《数值计算方法》总复习

王志明
wangzhiming@ies.ustb.edu.cn

考核方式

- **平时作业与实验：**20%(作业、实验报告)；
- **期终考试：**80%，闭卷。

课件下载地址：

- 地址：http://email.163.com
- 邮箱： nm_ustb@163.com
- 密码： 2015_nm

第一章 绪论

- 1.1 数值计算方法及其主要内容
- 1.2 误差的来源
- 1.3 绝对误差、相对误差及有效数字
- 1.4 数值计算中误差的传播
- 1.5 数值计算中应注意的问题

§1.2 误差的来源

抽象、简化　　　　数值计算

实际问题 → 数学模型 → 问题近似解

- 模型误差
- 观测误差
- 截断误差
- 舍入误差

§1.3 绝对误差、相对误差及有效数字

§1.3.1 绝对误差

定义1.2 设x^*为准确值x的一个近似值，则

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

称为近似值x^*的绝对误差，简称为误差。

误差限：

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

§1.3.2 相对误差

定义1.3 设x*为准确值x的一个近似值，则绝对误差与准确值之比称为近似值x*的**相对误差**：

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

近似：
$$|e_r(x^*)| \approx \left|\frac{e(x^*)}{x^*}\right|$$

相对误差限：
$$\boxed{|e_r(x^*)| = \left|\frac{e(x^*)}{x^*}\right| \le \varepsilon_r}$$

有效数字：从第一个非零数字到(小数点后)最后一位的所有数字。

定理1.1 若x的近似值：

$$x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m \ (a_1 \neq 0)$$

有n位有效数字，则 $\frac{1}{2a_1}\times 10^{-n+1}$ 为其**相对误差限**。

反之，若x*的相对误差限满足

$$\varepsilon_r \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1}$$

则x*至少有n位有效数字。

§1.4 数值计算中误差的传播

§1.4.1 基本运算误差中误差估计

给定多元函数：$y = f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$

近似值为：　$y^* = f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$

y 所产生的误差可以用Taylor展开式来估计：

$$\boxed{e(y)} = y - y^* = f(x_1, x_2, \cdots, x_n) - f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$$

$$\approx df(x_1^*, \ldots, x_n^*) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_i} f(x_1, \cdots, x_n) \cdot (x_i - x_i^*)$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_i} f(x_1, \cdots, x_n) \cdot \boxed{e(x_i^*)}$$

相对误差：

$$\boxed{e_r(y^*)} = \frac{e(y^*)}{y} \approx \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \frac{e(x_i^*)}{y^*}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \frac{x_i^*}{y^*} \boxed{e_r(x_i^*)}$$

也可写为：

$$e_r(y^*) = \frac{e(y^*)}{y^*} \approx \frac{df(x_1^*, \ldots, x_n^*)}{f(x_1^*, \ldots, x_n^*)} = d(\ln f)$$

和、差、积、商误差公式：

$$\begin{cases} e(x_1 \pm x_2) = e(x_1) \pm e(x_2) \\ e_r(x_1 \pm x_2) = \dfrac{x_1}{x_1 \pm x_2} e_r(x_1) \pm \dfrac{x_2}{x_1 \pm x_2} e_r(x_2) \end{cases}$$

