. *形如公式3.5 的求积公式至少具有 n 次代数精度的充要条件为该求积公式是插值型的。*

3.2.2 Equidistent Integral Formula

1. **Newton-Cotes 公式**

   设求积区间 $[a, b]$ 分为 n 等份，步长 $h = \frac{b-a}{n}$，选取等距节点 $x_k = a + kh(k = 0, 1, \ldots, n)$，构造插值型求积公式：

$$\begin{aligned}
I_n &= \sum_{k=0}^n [\int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x] f(x_k) = \sum_{k=0}^n [\int_a^b \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j}\,\mathrm{d}x] f(x_k) \\
&= \sum_{k=0}^n [h\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^n \frac{t-j}{k-j}\,\mathrm{d}t] f(x_k) = \sum_{k=0}^n [\frac{h}{\prod\limits_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^n (k-j)} \int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^n (t-j)\,\mathrm{d}t] f(x_k) \\
&= \sum_{k=0}^n [\frac{h(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^n (t-j)\,\mathrm{d}t] f(x_k) \\
&= (b-a)\sum_{k=0}^n c_k^{(n)} f(x_k)
\end{aligned} \tag{3.7}$$

称作 **Newton-Cotes 公式**，式中 $c_k^{(n)}$ 称作 Cotes 系数:

$$c_k^{(n)} = \frac{h}{b-a}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n} \frac{t-j}{k-j}\,\mathrm{d}t = \frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(t-j)\,\mathrm{d}t \tag{3.8}$$

并有：

$$A_k = (b-a)c_k^{(n)} \tag{3.9}$$

Cotes 系数的性质：

(a) 当 $\mu = 0$ 时，有 $\sum\limits_{k=0}^{n} A_k = b-a$，结合 $A_k = (b-a)c_k^{(n)}$ 知：

$$\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} = 1 \tag{3.10}$$

(b) 利用 $c_k^{(n)}$ 的表达式，并作代换 $u = n-t$ 可证明：

$$c_k^{(n)} = c_{n-k}^{(n)} \tag{3.11}$$

(c) Cotes 系数有正有负，一般不用高阶 Newton-Cotes 公式，与不用高阶 Lagrange 插值同理。

将 $x = a + th$ 代入插值型积分公式余项得：

$$R(f) = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x \quad \xi = \xi(x) \in [a,b] \tag{3.12}$$

显然，当 $f(x) = x^n$ 时，$f^{(n+1)}(\xi) = 0$, $R(f) = 0$，即该积分公式具有 n 次代数精度，本身也是插值型积分公式。特别地，当 n 为偶数时，$f^{(n+1)}(\xi) = (n+1)!$，有:

$$R(f) = h^{n+2}\int_0^n \prod_{j=0}^{n}(t-j)\,\mathrm{d}t$$

令 $t = u + \frac{n}{2}$,

$$R(f) = h^{n+2}\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} \prod_{j=0}^{n}(u + \frac{n}{2} - j)\,\mathrm{d}u$$

对被积函数：

$$F(u)=\prod_{j=0}^{n}(u+\frac{n}{2}-j)=u\prod_{i=1}^{\frac{n}{2}}[u^2-i^2]$$

则 $F(-u)=-F(u)$，即 $F(u)$ 为奇函数，故 $R(f)=0$，表明当 n 为偶数时，Newton-Cotes 公式具有 $n+1$ 次代数精度。

Theorem 3.2 (积分中值定理)**.** 对 $f(x)\in C[a,b]$，$g(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上可积且保号，则：

$$\int_a^b f(x)g(x)\,\mathrm{d}x=f(\eta)\int_a^b g(x)\,\mathrm{d}x \quad \eta\in[a,b] \tag{3.13}$$

特别地，考虑如下特殊情形：

(a) 当 $n=1$ 时，

$$c_0^{(1)}=c_1^{(1)}=\frac{1}{2}$$

对应**梯形公式**：

$$I_1\triangleq T=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \tag{3.14}$$

当 $f''(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上连续时，梯形公式的余项：

$$\begin{aligned}R_T&=\int_a^b\frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x\\&=\frac{f''(\eta)}{2!}\int_a^b(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x \quad (\text{积分中值定理})\\&=-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3 \quad \eta\in[a,b]\end{aligned} \tag{3.15}$$

(b) 当 $n=2$ 时：

$$c_0^{(2)}=\frac{1}{6}\quad c_1^{(2)}=\frac{4}{6}\quad c_2^{(2)}=\frac{1}{6}$$

对应 **Simpson 公式**：

$$I_2\triangleq S=\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)] \tag{3.16}$$

Simpson 公式的余项：因为其具有三次代数精度，直接利用余项公式不能完全反映误差，构造次数 $\leqslant 3$ 的多项式 $H(x)$，满足插值条件：

$$H(a)=f(a),\quad H(b)=f(b),\quad H(\frac{a+b}{2})=f(\frac{a+b}{2}),\quad H'(\frac{a+b}{2})=f'(\frac{a+b}{2})$$

由于其对三次多项式 $H(x)$ 同样精确成立，有 $\int_a^b H(x)\,\mathrm{d}x = S$，假设 $f(x) \in C^4[a,b]$，则余项为:

$$
\begin{aligned}
R_s = I - H &= \int_a^b [f(x) - H(x)]\,\mathrm{d}x \\
&= \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\,\mathrm{d}x \quad (\text{非标 Hermite 余项}) \\
&= \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\,\mathrm{d}x \quad (\text{积分中值定理}) \\
&= -\frac{b-a}{180}(\frac{b-a}{2})^4 f^{(4)}(\eta) \quad \eta \in [a,b]
\end{aligned} \tag{3.17}
$$

注意，仅当取 $H'(\frac{a+b}{2}) = f'(\frac{a+b}{2})$ 时满足保号（非正）且可积，才满足积分中值定理条件，取 a 或 b 点导数值时均不满足保号性，并且在高阶时同样需要考虑保号性。

(c) 当 $n = 4$ 时：

$$c_0^{(4)} = c_4^{(4)} = \frac{7}{90}, \quad c_1^{(4)} = c_3^{(4)} = \frac{16}{45}, \quad c_2^{(4)} = \frac{2}{15}$$

对应 **Cotes 公式**：

$$I_4 \triangleq C = \frac{b-a}{90}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)] \tag{3.18}$$

Cotes 公式的余项：

$$R_C = I - C = -\frac{2(b-a)}{945}(\frac{b-a}{4})^6 f^{(6)}(\eta) \quad \eta \in [a,b] \tag{3.19}$$

数值稳定性指的是舍入误差对计算结果产生的影响。假设 $f(x_k)$ 有舍入误差 ε_k，产生误差记为 e_n，当 Cotes 系数全为正时，对 Newton-Cotes 公式有：

$$
\begin{aligned}
e_n &= \left|(b-a)\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)}[f(x_k)+\varepsilon_k] - (b-a)\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} f(x_k)\right| \\
&= (b-a)\left|\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)}\varepsilon_k\right| \leqslant (b-a)\sum_{k=0}^{n}\left|c_k^{(n)}\right| \cdot \left|\varepsilon_k\right| \\
&\leqslant \varepsilon(b-a)\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} = (b-a)\varepsilon \quad (\varepsilon = \max\left|\varepsilon_k\right|,\ c_k^{(n)} > 0,\ k = 0,1,\dots,n)
\end{aligned}
$$

2. **复化求积法**

类似于分段低次插值的思想，复化求积法的基本思想是将积分区间分成若干个小区间，在每个小区间上采用低次插值多项式来代替被积函数积分，然后加起来得到整个区间上的求积公式。

Theorem 3.3 (最值定理)**.** *如果 $f(x) \in C[a,b]$, 则对 $\forall x \in [a,b]$, 必然存在 m、M $(m \leqslant M)$ 满足：*

$$m \leqslant f(x) \leqslant M$$

Theorem 3.4 (介值定理)**.** *如果 $f(x) \in C[a,b]$, $f(x)_{min} = m$, $f(x)_{max} = M$ $(m < M)$, 则必然 $\exists x_0 \in [a,b]$, 满足：*

$$m < f(x_0) < M$$

(a) 复化梯形公式为：

$$\begin{aligned} T_n &= \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})] \\ &= \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)] \end{aligned} \tag{3.20}$$

$$\begin{aligned} R_{T_n} = I - T_n &= \sum_{k=0}^{n-1}[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)] \\ &= -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta) \quad \eta \in [a,b] \quad \text{(介值定理)} \end{aligned} \tag{3.21}$$