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

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

基本要求

- 有效位数概念
- 误差基本概念
- 误差传递的计算

第三章 非线性方程的解法

- 3.1 二分法
- 3.2 简单迭代法
- 3.3 牛顿迭代法
- 3.4 牛顿迭代法的变形

§ 3.1 二分法

若f(x)在[a, b]上连续，

且f(a)f(b)<0

(1)取$x_0=\dfrac{a+b}{2}$，计算$f(x_0)$

若$f(a)f(x_0)<0$，则根位于$[a,x_0]$

取$a_1=a, b_1=x_0$

若$f(a)f(x_0)>0$，则根位于$[x_0,b]$

取$a_1=x_0, b_1=b$

(2)取$x_1=\dfrac{a_1+b_1}{2}$，计算$f(x_1)$

……

$$[a_0,b_0]\supset[a_1,b_1]\supset\cdots\supset[a_n,b_n]\cdots$$

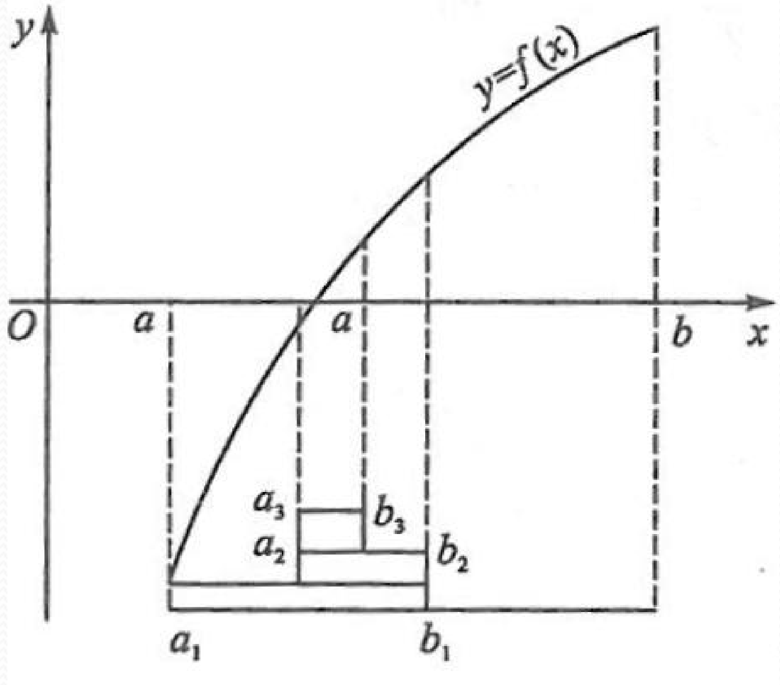

图 3-1 二分法示意图

$[a_n, b_n]$长度为: $b_n - a_n = \dfrac{b_{n-1} - a_{n-1}}{2} = \ldots = \dfrac{b-a}{2^n}$

以 $x_n = \dfrac{b_n + a_n}{2}$ 以近似解，误差满足：

$$|\alpha - x_n| \le \frac{b_n - a_n}{2} = \frac{b-a}{2^{n+1}}$$

若设定误差不大于 ε

则 $|\alpha - x_n| \le \dfrac{b-a}{2^{n+1}} < \varepsilon$ $\qquad \boxed{2^{n+1} > \dfrac{b-a}{\varepsilon}}$

则可估计所需迭代次数：

$$\boxed{n+1 \ge [(\ln(b-a) - \ln\varepsilon)/\ln 2]}$$

$[a_n, b_n]$长度为: $b_n - a_n = \dfrac{b_{n-1} - a_{n-1}}{2} = \ldots = \dfrac{b-a}{2^n}$

以 $x_n = \dfrac{b_n + a_n}{2}$ 以近似解，误差满足：

$$|\alpha - x_n| \le \frac{b_n - a_n}{2} = \frac{b-a}{2^{\boxed{n+1}}}$$

若设定误差不大于 ε

则 $|\alpha - x_n| \le \dfrac{b-a}{2^{n+1}} < \varepsilon$ $\qquad \boxed{2^{n+1} > \dfrac{b-a}{\varepsilon}}$

则可估计所需迭代次数：

$$\boxed{n+1 \ge [(\ln(b-a) - \ln \varepsilon)/\ln 2]}$$

$$n \ge \log_2(b-a) - \log_2 \varepsilon - 1$$

§ 3.2 简单迭代法

- 将方程f(x)=o化为另一个与它同解的方程：

$$x = \varphi(x)$$

- 取初值x_o代入右边得到：

$$x_1 = \varphi(x_0)$$

- 如果迭代收敛，则结果为所求根。

定理 3.1 设迭代函数满足：

(1)当$x \in [a,b]$时， $a \le \varphi(x) \le b$

(2)存在$0 < \mathrm{L} < 1$，对任意 $x \in [a,b]$有$|\varphi'(x)| \le L$

则存在唯一根，对任意 初值$x_0 \in [a,b]$收敛于 α，

且

$$\boxed{\begin{gathered} |x_k - \alpha| \le \frac{L}{1-L}|x_k - x_{k-1}| \\ |x_k - \alpha| \le \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0| \end{gathered}}$$