(b) 记区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 的中点为 $x_{k+\frac{1}{2}}$，则复化 Simpson 公式为：

$$\begin{aligned} S_n &= \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{6}[f(x_k) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})] \\ &= \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)] \end{aligned} \tag{3.22}$$

$$\begin{aligned} R_{S_n} = I - S_n &= \sum_{k=0}^{n-1}(-\frac{h}{180})(\frac{h}{2})^4 f^{(4)}(\eta_k) \\ &= -\frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4 f^{(4)}(\eta) \quad \eta \in [a,b] \end{aligned} \tag{3.23}$$

(c) 将区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 进行 4 等分，内分点依次记作 $x_{k+\frac{1}{4}}$，$x_{k+\frac{1}{2}}$，$x_{k+\frac{3}{4}}$，则复化 Cotes 公式为：

$$\begin{aligned} C_n =& \frac{h}{90}[7f(a) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{4}}) + 12\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) \\ &+ 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{3}{4}}) + 14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 7f(b)] \end{aligned} \tag{3.24}$$

$$R_{C_n} = I - C_n = -\frac{2(b-a)}{945}(\frac{h}{4})^6 f^{(6)}(\eta) \quad \eta \in [a, b] \tag{3.25}$$

定义：若一种复化求积公式 I_n 在 $h \to 0$ 时有渐进关系式：

$$\frac{I - I_n}{h^p} \to C(\text{C 为常数})$$

则称该求积公式 I_n 是 p 阶收敛的。

复化梯形公式：

$$\frac{I - T_n}{h^2} = -\frac{1}{12}\sum_{k=0}^{n-1} h f''(\eta_k) \xrightarrow{h\to 0} -\frac{1}{12}\int_a^b f''(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\Rightarrow \lim_{h\to 0}\frac{I - T_n}{h^2} = -\frac{1}{12}[f'(b) - f'(a)]$$

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

同理可得：$$I - S_n \approx -\frac{1}{180}(\frac{h}{2})^4[f'''(b) - f'''(a)]$$

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

表明复化梯形公式、复化 Simpson 公式和复化 Cotes 公式分别具有 2 阶、4 阶和 6 阶收敛性，若将步长减半，其误差分别为原有误差的 $\frac{1}{4}$，$\frac{1}{16}$ 和 $\frac{1}{64}$.

自适应步长的选取：为避免事先给出积分步长这一困难，实际计算时将区间逐次二分，反复利用复化求积公式计算，直至二分前后的两次积分近似值之差符合精度要求为止。

对复化梯形公式，将 $[a,b]$ 区间作 n 等分，计算 T_n 时需要 $n+1$ 个点的函数值。若将求积区间再次二分，新增 n 个节点，记区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上的新增节点为 $x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$ $(k = 0, 1, \dots, n-1)$，则该区间上的积分近似值为：

$$
\begin{aligned}
T_k &= \frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})] \\
\Rightarrow T'_k &= \frac{h}{4}[f(x_k) + 2f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})]
\end{aligned}
$$

将每个子区间上的积分近似值求和，得到递推公式：

$$
\begin{aligned}
T_{2n} &= \frac{h}{4}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k) + f(x_{k+1})] + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) \\
&= \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) \qquad (3.26)
\end{aligned}
$$

当 $f''(x)$ 在 $[a,b]$ 上变化不大时 $(\eta_n \approx \eta_{2n})$，由复化梯形公式的误差估计式得：

$$
\begin{aligned}
\frac{R_{T_n}}{R_{T_{2n}}} = \frac{I - T_n}{I - T_{2n}} &= \frac{-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta_n)}{-\frac{b-a}{12}(\frac{h}{2})^2 f''(\eta_{2n})} \approx 4 \\
\Rightarrow I - T_{2n} &\approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \text{ (误差事后估计法)} \\
\Rightarrow I &\approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \text{ (误差的补偿思想)} \\
\text{同理可得：} I &\approx S_{2n} + \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n) \\
I &\approx C_{2n} + \frac{1}{63}(C_{2n} - C_n)
\end{aligned}
$$

上式表明用 T_{2n} 作准确积分 I 的近似值时，其误差约为 $\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$，而实际计算常用的计算精度判断式：

$$
\left|T_{2n} - T_n\right| < \varepsilon \quad \text{（允许误差）}
$$

3. **Romberg 求积法**

在复化梯形公式的步长自适应选取中，根据误差的事后估计法，利用 $\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$ 作为 T_{2n} 的补偿（误差的补偿思想），可得到比 T_{2n} 更好的结果 $\tilde{T}$:

$$\tilde{T}=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n$$

经数学验证（带入展开，左右相等），有：

$$\begin{aligned} S_n &= \frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n \\ \Rightarrow\ C_n &= \frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n \\ \Rightarrow\ R_n &= \frac{64}{63}C_{2n}-\frac{1}{64}C_n \end{aligned} \tag{3.27}$$

其中式3.27 称为 **Romberg 公式**，为 Cotes 公式的线性组合。

例：用复化梯形法及自适应选取步长计算积分

$$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\,\mathrm{d}x，取\ \varepsilon=10^{-7}$$

解：定义 $f(0)=1$，计算 $f(1)=0.8414710$，则：

$$T_2^0=\frac{1}{2}[f(0)+f(1)]=0.9207355$$

将区间持续二分，直到 $\left|T_2^{10}-T_2^9\right|\leqslant\varepsilon$ 时，$T_2^{10}=0.9460831$，需要计算 $2^{10}+1$ 个点函数值，而如果按照 Romberg 方法用线性组合计算，达到相同精度仅需 2^3+1 个点函数值，计算量大大减少，数值计算结果如下表：

表 3.1: 数据表

二分次数 k	T_2^k	S_2^{k-1}	C_2^{k-2}	R_2^{k-3}
0	0.9207355			
1	0.9397933	0.9461459		
2	0.9445135	0.9460869	0.9460830	
3	0.9456909	0.9460833	0.9460831	0.9460831

Richardson 外推加速技术

Romberg 加速计算过程的理论依据是复化梯形公式可展开成如下级数形式：

Theorem 3.5. 设 $f(x) \in C^{\infty}[a,b]$，则有：

$$T(h) = I + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots + \alpha_k h^{2k} + \dots \tag{3.28}$$

其中，系数 α_k $(k = 1, 2, \dots)$ 与步长 h 无关。

根据式3.28 可得：

$$T(\frac{h}{2}) = I + \frac{\alpha_1}{4} h^2 + \frac{\alpha_2}{16} h^4 + \frac{\alpha_3}{64} h^6 + \dots \tag{3.29}$$

根据式3.28 和式3.29 可构造 $T_1(h)$ 即为复化 Simpson 公式，并经计算可知：、：

$$T_1(h) = \frac{4}{3} T(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3} T(h) = S_n \quad (Simpson) \tag{3.30}$$

$$T_1(h) = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \beta_3 h^8 + \dots \tag{3.31}$$

类似地，构造复化 Cotes 公式 $T_2(h)$：

$$T_2(h) = \frac{16}{15} T_1(\frac{h}{2}) - \frac{1}{15} T_1(h) = C_n \quad (Cotes) \tag{3.32}$$

$$T_2(h) = I + \gamma_1 h^6 + \gamma_2 h^8 + \gamma_3 h^{10} + \dots \tag{3.33}$$

同理，可构造 Romberg 公式 $T_3(h)$：

$$T_3(h) = \frac{64}{63} T_2(\frac{h}{2}) - \frac{1}{63} T_2(h) = R_n \quad (Romberg) \tag{3.34}$$

$$T_3(h) = I + \eta_1 h^8 + \eta_2 h^{10} + \eta_3 h^{12} \dots \tag{3.35}$$

如此下去，每加速一次误差的量级便提高二阶，则 Romberg 求积就具有 8 阶收敛性. 一般地，若记 $T_0(h) = T(h)$，则经过 m 次 $(m = 1, 2, \dots)$ 加速后：

$$T_m(h) = \frac{4^m}{4^m - 1} T_{m-1}(\frac{h}{2}) - \frac{1}{4^m - 1} T_{m-1}(h) \tag{3.36}$$

余项展开式为：

$$T_m(h) = I + \delta_1 h^{2(m+1)} + \delta_2 h^{2(m+2)} + \dots \tag{3.37}$$

该加速过程称为 **Richardson 外推加速技术**，其收敛性具有理论保证，实际计算时一般只加速三次（$m = 3$）已足够，当 $m \geqslant 4$ 时前一个系数接近 1，加速效果不明显。

证明. For theorem 3.28:

将 $f(x)$ 在 $[x_k, x_{k+1}]$ 区间上的中点 $x_{k+\frac{1}{2}}$ 处进行 Taylor 展开有：

$$f(x) = f_{x+\frac{1}{2}} + (x - x_{k+\frac{1}{2}})f'_{k+\frac{1}{2}} + \frac{(x - x_{k+\frac{1}{2}})^2}{2!}f''_{k+\frac{1}{2}} + \frac{(x - x_{k+\frac{1}{2}})^3}{3!}f^{(3)}_{k+\frac{1}{2}} + \cdots$$

若分别将 $f(x_k)$、$f(x_{k+1})$ 带入 Taylor 展开，可得到在区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上的积分：

$$\frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})] = hf_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2!}(\frac{h}{2})^2 f''_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h}{4!}(\frac{h}{2})^4 f^{(4)}_{k+\frac{1}{2}} + \cdots$$

进而求得：

$$T(h) = \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k) + f(x_{k+1})] = h\sum_{k=0}^{n-1} f_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h^3}{2! \times 2^2}\sum_{k=0}^{n-1} f''_{k+\frac{1}{2}} + \cdots$$

若将 Taylor 展开式先在 $[x_k, x_{k+1}]$ 上积分（注意奇函数积分）并求和，得：

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x = h\sum_{k=0}^{n-1} f_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h^3}{3! \times 2^2}\sum_{k=0}^{n-1} f''_{k+\frac{1}{2}} + \cdots$$

将 $T(h)$ 与 I 做差可消去 $h\sum_{k=0}^{n-1} f_{k+\frac{1}{2}}$ 项，得：

$$T(h) = I + \frac{h^3}{2! \times 6}\sum_{k=0}^{n-1} f''_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h^5}{4! \times 20}\sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}_{k+\frac{1}{2}} + \cdots$$

若用 $f''(x)$ 代替 $f(x)$ 进行 Taylor 展开，并在区间 $[a, b]$ 上积分，得：

$$f'(b) - f'(a) = h\sum_{k=0}^{n-1} f''_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h^3}{3! \times 2^2}\sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h^5}{5! \times 2^4}\sum_{k=0}^{n-1} f^{(6)}_{k+\frac{1}{2}} + \cdots$$

利用该式可消去 $T(h)$ 与 I 关系式中的 $h\sum_{k=0}^{n-1} f''_{k+\frac{1}{2}}$ 项，得：

$$T(h) = I + \frac{h^2}{2! \times 6}[f'(b) - f'(a)] - \frac{h^5}{4! \times 30}\sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}_{k+\frac{1}{2}} + \cdots$$

重复上述过程，可分别消去 $h\sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}_{k+\frac{1}{2}}$、$h\sum_{k=0}^{n-1} f^{(6)}_{k+\frac{1}{2}}$ 等项，即可得到式 3.28. □

3.2.3 Other Simple Integral Formula

1. 左矩形公式

$$I_L = (b-a)f(a)$$

2. 中矩形公式

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

3. 右矩形公式

$$I_R = (b-a)f(b)$$

对应余项：将 $f(x)$ 分别在 $x=a$、$x=b$、$x=\frac{a+b}{2}$ 处用 Taylor 展开：

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{f''}{2}(x_0)(x-x_0)^2 + \dots$$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)f(a) + f'(a)\int_a^b (x-a)\,\mathrm{d}x = (b-a)f(a) + \frac{f'(\xi)}{2}(b-a)^2 \ \xi \in (a,b)$$

$$\Rightarrow R_L = \frac{f'(\xi)}{2}(b-a)^2 \ \xi \in (a,b)$$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)f(b) + f'(b)\int_a^b (x-b)\,\mathrm{d}x = (b-a)f(a) - \frac{f'(\xi)}{2}(b-a)^2 \ \xi \in (a,b)$$

$$\Rightarrow R_R = -\frac{f'(\xi)}{2}(b-a)^2 \ \xi \in (a,b)$$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)f(\frac{a+b}{2}) + f'(\frac{a+b}{2})\int_a^b (x-\frac{a+b}{2})\,\mathrm{d}x + \frac{f''(\frac{a+b}{2})}{2}\int_a^b (x-\frac{a+b}{2})^2\,\mathrm{d}x$$

$$= (b-a)f(\frac{a+b}{2}) + \frac{f''(\xi)}{24}(b-a)^3 \ \xi \in (a,b)$$

$$\Rightarrow R_M = \frac{f''(\xi)}{24}(b-a)^3 \ \xi \in (a,b)$$

3.3　Gauss 型数值积分公式

考虑带权积分，并构造插值型求积公式：

$$I=\int_a^b \omega(x)f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)=\sum_{k=0}^{n}[\int_a^b \omega(x)l_k(x)\,\mathrm{d}x]f(x_k) \tag{3.38}$$

$$R=\int_a^b \omega(x)f(x)\,\mathrm{d}x-\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)=\int_a^b \omega(x)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x \tag{3.39}$$

显然，由余项可知求积公式对 $n+1$ 个点至少具有 n 次代数精度。如果将求积节点和求积系数作为代数精度，则共有 $2n+2$ 个未知数，恰当地选择这些参数可以使得公式3.3 对 $f(x)=1,x,x^2,\dots,x^{2n+1}$ 精确成立，即具有 $2n+1$ 次代数精度。

定义：若求积公式3.3 具有 $2n+1$ 次代数精度，则称公式3.3 为 **Gauss 型求积公式**，对应的求积节点 x_k $(k=0,1,\dots,n)$ 称为 Gauss 点，求积系数 A_k 称为 Gauss 系数。

Eg. 对 $\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0)+A_1 f(x_1)$，确定其求积系数 A_0,A_1 与求积节点 x_0,x_1，使其具有最高的代数精度：

$$\begin{aligned}
f(x)&=1, \quad 2=A_0+A_1\\
f(x)&=x, \quad 0=A_0x_0+A_1x_1\\
f(x)&=x^2, \ \frac{2}{3}=A_0x_0^2+A_1x_1^2\\
f(x)&=x^3, \ \ 0=A_0x_0^3+A_1x_1^3
\end{aligned}$$

从上式联立可解出四个待定参数，并且可以证明 $f(x)=x^4$ 时不成立，从而该积分公式至少具有 3 次代数精度：

Gauss 型求积公式一定是插值型求积公式，具有最高的代数精度，且当 $f(x)\in C[a,b]$ 时总是稳定和收敛的。若 $f(x)\in C^{2n+2}[a,b]$，则 Gauss 型求积公式的余项为：

$$R=\int_a^b \omega(x)f(x)\,\mathrm{d}x-\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b \omega(x)\omega_{n+1}^2(x)\,\mathrm{d}x \quad \xi\in(a,b) \tag{3.40}$$

余项的证明需要构造 $2n+1$ 次标准 Hermite 插值多项式 $H_{2n+1}(x)$，因为 Gauss 公式对其精确成立，有：

$$R=\int_a^b \omega(x)[f(x)-H_{2n+1}(x)]\,\mathrm{d}x=\int_a^b \omega(x)\frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)\,\mathrm{d}x$$

Theorem 3.6. 对于插值型求积公式的求积节点 x_k $(k=0,1,\dots,n)$ 是 *Gauss* 点的充要条件是在 $[a,b]$ 上，以这些点为零点的 $n+1$ 次多项式 $\omega_{n+1}(x)$ 与任意次数不超过 n 的多项式 $p(x)$ 关于权函数 $\omega(x)$ 正交，即

$$\int_a^b \omega(x)\omega_{n+1}(x)p(x)\,\mathrm{d}x = 0 \tag{3.41}$$

证明. 证明过程如下：

1. 必要性：取 $f(x)=\omega_{n+1}(x)p(x)$，其次数 $\leqslant 2n+1$，若节点为 Gauss 点，则其对 $2n+1$ 次的多项式精确成立，有：

$$\int_a^b \omega(x)\omega_{n+1}(x)p(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k\omega_{n+1}(x_k)p(x_k) = 0$$

2. 充分性：对任意次数 $\leqslant 2n+1$ 的多项式 $f(x)$，构造次数 $\leqslant n$ 的多项式 $p(x)$, $q(x)$ 满足：

$$f(x) = p(x)\omega_{n+1}(x) + q(x)$$

   则有：

$$\begin{aligned}\int_a^b \omega(x)f(x)\,\mathrm{d}x &= \int_a^b \omega(x)p(x)\omega_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x + \int_a^b \omega(x)q(x)\,\mathrm{d}x\\ &= \int_a^b \omega(x)q(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k q(x_k) \quad \text{(插值型至少具有 n 次代数精度)}\\ &= \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\end{aligned}$$