判断是否收敛后，收敛速度如何度量？

设迭代格式为 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$，当 $k\to\infty$ 时，$x_k\to\alpha$，并记 $e_k = x_k-\alpha$。

定义**3.1** 若存在实数 $p\ge 1$ 和 $c>0$ 满足：

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

则称迭代法为 p 阶收敛。

$p=1$ 为线性收敛， $p>1$ 为超线性收敛，

$p=2$ 为平方收敛。

定理3.3 若迭代函数 $\varphi(x)$在根 α附近满足：

（1）$\varphi(x)$ 存在 p阶导数且连续；

（2）$\varphi'(\alpha)=\varphi''(\alpha)=\ldots=\varphi^{(p-1)}(\alpha)=0$，$\varphi^{(p)}(\alpha)\neq 0$

则$x_{k+1}=\varphi(x_k)$为p阶收敛。

§ 3.3 牛顿迭代法

牛顿迭代法又称为切线法。

设x_k是$f(x)=0$根α附近的近似值，

过$(x_k, f(x_k))$作切线：

$$L_k(x)=f(x_k)+f'(x_k)(x-x_k)$$

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

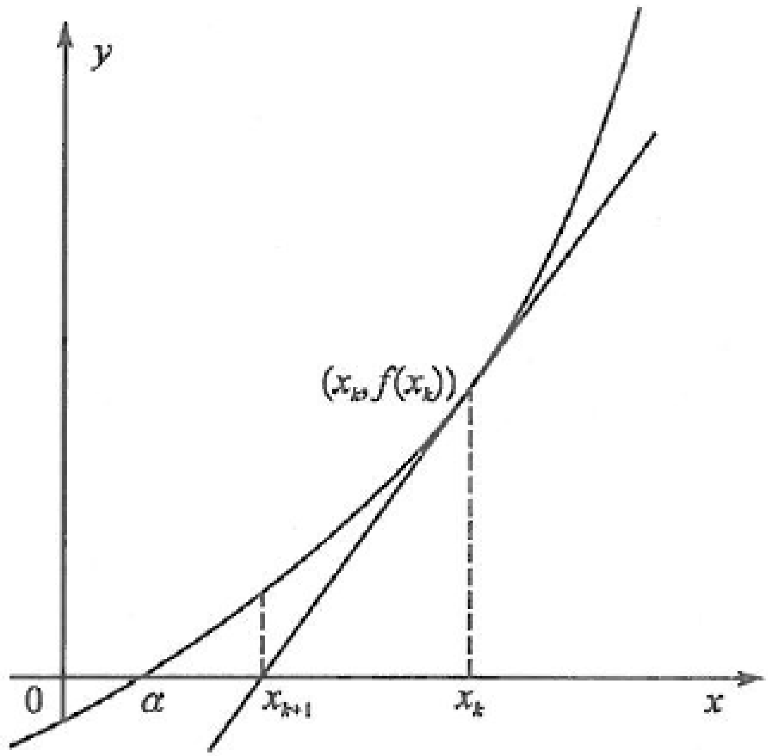

图 3－2　Newton 迭代法几何意义

当$f'(\alpha)\neq 0$时， $\varphi'(\alpha)=0$，至少平方收敛。

定理3.4 设$f(\alpha)=0, f'(\alpha)\neq 0$，且$f(x)$在$\alpha$的邻域内具有二阶连续导数，则 如下牛顿法产生的迭代 序列

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

局部收敛到 α，且收敛阶数至少为 2，

当$f''(\alpha)\neq 0$时，收敛阶恰为 2。

§3.4 牛顿迭代法的变形

§3. 4. 1 简化的牛顿迭代公式

应用牛顿迭代公式,每一步需要计算 $f'(x_n)$.

为了避免计算导数值，将

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

修改为：

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - f(x_k)/f'(x_0)}$$

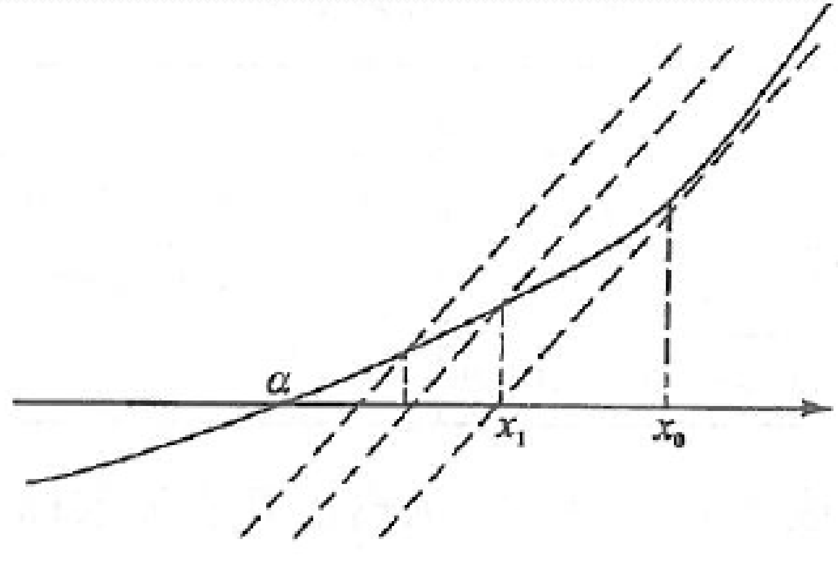

图 3－6　迭代平行

可进一步简化为：$x_{k+1}=x_k-f(x_k)/c$

迭代公式为：$\varphi(x)=x-\dfrac{f(x)}{c}$

根据收敛条件$|\varphi'(x)|\le L<1$可得：

$$\varphi'(x)=1-\frac{f'(x)}{c}$$

$$0<\frac{f'(x)}{c}<2$$

§3.4.2 弦截法

为了避免计算导数值，用下式近似导数：

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

迭代公式为：

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

以直代曲，需要两点函数值开始迭代。

§3.4.3 牛顿下山法

为了防止迭代发散，附加条件：

$$|f(x_{k+1})|<|f(x_k)|$$

引入 $0<\lambda\le 1$

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

λ为下山因子，取不同值进行试探：

$$\lambda=1,\frac{1}{2},\frac{1}{2^2},\ldots$$

基本要求

- 二分法及其迭代次数估计；
- 简单迭代法及其收敛性判断；
- 牛顿法；
- 简化牛顿法、弦截法、牛顿法下山法。

第四章 线性方程组的解法

- 4.1 向量范数和矩阵范数
- 4.2 迭代法
- 4.3 高斯消去法
- 4.4 高斯列主元消去法
- 4.5 三角分解法

§ 4.1 向量范数和矩阵范数

向量范数是欧氏空间向量长度的推广，向量和矩阵的范数是用来衡量向量和矩阵大小的度量。

§ 4.4.1 向量的范数

定义4.1 $\boldsymbol{R}^n$上范数是一个非负实数值，记作$\|\cdot\|$，满足：

(1) $\|x\| \geq 0, \quad \forall x \in \boldsymbol{R}^n$；当且仅当 $x = 0$ 时，$\|x\| = 0$ 非负

(2) 对任何 $\alpha \in \boldsymbol{R}, \quad x \in \boldsymbol{R}^n, \|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$ 正齐次

(3) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \forall x, y \in \boldsymbol{R}^n$ 三角不等式

设有向量$\mathbf{x}=(x_1,x_2,\dots,x_n)^T$，常见向量范数包括：

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

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

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

统一形式： $$\boxed{\|\mathbf{x}\|_p=\left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}}$$