   因此对任意 $2n+1$ 次多项式成立，即该求积节点为 Gauss 点。

□

Gauss 型求积公式的稳定性证明：

证明. 类似 Newton-Cotes 公式的证明，只需证明其系数全为正即可。由于 Gauss 公式具有 $2n+1$ 次代数精度，因此取 $f(x)=l_k^2(x)$ 时，Gauss 公式精确成立，有：

$$\int_a^b \omega(x)l_k^2(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_i l_k^2(x_i) = A_k > 0$$

所以 Gauss 型求积公式总是稳定的 □

常见的 Gauss 型求积公式

1. **Gauss-Legendre 求积公式**

   积分区间 $[a,b]=[-1,1]$, $\omega(x)=1$，Gauss 点 x_k 为 $n+1$ 次 Legendre 多项式 $p_{n+1}(x)$ 的零点：

$$p_{n+1}(x)=\frac{1}{(n+1)!2^{n+1}}\frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}x^{n+1}}(x^2-1)^{n+1}$$

$$A_k=\int_{-1}^{1}l_k(x)\,\mathrm{d}x=\frac{2}{(1-x_k^2)[p_{n+1}'(x_k)]^2}\quad(k=0,1,\dots,n)$$

$$R=\frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3}f^{(2n+2)}(\xi)\quad\xi\in(-1,1)$$

2. **Gauss-切比雪夫求积公式**

   积分区间 $[a,b]=[-1,1]$, $\omega(x)=(1-x^2)^{-\frac{1}{2}}$，Gauss 点 x_k 为 $n+1$ 次切比雪夫多项式的零点：

$$\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}f(x)\,\mathrm{d}x\approx\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$$

$$A_k=\frac{\pi}{n+1},\quad x_k=\cos(\frac{2k+1}{2n+2}\pi)\quad(k=0,1,\dots,n)$$

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

3. **Gauss-Laguerre 求积公式**

   积分区间 $[a,b]=[0,+\infty)$, $\omega(x)=\mathrm{e}^{-x}$，Gauss 点 x_k 为 $n+1$ 次 Laguerre 多项式 $L_{n+1}(x)$ 的零点：

$$\int_{0}^{+\infty}\mathrm{e}^{-x}f(x)\,\mathrm{d}x\approx\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$$

$$L_{n+1}(x)=\mathrm{e}^{x}\frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}x^{n+1}}(x^{n+1}\mathrm{e}^{-x})$$

$$A_k=\frac{[(n+1)!]^2}{x_k[L_{n+1}'(x_k)]^2}\quad(k=0,1,\dots,n)$$

$$R=\frac{[(n+1)!]^2}{(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\xi)\quad\xi\in[0,+\infty)$$

4. **Gauss-Hermite 求积公式**

积分区间 $(-\infty, +\infty)$，$\omega(x) = \mathrm{e}^{-x^2}$，Gauss 点 x_k 为 $n+1$ 次 Hermite 多项式 $H_{n+1}(x)$ 的零点：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-x^2} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

$$H_{n+1}(x) = (-1)^{n+1}\mathrm{e}^{x^2} = \frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}x^{n+1}}(e^{-x^2})$$

$$A_k = \frac{2^{n+2}(n+1)!}{[H'_{n+1}(x_k)]^2}\sqrt{\pi} \quad (k = 0, 1, \ldots, n)$$

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

3.4　数值微分

数值微分即研究通过已知函数值来表示函数导数的方法。

3.4.1　Taylor 级数展开法

$f'(x_0)$ 可以通过 Taylor 级数展开获得类似差商的近似估计计算公式：

$$
\begin{aligned}
&f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(\xi)\\
\Rightarrow\ &f'(x_0)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}+O(h)\\
\Rightarrow\ &f'(x_0)\approx\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}\\
&f'(x_0)\approx\frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}\\
&f'(x_0)\approx\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}
\end{aligned}
$$

该方法并不是 h 越小越好，当 h 特别小时，容易导致分子上两个很接近的数相减，进而造成有效数字的严重损失。为了克服 Taylor 展开的缺陷，利用外推方法来提高精度，根据 Taylor 展开有：

$$
f(x_0\pm h)=f(x_0)\pm hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(x_0)\pm\frac{h^3}{3!}f'''(x_0)+\frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x_0)\pm\cdots
$$

$$
\Rightarrow G(h)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}=f'(x_0)+[\frac{h^2}{3!}f^{(3)}(x_0)+\frac{h^4}{5!}f^{(5)}(x_0)+\frac{h^6}{7!}f^{(7)}(x_0)+\cdots]
$$

类似数值积分的 Richardson 外推，可建立如下外推方法：

$$
\begin{cases}
G_1(h)=G(h)\\
G_{m+1}(h)=\dfrac{4^mG_m(\frac{h}{2})-G_m(h)}{4^m-1} & m=1,2,\ldots
\end{cases}
\tag{3.42}
$$

外推 m 次之后 $f'(x)$ 的余项:

$$
f'(x_0)-G_{m+1}(h)=O(h^{2(m+1)})
$$

3.4.2 数值微分的隐格式

微分是积分的逆运算，从而可将数值微分问题转化为数值积分问题，如对区间 $[a,b]$ 进行 n 等分，节点 $x_k = a + kh\ (k = 1,2,\dots,n)$, $h = \dfrac{b-a}{n}$，由于：

$$f(x_{k+1}) - f(x_{k-1}) = \int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} f'(x)\,\mathrm{d}x \quad (k = 1,2,\dots,n-1)$$

对右端进行 Simpson 积分：

$$f(x_{k+1}) - f(x_{k-1}) \approx \frac{h}{3}[f'(x_{k-1}) + 4f'(x_k) + f'(x_{k+1})] \quad (k = 1,2,\dots,n-1)$$

记 $m_k \approx f'(x_k)$，给定边界 $m_0 = f'(x_0)$, $m_n = f'(x_n)$，则有含 $n-1$ 个未知数的 $n-1$ 个方程组成的方程组，其系数矩阵严格对角占优，因而存在唯一解。此方程组称为**数值微分的隐格式**，如下：

$$\begin{cases} m_{k-1} + 4m_k + m_{k+1} = \dfrac{3}{h}[f(x_{k+1}) - f(x_{k-1})] \quad (k = 1,2,\dots,n-1) \\ m_0 = f'(x_0) \\ m_n = f'(x_n) \end{cases} \tag{3.43}$$

3.4.3 插值型求导公式

1. **基于 Lagrange 插值的方法**

构造 Lagrange 插值并求一阶导数：

$$f(x) = L_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \quad \xi \in (x_0, x_n)$$

$$\Rightarrow f'(x) = L_n'(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)' + \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f^{(n+1)}(\xi)$$

由于对 $f^{(n+1)(\xi)}$ 的导数无法作估计，利用节点处 $\omega_{n+1}(x_k) = 0$ 限定求 x_k 处的导数：

$$f'(x_k) - L_n'(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x_k)' \tag{3.44}$$

若 $\left|f'(x)\right| \leqslant M$, $x \in (a,b)$，则：

$$\left|f'(x_k) - L_n'(x_k)\right| \leqslant M\frac{(b-a)^n}{(n+1)!} \xrightarrow{n\to\infty} 0 \quad \Rightarrow \quad f'(x_k) \approx L_n'(x_k)$$

基于 Lagrange 插值方法的等距节点处常用数值微分公式:

(a) 一阶两点公式（$n=1$）

$$f'(x_0)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]-\frac{h}{2}f''(\xi_1)\quad \xi_1\in(x_0,x_1) \tag{3.45}$$

$$f'(x_1)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]+\frac{h}{2}f''(\xi_2)\quad \xi_2\in(x_0,x_1) \tag{3.46}$$

(b) 一阶三点公式（$n=2$）

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)]+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_1)\qquad \xi_1\in(x_0,x_2) \tag{3.47}$$

$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_2)\qquad \xi_2\in(x_0,x_2) \tag{3.48}$$

$$f'(x_2)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_3)\qquad \xi_3\in(x_0,x_2) \tag{3.49}$$

(c) 二阶三点公式（$n=2$）, 其中 $\xi_i\in(x_0,x_2)$ $(i=1,2,\ldots,5)$.

$$f'(x_0)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]-hf^{(3)}(\xi_1)+\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_2) \tag{3.50}$$

$$f'(x_1)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_3) \tag{3.51}$$

$$f'(x_2)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]+hf^{(3)}(\xi_4)-\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_5) \tag{3.52}$$