§4.1.2 矩阵的范数

定义**4.2** 称定义在 $R^{n\times n}$ 上的实数函数 $\|\cdot\|$ 为矩阵范数，

如果对 $R^{n\times n}$ 中的任意矩阵**A**和**B**，满足：

$(1)\|\mathbf{A}\|\geq 0$, 当且仅当$\mathbf{A}=0$时, $\|\mathbf{A}\|=0$ 非负

(2)对任一数$k\in R$，有$\|k\mathbf{A}\|=|k|\,\|\mathbf{A}\|$ 正齐次

$(3)\|\mathbf{A}+\mathbf{B}\|\leq\|\mathbf{A}\|+\|\mathbf{B}\|$ 三角不等式

$(4)\|\mathbf{AB}\|\leq\|\mathbf{A}\|\cdot\|\mathbf{B}\|$ 相容性

定义4.3 对于给定的范数$\|\cdot\|$，如果对任意$\mathbf{A} \in R^{n\times n}$

满足：
$$\|\mathbf{A}x\| \le \|\mathbf{A}\| \bullet \|x\|$$

称矩阵范数与向量范数是相容的。

定理4.2 设在R^n中给定一种向量范数，对任一矩阵A，

下式定义了一种矩阵范数，且与所给的向量范数相容：

$$\|\mathbf{A}\| = \max_{\|\mathbf{x}\|=1} \|\mathbf{Ax}\|$$

定理4.3 设$\mathbf{A}=(a_{ij})\in R^{n\times n}$,则

$$\|\mathbf{A}\|_1=\max_{1\le j\le n}\left[\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|\right]$$

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

$$\|\mathbf{A}\|_\infty=\max_{1\le i\le n}\left[\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\right]$$

$\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})$为矩阵$\mathbf{A}^T\mathbf{A}$的最大特征值

§4.1.3 误差分析

定义4.4 如果线性方程组Ax=b中，A或b的微小变化，就会引引起方程组解的巨大变化，称为病态方程组，否则称为良态方程组。对应矩阵称为病态或良态矩阵。

定义4.5 设$\mathbf{A}$为非奇异矩阵,$\|\cdot\|$为范数，条件数为：

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

条件数大的矩阵为病态矩阵。**条件数不小于1**：

$$\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\| \geq \|\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\| = 1$$

常用条件数：

$$(1)\ cond(\mathbf{A})_\infty = \|\mathbf{A}\|_\infty \|\mathbf{A}^{-1}\|_\infty$$

$$(2)\ cond(\mathbf{A})_2 = \|\mathbf{A}\|_2 \|\mathbf{A}^{-1}\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})}{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})}}$$

§ 4.2 迭代法

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \vdots \qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\quad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

$$\boxed{\mathbf{Ax} = \mathbf{b}}$$

设**A**为非奇异矩阵，迭代法求解的**基本思路**：

首先将线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 化为一个适合迭代的

等价方程组： $\mathbf{x} = \mathbf{Gx} + \mathbf{d}$

比如A=M-N，原式为Mx=Nx+b，当M为非奇异时：

$$\mathbf{x}=\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}\mathbf{x}+\mathbf{M}^{-1}\mathbf{b},\quad 即\mathbf{G}=\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N},\mathbf{d}=\mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}$$

取任意初始向量**x**$^{(0)}$构成迭代序列：

$$\mathbf{x}^{(k+1)}=\mathbf{G}\mathbf{x}^{(k)}+\mathbf{d}\quad (k=0,1,\ldots)$$

其中**G**称为迭代矩阵。

§4.2.1 雅克比(Jacobi)迭代法

设**A**为非奇异矩阵且$a_{ii} \neq 0 (i = 1, 2, \ldots, n)$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \vdots \qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

可改写为

$$\begin{cases} x_1 = 1/a_{11}(-a_{12}x_2 - \ldots - a_{1n}x_n + b_1) \\ x_2 = 1/a_{22}(-a_{21}x_1 - \ldots - a_{2n}x_n + b_2) \\ \quad \vdots \qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad \vdots \\ x_n = 1/a_{nn}(-a_{n1}x_1 - \ldots - a_{n,n-1}x_{n-1} + b_n) \end{cases}$$