2. 基于三次样条插值的方法

由估计式 $||f^{(k)}(x)-s^{(k)}(x)||_\infty\leqslant C_kh^{4-k}||f^{(4)}(x)||_\infty$ $(k=0,1,2,3)$ 有：

$$f^{(k)}(x)\approx s^{(k)}(x)\quad (k=0,1,2,3) \tag{3.53}$$

在等距节点条件下，记 $m_k=S_\prime(x_k)$，并给定边界条件 $m_0=f'(x_0)$, $x_n=f'(x_n)$，则解如下方程组可得到 m_k 作为 $f'(x_k)$ 的近似值：

$$m_{k-1}+4m_k+m_{k+1}=\frac{3}{h}(y_{k+1}-y_{k-1}) \tag{3.54}$$

基于 Lagrange 插值的方法只能求节点处的近似微分值，而基于三次样条插值的方法可以用来求插值范围内任意 x（包含节点）处的近似微分。

第四章　解线性方程组-直接法

4.1　Gauss 消去法

对线性代数方程组：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

其中，系数矩阵 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n\times n}$ 非奇异，$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$，右端项 $\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T$。

Gauss 消去法的基本思想是将方程组转化为上三角形方程组，然后进行求解，包括**消元**和**回代**两大过程：

1. **消元过程**：记初始方程组为 $\boldsymbol{A}^{(1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(1)}$，用第一行方程与剩下每行方程分别做线性运算消去第 2 至 n 行的方程中的 x_1 项，得到 $\boldsymbol{A}^{(2)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(2)}$：

$$\begin{aligned} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)} &= b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n &= b_2^{(2)} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n2}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(2)}x_n &= b_n^{(2)} \end{aligned}$$

然后用第二行与剩下 3 至 n 行分别做线性运算消去方程中的 x_2 项，得到 $\boldsymbol{A}^{(3)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(3)}$；以此类推，完成第 $n-1$ 步后得到上三角矩阵 $\boldsymbol{A}^{(n)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(n)}$：

$$\begin{aligned} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{1n}^{(1)} &= b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n &= b_2^{(2)} \\ a_{33}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{3n}^{(3)}x_n &= b_2^{(3)} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{nn}^{(2)}x_n &= b_n^{(n)} \end{aligned}$$

该过程的求解公式如下：

$$\begin{cases} l_{ik} &= a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} \quad (i = k+1, k+2, \dots, n) \\ a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ij}^{(k)} - l_{ik}a_{kj}^{(k)} \quad (i, j = k+1, k+2, \dots, n) \\ b_i^{(k+1)} &= b_i^{(k)} - l_{ik}b_k^{(k)} \quad (i = k+1, k+2, \dots, n) \end{cases} \tag{4.1}$$

2. **回代过程**：当 $a_{nn}^{(n)} \neq 0$ 时，从下往上代入方程求解即可，该上三角方程组的求解公式如下：

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)}/a_{nn}^{(n)} \\ x_k = [b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)}x_j]/a_{kk}^{(k)} \quad (k = n-1, n-2, \dots, 1) \end{cases} \tag{4.2}$$

Gauss 消去法的运算量比 Gramer 法则解方程组小得多，实现这一过程的充要条件是主元素 $a_{ii}^{(i)} \neq 0$ $(i = 1, 2, \dots, n-1)$。这一条件与原方程组的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的联系有如下定理：

Theorem 4.1. 主元素 $a_{ii}^{(i)} \neq 0$ $(i = 1, 2, \dots, n-1)$ 的充要条件是矩 $\boldsymbol{A}$ 的顺序主子式 $\boldsymbol{D}_i \neq 0$ $(i = 1, 2, \dots, k;\ k \leqslant 0)$.

该定理可用数学归纳法证明，其中顺序主子式 $\boldsymbol{D}_k$ 的定义：

$$\boldsymbol{D}_k = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)}a_{22}^{(2)}\cdots a_{kk}^{(k)} \tag{4.3}$$

并有如下**推论**：

若 $\boldsymbol{A}$ 的顺序主子式 $\boldsymbol{D}_i \neq 0$ $(i = 1, 2, \dots, n-1)$，则：

$$a_{11}^{(1)} = \boldsymbol{D}_1$$

$$a_{kk}^{(k)} = \frac{\boldsymbol{D}_k}{\boldsymbol{D}_{k-1}} \quad (k = 2, 3, \dots, n)$$

所以，Gauss 消元过程完成 $\Leftrightarrow$ $a_{ii}^{(i)} \neq 0$ $\Leftrightarrow \boldsymbol{D}_i \neq 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n)$.

4.2 主元素消元法

Gauss 消元过程中，要求主元 $a_{ii}^{(i)} \neq 0 \ (i = 1, 2, \ldots, n)$，当主元相对很小时，以它为除数会导致其他元素数量级的巨大增长，舍入误差就会扩散，导致计算结果严重失真。主元素消元法针对此问题进行改进，全部或部分地选取绝对值最大的元素为主元素，使之成为一种有效（稳定）的算法。

4.2.1 全主元素消元法

在每一步消元进行前，将系数矩阵中绝对值最大的元素通过交换行、列移动到消元行的首位，再进行消元。如在第一步消元进行前，在整个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 中选取绝对值最大的元素作为主元：

$$\left|a_{i_1,j_1}\right| = \max_{1 \leqslant i,j \leqslant n} \left|a_{ij}\right| \neq 0$$

将 a_{i_1,j_1} 换到第一行第一列，然后进行消元；第二步消元前将除第一行外的所有元素中绝对值最大的元素交换到第二行第二列位置，再进行消元，重复至 $n-1$ 步得：

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

从而避免了舍入误差。这里的 $y_1, y_2, \ldots, y_n$ 为 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ 的某一个排列，因为进行了列交换。

4.2.2 列主元素消元法

列主元素消元法只在每一列选取绝对值最大的元素作为主元（只交换行），减小了计算量也能保证同样的效果，并且由于没有列的交换，所以 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ 的顺序也没有发生变化：

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

4.3 矩阵三角解法

4.3.1 Doolittle 分解（LU 分解）

Gauss 消元法的过程完成了矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个三角分解：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U} \tag{4.4}$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 为下三角矩阵，$\boldsymbol{U}$ 为上三角矩阵，若 n 阶矩阵 A 的顺序主子式 $D_i \neq 0\ (i = 1, 2, \ldots, n-1)$，则该分解唯一。若 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则 $\boldsymbol{U}$ 也非奇异。其详细过程如下：

消元的第一步等同于将系数矩阵 $\boldsymbol{A}$（$\boldsymbol{A}^{(1)}$）和 $\boldsymbol{b}$（$\boldsymbol{b}^{(1)}$）左乘一个初等变换矩阵：

$$\boldsymbol{A}^{(2)} = \boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{A}^{(1)},\quad \boldsymbol{b}^{(2)} = \boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{b}^{(1)},\quad \boldsymbol{L}_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -l_{21} & 1 & & & \\ -l_{31} & 0 & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ -l_{n1} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix},\quad l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\ (i = 2, 3, \ldots, n)$$

如此进行 $n-1$ 步后得到：

$$\begin{cases} \boldsymbol{L}_{n-1}^{-1}\boldsymbol{L}_{n-2}^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_2^{-1}\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{A}^{(n)} = \boldsymbol{U} \\ \boldsymbol{L}_{n-1}^{-1}\boldsymbol{L}_{n-2}^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_2^{-1}\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}^{(n)} \end{cases}$$

记 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{L}_2\ldots\boldsymbol{L}_n$，则有 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{A}$，具体形式为：

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

则 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 可转化为两个三角形方程求解（行列交替进行）：

$$\begin{cases} \boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \end{cases},\quad \begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_i = b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} l_{ij}y_j \end{cases},\quad \begin{cases} x_n = y_n/u_{nn} \\ x_i = (y_i - \sum\limits_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j) \end{cases} \tag{4.5}$$

补充：$\boldsymbol{LU}$ 分解具有唯一性 $\Leftrightarrow D_i \neq 0\ (i = 1, 2, \ldots, n-1)$

Eg.1

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 4 \\ 3 & 5 & 6 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \boldsymbol{D}_1 = 1,\ \boldsymbol{D}_2 = 0$$

将 $\boldsymbol{A}$ 消元一次：

$$\boldsymbol{A}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & -1 & -3 \end{bmatrix}$$

其 $\boldsymbol{LU}$ 分解不存在。

Eg.2

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 4 \\ 3 & 6 & 6 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \boldsymbol{D}_1 = 1,\ \boldsymbol{D}_2 = 0$$

将 $\boldsymbol{A}$ 消元一次：

$$\boldsymbol{A}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & -3 \end{bmatrix} = \boldsymbol{U}$$

其 $\boldsymbol{LU}$ 分解存在但不唯一。

Eg.3

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 6 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \boldsymbol{D}_1 = 1,\ \boldsymbol{D}_2 = -1$$

将 $\boldsymbol{A}$ 消元：

$$\boldsymbol{A} \xrightarrow{\text{消元 1 次}} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & -2 & -3 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{消元 2 次}} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{U}$$

其 $\boldsymbol{LU}$ 分解存在且唯一.