记：$\mathbf{D} = diag(a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{nn})$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \ldots & 0 \\ a_{21} & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{U} = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ 0 & 0 & \ldots & a_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 0 \end{bmatrix}$$

则：$\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U}$

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

记：$\mathbf{B} = -\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U}), \quad \mathbf{d} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}$

则：$\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{d}$

迭代形式：$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}, \quad k = 0,1,\ldots$

§4.2.2 高斯-赛德尔(Gauss-Seidel)迭代法

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U}$$

取：$\mathbf{M} = \mathbf{D} + \mathbf{L}, \mathbf{N} = -\mathbf{U}$

$$\boxed{\begin{aligned}&\mathbf{x} = -(\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{U}\mathbf{x} + (\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{b} \\ &\text{迭代公式：}\ \mathbf{x}^{(k+1)} = -(\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{U}\mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{b}\end{aligned}}$$

为避免$(\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}$，改写为：

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

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

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

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

$$x_i^{(k+1)} = 1/a_{ii}(-\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} + b_i)$$

$$= x_i^{(k)} + 1/a_{ii}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)})$$

§ 4.2.3 迭代法的收敛性

设迭代格式：$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}$

精确解为：$\mathbf{x}^{*} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{*} + \mathbf{f}$

相减得到：$\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{*} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{B}\mathbf{x}^{*} = \mathbf{B}(\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{*})$

令：$\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{*} = \varepsilon^{(k+1)}, \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{*} = \varepsilon^{(k)}, \ldots, \mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^{*} = \varepsilon^{(0)}$

$\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{*} = \mathbf{B}^{k+1}\varepsilon^{(0)}$

如果要求$k \to \infty$时$\varepsilon^{(k+1)} \to 0$，只有$\mathbf{B}^{k+1} \to 0$

定理4.5 $\lim\limits_{k\to\infty} \varepsilon^{(k)} = 0$(即$\mathbf{x}_i^{(k)} \to \mathbf{x}_i^{*}$)的充分必要条件是

当$k \to \infty$时，$B^{k} \to 0$

谱半径：$\rho(\mathbf{B}) = \max(|\lambda_i|), i = 1,2,\ldots,n$

λ_i为矩阵**B**的特征值

定理4.6 迭代$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}$对任意$\mathbf{x}^{(0)}$和**f**收敛的充分必要条件是$\rho(\mathbf{B}) < 1$。

根据特征值定义：$\mathbf{B}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$

$$\|\lambda\mathbf{x}\| = |\lambda|\,\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{B}\mathbf{x}\| \le \|\mathbf{B}\|\cdot\|\mathbf{x}\|$$

$$|\lambda| \le \|\mathbf{B}\| \qquad \rho(\mathbf{B}) = \max(|\lambda_i|) \le \|\mathbf{B}\|$$

$$\rho(\mathbf{B}) = \max(\lambda_i) \le \|\mathbf{B}\|$$

定理4.7 若$\|\mathbf{B}\| < 1$，迭代$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}$收敛

且有：$\|\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}\| \le \dfrac{\|\mathbf{B}\|}{1-\|\mathbf{B}\|}\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\|$

定义4.7 如果矩阵$A=(a_{ij})_{nxn}$设的元素满足不等式：

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

则矩阵A为对角占优阵，如果不等式严格成立，

称A为严格对角占优。

定理4.8 若线性方程组Ax=b中的A为严格对角占优，则Jacobi法和G-S法均收敛。

判断收敛性顺序：

(1) 充分：A为严格对角占优？是，则收敛。

(2)充分： $||B||<1$? 是，则收敛。

(3)充要： $\rho(B)<1$? 是，则收敛；不是，则不收敛。

§4.3 高斯消去法

n阶线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \vdots \qquad\quad \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots \cdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

1. **消元过程:** 逐渐将系数阵转换为上三角阵;

2. **回代过程:**逐步回代可得原方程组的解。

§4.4 高斯列主消去法

假设Gauss消去法的消元过程进行到

第 $k\ (1 \le k \le n-1)$ 步，设

$$a_k = \max_{k \le i \le n} |a_{i,k}^{(k)}|$$

并令 i 为达到最大值 a_k 的最小行标 $i \ge k$ ，若 $i > k$

则交换 A 和 b 中的第 i 行和第k 行，

再进行消 元过程的第 k 步.

这时每个乘子 $l_{ik} = a_{i,k}^{(k)} / a_{k,k}^{(k)}$ 都满足

$$\left| l_{i,k} \right| \le 1, \qquad i = k, \cdots, n,$$

可以防止有效数字大量丢失而产生误差.

§4.5 三角分解法

Gauss消去法的实质是将矩阵 A 分解为

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$$

其中 L --单位下三角矩阵， U --上三角矩阵.

$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$化为$\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$

消元过程$\mathbf{y} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{b}$，回代过程$\mathbf{x} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{y}$

借助矩阵乘法计算!

LU分解公式：

$$\begin{cases} u_{1j} = a_{1j}, & j = 1,2,\dots,n \\ l_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{u_{11}}, & i = 1,2,\dots,n \end{cases}$$

对k=2, 3, …, n：

$$\begin{cases} u_{kj} = a_{kj} - \sum\limits_{m=1}^{k-1} l_{km} u_{mj}, & j = k,\dots,n \\ u_{ik} = \dfrac{a_{ik} - \sum\limits_{m=1}^{k-1} l_{im} u_{mk}}{u_{kk}}, & i = k+1,\dots,n \end{cases}$$

基本要求

- 向量范数和矩阵范数的计算；
- 雅克比、高斯-赛德尔迭代矩阵的计算、收敛性判断；
- 高斯消去法、高斯列主元消去法应用；
- 矩阵的三角分解法。

第五章 插值法与最小二乘法

- 5.1 插值法概述
- 5.2 拉格朗日插值法
- 5.3 分段插值法
- 5.4 牛顿插值法
- 5.5 埃尔米特(Hermite)插值
- 5.7 数据拟合的最小二乘法

§5.2 拉格朗日(Lagrange)插值

§5.2.1 Lagrange插值多项式

设$p_{n+1}(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$，有$p'_{n+1}(x_j)=\prod_{i=0,i\neq j}^{n}(x_j-x_i)$

记n次多项式：

$$\boxed{l_j(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\dots(x-x_n)}{(x_j-x_0)(x_j-x_1)\dots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\dots(x_j-x_n)}}$$

$$l_j(x)=\frac{p_{n+1}(x)}{(x-x_j)p'_{n+1}(x_j)},\quad j=0,1,2,\dots,n$$

满足插值条件$y(x_i) = f(x_i)$的形如

$y(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n$的$Lagrange$插值多项式为:

$$\boxed{y(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j(x), \quad l_j(x)\text{称为插值基函数}}$$

被插值函数可表示为:

$$\boxed{f(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j(x) + E(x)}$$

定理5.2 设f(x)在[a,b]上存在n阶连续导数，在(a,b)上存在n+1阶导数，y(x)是满足插值条件的Lagrange插值多项式，对任意a<x<b，**插值余项E(x)**为：

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

拉格朗日插值公式：

$$\boxed{y(x)=\sum_{j=0}^{n}\left[\prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n}\frac{x-x_k}{x_j-x_k}\right]f(x_j)}$$

§5.3 分段插值法

§5.3.1 分段线性Lagrange插值

相邻节点分段线性插值：

$$L_h^{(k)}(x) = y_k \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} + y_{k+1} \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k}$$

§5.3.2 分段二次Lagrange插值

$u \in [x_k, x_{k+1}]$

当$|u-x_k| \le |u-x_{k+1}|$时，取x_{k-1}，否则取x_{k+2}

$$\boxed{L_h^{(k)}(u) = \sum_{j=k}^{k+2} y_j \left(\prod_{\substack{r=k \\ r \neq j}}^{k+2} \frac{u-x_r}{x_j-x_r} \right)}$$