4.3.2 列主元素三角分解法

为了避免计算出的 u_{ii} 相对较小而放大舍入误差，在计算 u_{ii} 时先寻找绝对值最大的元作为主元再分解计算。

Theorem 4.2. 对非奇异矩阵 $\boldsymbol{A}$，存在排列阵 $\boldsymbol{P}$，以及元素绝对值不大于 *1* 的单位下三角阵 $\boldsymbol{L}$ 和上三角阵 $\boldsymbol{U}$，使得：

$$\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{LU}$$

4.3.3 平方根法

Theorem 4.3. 若 n 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对称正定，则有唯一分解：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LDL}^T \tag{4.6}$$

其中，$\boldsymbol{L}$ 为单位下三角矩阵，$\boldsymbol{D}$ 为对角阵且对角元素全大于 *0*.

证明. 由 $\boldsymbol{A}$ 对称正定可知，$\boldsymbol{D}_i$ 全大于 0，对 $\boldsymbol{U}$ 进行分解，有：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12}/u_{11} & \cdots & u_{1n}/u_{11} \\ & 1 & \cdots & u_{2n}/u_{22} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix} \equiv \boldsymbol{LDU}_0$$

由 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T$ 得：

$$\boldsymbol{LDU}_0 = \boldsymbol{U}_0^T \boldsymbol{DL}^T$$

由于 $\boldsymbol{LU}$ 分解具有唯一性，所以：

$$\boldsymbol{U}_0^T = \boldsymbol{L}, \quad \boldsymbol{L}^T = \boldsymbol{U}_0$$

故 $\boldsymbol{A}$ 有唯一分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LDL}^T$. □

若取 $\overline{\boldsymbol{D}} = \mathrm{diag}(\sqrt{u_{11}}, \sqrt{u_{22}}, \dots, \sqrt{u_{nn}})$，则：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\overline{\boldsymbol{D}}^2 \boldsymbol{L}^T = (\boldsymbol{L}\overline{\boldsymbol{D}})(\boldsymbol{L}\overline{\boldsymbol{D}})^T \equiv \boldsymbol{GG}^T$$

其中 $\boldsymbol{G}$ 为下三角矩阵，这种分解称为对称正定矩阵的**平方根分解（Cholesky 分解）**

Theorem 4.4. 若 n 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对称正定，则有如下分解：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T \tag{4.7}$$

其中 $\boldsymbol{G}$ 为下三角阵。若规定 $\boldsymbol{G}$ 的对角元为正，则该分解唯一。

记 $\boldsymbol{G} = (g_{ij})_{n\times n}$，则平方根分解算法如下：对 $k = 1, 2, \ldots, n$，有：

$$\begin{cases} a_{kk} \leftarrow g_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum\limits_{j=1}^{k-1} g_{kj}^2} \\ a_{kj} \leftarrow g_{kj} = \dfrac{a_{kj} - \sum\limits_{i=1}^{j-1} g_{ki}g_{ji}}{g_{jj}} \quad (k = j+1, j+2, \ldots, n) \end{cases} \tag{4.8}$$

Theorem 4.5. 若线性代数方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对称正定，则用平方根法进行求解是稳定的。

4.3.4 三对角方程组的追赶法

在建立三次样条插值函数、求微分方程数值解等问题中，常遇到三对角方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{g}$：

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{n-1} \\ g_n \end{bmatrix} \tag{4.9}$$

系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ **严格对角占优**，即满足每一行的主元的绝对值大于该行其他元素绝对值之和：

$$\begin{cases} |b_1| > |c_1| \\ |b_i| > |a_i| + |c_i| \qquad (i = 1, 2, \ldots, n-1) \\ |b_n| > |a_n| \end{cases} \tag{4.10}$$

则 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{g}$ 存在唯一解。

利用 $\boldsymbol{LU}$ 分解：

$$
\begin{bmatrix}
b_1 & c_1 & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & a_n & b_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
1 & & & \\
l_2 & 1 & & \\
 & \ddots & \ddots & \\
 & & l_n & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
u_1 & d_1 & & & \\
 & u_2 & d_2 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & \ddots & d_{n-1} \\
 & & & & u_n
\end{bmatrix}
$$

根据矩阵乘法记矩阵相等可得分解的计算公式：

$$
\begin{cases}
d_i = c_i \quad (i = 1, 2, \dots, n-1) \\
u_1 = b_1 \\
l_i = a_i/u_{i-1},\ u_i = b_i - l_i d_{i-1} \quad (i = 2, 3, \dots, n)
\end{cases}
\tag{4.11}
$$

从而原将方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{g}$ 转化为求解方程组 $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{g}$ 和 $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$，即：

$$
\begin{cases}
y_1 = g_1 \\
y_i = g_i - l_i y_{i-1} \quad (i = 2, 3, \dots, n)
\end{cases}
\tag{4.12}
$$

$$
\begin{cases}
x_n = \dfrac{y_n}{u_n} \\
x_i = \dfrac{y_i - c_i x_{i+1}}{u_i} \quad (i = n-1, \dots, 1)
\end{cases}
\tag{4.13}
$$

求解式 (4.11)、式 (4.12) 和式 (4.13) 的方法称为**追赶法**（**Thomas 方法**）。

4.4 向量范数、矩阵范数、条件数

范数是为了度量向量和矩阵的尺度，例如在一维上用绝对值 $\left|x-x_0\right|$ 的大小度量 $x \to x_0$，是欧氏空间中向量长度的推广，为下一章研究 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的解对 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的敏感性以及迭代法求解的收敛性和迭代解的误差估计等问题。

4.4.1 向量范数、矩阵范数、谱半径

1. **Def:** 对任一向量 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\dots,x_n)^T \in \mathbf{R}$，对应一个实值函数 $N(\boldsymbol{x})=\|\boldsymbol{x}\|$，若满足下列性质：

   (a) $\|\boldsymbol{x}\| \geqslant 0,\ \|\boldsymbol{x}\|=0 \Leftrightarrow \boldsymbol{x}=\boldsymbol{0} \in \mathbf{R}^n$（正定性）

   (b) $\forall \alpha \in \mathbf{R},\ \|\alpha\boldsymbol{x}\|=|\alpha|\|\boldsymbol{x}\|$（齐次性）

   (c) $\forall \boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\dots,y_n)^T \in \mathbf{R}^n,\ \|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|$（三角不等式）

   则称 $N(\boldsymbol{x})=\|\boldsymbol{x}\|$ 为**向量 $\boldsymbol{x}$ 的范数**.

   $\mathbf{R}^n$ 中常见的几种范数有：

$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n}|x_i| \quad \text{(1-范数)} \tag{4.14}$$

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = (\sum_{i=1}^{n}x_i^2)^{\frac{1}{2}} \quad \text{(2-范数)} \tag{4.15}$$

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n}\{|x_i|\} \quad (\infty\text{-范数}) \tag{4.16}$$

   向量范数的等价性：设 $\|\cdot\|_s$，$\|\cdot\|_t$ 为 $\mathbf{R}^n$ 上向量 $\boldsymbol{x}$ 的任意两种范数，则存在与 $\boldsymbol{x}$ 无关的常数 $m, M>0$ 使得:

$$m\|\boldsymbol{x}\|_s \leqslant \|\boldsymbol{x}\|_t \leqslant M\|\boldsymbol{x}\|_s, \quad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n. \tag{4.17}$$

   def: 设 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 为 $\mathbf{R}^n$ 中一向量序列，$\boldsymbol{x}^* \in \mathbf{R}^n$，若：

$$\lim_{k\to\infty} x_j^{(k)} = x_j^* \quad (j=1,2,\dots,n)$$

   则称向量序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 收敛于 $\boldsymbol{x}^*$，并有如下 **th** 成立：

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

2. **Def：** 若矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbf{R}^{n\times n}$ 的非负实值函数 $N(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|$ 满足以下条件：

(a) $\|\boldsymbol{A}\| \geqslant 0,\ \|\boldsymbol{A}\| = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{A} = \boldsymbol{0} \in \mathbf{R}^{n\times n}$（正定性）

(b) $\forall \alpha \in \mathbf{R},\ \|\alpha\boldsymbol{A}\| = |\alpha|\|\boldsymbol{A}\|$（齐次性）

(c) $\forall\ \boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathbf{R}^{n\times n},\ \|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}\| + \|\boldsymbol{B}\|$（三角不等式）

(d) $\forall\ \boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathbf{R}^{n\times n},\ \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{B}\|$

则称 $N(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|$ 为**矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的范数**.

$\mathbf{R}^{n\times n}$ 中常见的几种范数有：

$$\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}| \quad (\boldsymbol{A}\text{ 的列范数}) \tag{4.18}$$

$$\|\boldsymbol{A}\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}| \quad (\boldsymbol{A}\text{ 的行范数}) \tag{4.19}$$

$$\|\boldsymbol{A}\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})} \quad (\boldsymbol{A}\text{ 的谱范数}) \tag{4.20}$$

$$\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}} = (\sum_{i,j=1}^{n}a_{ij}^2)^{\frac{1}{2}} \quad (\boldsymbol{A}\text{ 的 F 范数}) \tag{4.21}$$

其中 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n\times n}$，$\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})$ 为 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的最大特征值。

向量和矩阵范数的相容性：

$$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_s \leqslant \|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{x}\|_s \quad \forall\boldsymbol{A} \in \mathbf{R}^{n\times n}, x \in \mathbf{R}^n$$

def： 设 $\{\boldsymbol{A}^{(k)}\}$ 为 $\mathbf{R}^{n\times n}$ 中的矩阵序列，$\boldsymbol{A} \in \mathbf{R}^{n\times n}$，若：

$$\lim_{k\to\infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij} \quad (i, j = 1, 2, \ldots, n)$$

则称向量序列 $\{\boldsymbol{A}^{(k)}\}$ 收敛于 $\boldsymbol{A}$，并有如下 **th** 成立：

$$\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{A} \Leftrightarrow \lim_{k\to\infty}\|\boldsymbol{A}^{(k)} - \boldsymbol{A}\| = 0$$

3. **Def:** 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbf{R}^{n\times n}$ 的特征值为 λ_i $(i = 1, 2, \ldots, n)$，定义矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**谱半径**为：

$$S(\boldsymbol{A}) = \max_{1\leqslant i\leqslant n}\{|\lambda_i|\}$$

根据特征值 $\boldsymbol{Ax} = \lambda\boldsymbol{x}$ 知 $|\lambda|\ \|\boldsymbol{x}\| = \|\boldsymbol{Ax}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{x}\|$，且 $\boldsymbol{x} \neq 0$，所以：

$$S(\boldsymbol{A}) \leqslant \|\boldsymbol{A}\|$$

Th: 设任意 n 阶矩阵 $\boldsymbol{F}$ 满足 $\|\boldsymbol{F}\| < 1$，则 $\boldsymbol{I} \pm \boldsymbol{F}$ 非奇异（$\boldsymbol{I}$ 为单位矩阵），且：

$$\|(\boldsymbol{I} \pm \boldsymbol{F})\| \leqslant \frac{1}{1 - \|\boldsymbol{F}\|}$$

Th: 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbf{R}^{n\times n}$，由 $\|\boldsymbol{A}\|$ 的各次幂所组成的矩阵序列：

$$\boldsymbol{A}^0, \boldsymbol{A}, \boldsymbol{A}^2, \cdots, \boldsymbol{A}^k, \cdots$$

其中 $\boldsymbol{A}^0 = \boldsymbol{I}$，该序列收敛于零矩阵（即 $\lim\limits_{k\to\infty} \boldsymbol{A}^k = 0$）的充要条件为：

$$S(\boldsymbol{A}) < 1$$

4.4.2 矩阵条件数及方程组性态 *

略

第五章　解线性方程组-迭代法

迭代法的基本思想是对方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，构造一个迭代向量序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$，使其收敛于方程组的解向量 $\boldsymbol{x}^*$，然后分析其收敛性和误差。本章节均为**单点线性迭代**，形式为：

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{f} \tag{5.1}$$

5.1　Jacobi 迭代法

5.1.1　迭代构造

Jacobi 迭代法又称简单迭代法，将原方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 改写成等价形式（假定 $\boldsymbol{A}$ 非奇异）：

$$\begin{cases} x_1= \qquad\quad b_{12}x_2+b_{13}x_3+\cdots+b_{1n}x_n+g_1 \\ x_2=b_{21}x_1 \qquad\quad +b_{23}x_3+\cdots+b_{2n}x_n+g_2 \\ \cdots\cdots\cdots \\ x_n=b_{n1}x_1+b_{n2}x_2+\cdots+b_{nn-1}x_{n-1} \qquad +g_n \end{cases} \Rightarrow \boldsymbol{x}=\boldsymbol{Bx}+\boldsymbol{g} \tag{5.2}$$

其中：

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 0 & b_{12} & b_{13} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & 0 & b_{23} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & b_{n3} & \cdots & 0 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{I}=\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \cdots \\ g_n \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{D}=\begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix}$$

对任一初始迭代向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$，由公式：

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{Bx}^{(k)}+\boldsymbol{g} \quad (k=1,2,\cdots) \tag{5.3}$$

由此作出向量序列 $\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(2)},\cdots$ 的方法称为 **Jacobi 迭代法**，$\boldsymbol{B}$ 称为 Jacobi 矩阵。

5.1.2 收敛性

设 $\boldsymbol{x}^*$ 为该方程准确解，收敛性 $\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$ 的判断条件为：

1. $S(\boldsymbol{B}) < 1 \ \Leftrightarrow$ Jacobi 迭代法收敛
2. $\|\boldsymbol{B}\| < 1 \ \Rightarrow$ Jacobi 迭代法收敛，$\|\boldsymbol{B}\|$ 为 $\boldsymbol{B}$ 任意范数，此时有：
   (a)
   $$\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\| \leqslant \frac{\|\boldsymbol{B}\|^k}{1 - \|\boldsymbol{B}\|}\|\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{x}^{(0)}\| \tag{5.4}$$
   (b) 此处亦为误差的事后估计：
   $$\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\| \leqslant \frac{\|\boldsymbol{B}\|}{1 - \|\boldsymbol{B}\|}\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}\| \tag{5.5}$$

证明. 上述二个收敛条件的证明如下：

1. 收敛条件 1：
   (a) "⇒": 假定 $S(\boldsymbol{B}) < 1$，根据范数的定理知 $\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B}$ 非奇异，则方程组 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{g}$ 有唯一解 $\boldsymbol{x}^*$，又因为：
   $$\begin{cases} \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{g} \\ \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k-1)} + \boldsymbol{g} \end{cases} \Rightarrow \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}^{(k-1)} - \boldsymbol{x}^*)$$
   从而：
   $$\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{B}^k(\boldsymbol{x}^{(0)} - \boldsymbol{x}^*)$$
   $$\because S(\boldsymbol{B}) < 1 \quad \therefore \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{B}^k = \boldsymbol{0}$$
   $$\therefore \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$$
   (b) "⇐": 由 Jacobi 迭代法收敛可知：
   $$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^* \quad \therefore \lim_{k\to\infty}(\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{B}^k(\boldsymbol{x}^{(0)} - \boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$$
   $$\because \boldsymbol{x}^{(0)} \neq \boldsymbol{x}^* \quad \therefore \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{B}^k = \boldsymbol{0} \quad \Rightarrow \quad \lambda_i = 0 \quad \Rightarrow \quad S(\boldsymbol{B}) < 1$$

2. 收敛条件 2：因为 $\|\boldsymbol{B}\| < 1$，所以 $S(\boldsymbol{B}) \leqslant \|\boldsymbol{B}\| < 1$，所以 Jacobi 迭代法收敛。因为 $\lim\limits_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$，从而：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^* &= \sum_{j=k}^{\infty}(\boldsymbol{x}^{(j)} - \boldsymbol{x}^{(j+1)}) \\
\Rightarrow \quad \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\| &\leqslant \sum_{j=k}^{\infty} \|\boldsymbol{x}^{(j)} - \boldsymbol{x}^{(j+1)}\| = \sum_{j=k}^{\infty} \|\boldsymbol{x}^{(j+1)} - \boldsymbol{x}^{(j)}\| \\
&\leqslant (\sum_{j=k}^{\infty} \|\boldsymbol{B}\|^j)\ \|\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{x}^{(0)}\| \\
&= \frac{\|\boldsymbol{B}\|^k}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\ \|\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{x}^{(0)}\| \quad \text{等比数列求和}
\end{aligned}
$$

又因为 $\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{g}$，$\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k-1)} + \boldsymbol{g}$，所以：

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k-1)} + (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B})\boldsymbol{x}^* \\
&\Rightarrow (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B})(\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}^{(k-1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}) \\
&\Rightarrow \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^* = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}^{(k-1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}) \\
&\Rightarrow \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\| \leqslant \frac{\|\boldsymbol{B}\|}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\ \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}\|
\end{aligned}
$$

□

5.2 Gauss-Seidel 迭代法

5.2.1 迭代构造

在 Jacobi 迭代时，需要保留两个向量 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(k)}$，迭代的形式为：

$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} = \phantom{b_{21}x_1^{(k)} +{}} b_{12}x_2^{(k)} + b_{13}x_3^{(k)} + \cdots + b_{1n}x_n^{(k)} + g_1 \\
x_2^{(k+1)} = b_{21}x_1^{(k)} \phantom{+ b_{12}x_2^{(k)}} + b_{23}x_3^{(k)} + \cdots + b_{2n}x_n^{(k)} + g_2 \\
\cdots\cdots\cdots \\
x_n^{(k+1)} = b_{n1}x_1^{(k)} + b_{n2}x_2^{(k)} + \cdots + b_{nn-1}x_{n-1}^{(k)} + g_n
\end{cases}
\Rightarrow \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{g} \tag{5.6}
$$

在迭代到一定步数 i 后，$x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_{i-1}^{(k+1)}$ 要比 $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$ 精度更高，因此进行替换，迭代形式为：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \qquad b_{12}x_2^{(k)} + b_{13}x_3^{(k)} + \cdots + b_{1n}x_n^{(k)} + g_1 \\ x_2^{(k+1)} = b_{21}x_1^{(k+1)} \qquad + b_{23}x_3^{(k)} + \cdots + b_{2n}x_n^{(k)} + g_2 \\ \cdots\cdots\cdots \\ x_n^{(k+1)} = b_{n1}x_1^{(k+1)} + b_{n2}x_2^{(k+1)} + \cdots + b_{nn-1}x_{n-1}^{(k+1)} \qquad + g_n \end{cases} \Rightarrow \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{x}^{(k+1)} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{g} \tag{5.7}$$

此即为 **Gauss-Seidel 迭代法**，其中，$\boldsymbol{L}$ 为下三角矩阵，$\boldsymbol{U}$ 为上三角矩阵:

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{nn-1} & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} 0 & b_{13} & \cdots & b_{1n} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & b_{n-1n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

可将其改写成单点线性迭代形式：

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}^{(k)} + (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{g} \tag{5.8}$$

5.2.2 收敛性

Gauss-Seidel 方法收敛性的判断条件为：

1. $\boldsymbol{S}((\boldsymbol{I} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}) < 1$ $\Leftrightarrow$ Gauss-Seildel 迭代法收敛
2. $\|\boldsymbol{B}\|_1 < 1$ $\Rightarrow$ Gauss-Seidel 迭代法收敛
3. $\|\boldsymbol{B}\|_\infty < 1$ $\Rightarrow$ Gauss-Seidel 迭代法收敛，此时记：

$$\mu = \frac{\max_i(\sum_{j=i}^{n} |b_{ij}|)}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} |b_{ij}|}$$

则有：

$$\mu \leqslant \|\boldsymbol{B}\|_\infty < 1 \tag{5.9}$$

$$\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\| \leqslant \frac{\mu^k}{1-\mu}\|\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{x}^{(0)}\| \tag{5.10}$$

5.3 超松弛迭代法

5.3.1 迭代构造

超松弛迭代法（Successive Over Relaxation）类似 Richardson 加速外推，是对 Gauss-Seidel 迭代法的一种加速方法，是解大型稀疏矩阵的有效方法之一，其构造的形式如下：

$$\begin{cases} \tilde{x}_i^{(k+1)} = \sum\limits_{j=1}^{i-1} b_{ij}x_j^{(k+1)} + \sum\limits_{j=i+1}^{n} b_{ij}x_j^{(k)} + g_i \\ x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega(\tilde{x}_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}) \end{cases} \qquad (i = 1, 2, \ldots, n \quad \omega \in \mathbf{R})$$

其中 ω 称为**超松弛因子**，当 $\omega = 1$ 时即为 Gauss-Seidel 迭代，消去中间量 $\tilde{x}_i^{(k+1)}$ 得：

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)\,x_i^{(k)} + \omega\,(\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^{n} b_{ij}x_j^{(k)} + g_i)$$

SOR 迭代方法的向量形式迭代公式为：

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (1-\omega)\,\boldsymbol{x}^{(k)} + \omega\,(\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}^{(k+1)} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{g})$$

SOR 迭代方法的单点线性迭代形式为：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}^{(k+1)} &= (\boldsymbol{I} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}[(1-\omega)\boldsymbol{I} + \omega\boldsymbol{U}]\boldsymbol{x}^{(k)} + \omega(\boldsymbol{I} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{g} \\ &\triangleq \mathscr{L}_\omega\boldsymbol{x}^{(k)} + \omega(\boldsymbol{I} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{g} \end{aligned} \tag{5.11}$$

5.3.2 收敛性

1. $S(\mathscr{L}_\omega) < 1 \Leftrightarrow$ SOR 迭代方法收敛

Theorem 5.3.1. 对 $\forall \omega \in \mathbf{C}$:

$$S(\mathscr{L}_\omega) \geqslant |\omega - 1|$$

当 $\omega \in \mathbf{R}$，并且 *SOR* 方法收敛时，有：

$$0 < \omega < 2$$

J 方法、GS 方法和 SOR 方法收敛的矩阵 A 补充条件

Definations:

1. 设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为 n 阶方阵 $(n \geqslant 2)$，若存在 n 阶排列阵 $\boldsymbol{P}$，使得：

$$\boldsymbol{PAP}^T = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \\ 0 & \boldsymbol{A}_{13} \end{bmatrix}$$

成立，其中 $\boldsymbol{A}_{11}$ 为 r 阶方阵，$\boldsymbol{A}_{22}$ 为 $n-r$ 阶方阵，则称 $\boldsymbol{A}$ 为**可约矩阵**；若不存在排列阵 $\boldsymbol{P}$，则称 $\boldsymbol{A}$ 为**不可约矩阵**。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不可约的**充分条件**：

   (a) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 中没有 0 元；
   (b) 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 不可约，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 中 0 元位置与 $\boldsymbol{B}$ 相同；
   (c) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的阶数 $n \geqslant 3$，且只有 1 个 0 元；
   (d) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是三对角阵，且三对角元都 $\neq 0$.

2. 设矩阵 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n\times n} \in \mathbf{R}^{n\times n}$(或 $\mathbf{C}^{n\times n}$)，若满足：

$$|a_{ii}| \geqslant \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| \quad (i = 1, 2, \ldots, n)$$

   (a) 若满足上式，则称 $\boldsymbol{A}$ 为**对角占优矩阵**；
   (b) 若上式对所有 $i\,(i = 1, 2, \ldots, n)$ 都有严格不等号成立，则称 $\boldsymbol{A}$ 为**严格对角占优矩阵**；
   (c) 若 $\boldsymbol{A}$ 不可约且对角占优，并且至少有一个 $i\,(i = 1, 2, \ldots, n)$ 使得上式的不等号严格成立，则称 $\boldsymbol{A}$ 为**不可约对角占优矩阵**.

Theorem 5.3.2. *若 $\boldsymbol{A}$ 为严格对角占优或不可约对角占优矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 非奇异.*

Theorem 5.3.3. *若 $\boldsymbol{A}$ 为严格对角占优或不可约对角占优矩阵，且 $\boldsymbol{A}$ 对称，对角元全为正，则 $\boldsymbol{A}$ 的特征值全是正数.*

Conclusions:

1. 若系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**具有正对角元的对称阵**，则：$\boldsymbol{A}$ 和 $2\boldsymbol{D}-\boldsymbol{A}$ 都正定 $\Leftrightarrow$ J 方法收敛
2. 若系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**对称正定** $\Rightarrow$ GS 方法收敛
3. 若系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**对称正定，且** $0<\omega<2$ $\Rightarrow$ SOR 方法收敛
4. 若系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**严格对角占优矩阵** $\Rightarrow$ J 方法和 GS 方法都收敛
5. 若系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**不可约对角占优矩阵** $\Rightarrow$ J 方法和 GS 方法都收敛
6. 若系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**不可约对角占优矩阵，且** $0<\omega\leqslant 1$ $\Rightarrow$ SOR 方法收敛

5.4 共轭梯度法 *