§5.4 牛顿插值法

设已知函数$f(x)$在$n+1$个节点$x_0, x_1, \ldots x_n$的函数值，

牛顿插值基函数为：

$$
\begin{cases}
\varphi_0(x) = 1 \\
\varphi_j(x_1) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{j-1}) = \prod_{i=0}^{j-1}(x - x_i)
\end{cases}
$$

$$
\boxed{p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x) = a_0 + \sum_{j=1}^{n} a_j \prod_{k=0}^{j-1}(x - x_k)}
$$

$$
a_0 = f_0, \quad a_1 = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}, \quad a_2 = \left(\frac{f_2 - f_0}{x_2 - x_0} - \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}\right) / (x_2 - x_1)
$$

§ 5.4.1 均差(差商)

定义5.1 设$f(x)$在互异的节点$x_0, x_1, \dots x_n$的函数值为$f_0, f_1, \dots f_n$，则$f(x)$关于x_k, x_i的一阶均差(差商)定义为：

$$\boxed{f[x_i, x_k] = \frac{f_k - f_i}{x_k - x_i} \ (k \neq i)}$$

二阶均差：

$$\boxed{f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_k] - f[x_i, x_j]}{x_k - x_j}}$$

k阶均差：

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

数学归纳法可证明：

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_k] = \sum_{j=0}^{k} f(x_j) \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{k} \frac{1}{x_j - x_i}$$

对称性：

$$\boxed{f[x_0, \ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots, x_k] = f[x_0, \ldots, x_j, \ldots, x_i, \ldots, x_k]}$$

递推计算公式：

$$\boxed{f[x_0, x_1, \ldots, x_k] = \frac{f[x_1, \ldots, x_k] - f[x_0, \ldots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}}$$

§5.4.2 牛顿插值公式及其余项

由一阶均差定义可得：

$$f(x)=f(x_0)+f[x,x_0](x-x_0)$$

插值多项式：

$$\boxed{N_n(x)=f(x_0)+\sum_{k=1}^{n}f[x_0,x_1,\ldots,x_k]\prod_{j=0}^{k-1}(x-x_j)}$$

§ 5.4.3 差分

定义5.2 设f(x)在等距节点

$$x_k = x_0 + kh \quad (k = 0,1,\dots,n)$$

上的函数值为f_k，则称

$$\Delta f_k = f_{k+1} - f_k, \nabla f_k = f_k - f_{k-1}$$

分别为一阶向前差分和一阶向后差分。

$$\Delta^m f_k = \Delta^{m-1} f_{k+1} - \Delta^{m-1} f_k, \nabla^m f_k = \nabla^{m-1} f_{k+1} - \nabla^{m-1} f_k$$

为**m**阶向前差分和**m**阶向后差分。

$$\Delta^m f_k = \nabla^m f_{k+m}$$

§5.4.4 等节距节点的插值公式

设节点 $x_k = x_0 + kh \quad (k = 0,1,\dots,n)$

记 $x = x_0 + th \quad (t > 0)$

则 $x - x_k = (t-k)h$

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k]\prod_{j=0}^{k-1}(x - x_j) = \frac{\Delta^k f_0}{k!h^k} t(t-1)\dots(t-k+1)h^k$$

$$= \frac{\Delta^k f_0}{k!}\prod_{j=0}^{k-1}(t-j)$$

牛顿向前插值公式:

$$\boxed{N_n(x_0+th)=f_0+\sum_{k=1}^{n}\frac{\Delta^k f_0}{k!}\prod_{j=0}^{k-1}(t-j)}$$

设 $\quad x_{n-k}=x_n-kh \quad (k=0,1,\dots,n)$

$$x=x_n+th \quad (t<0)$$

则 $\quad x-x_{n-k}=(t+k)h$

牛顿向后插值公式:

$$\boxed{N_n(x_0+th)=f_n+\sum_{k=1}^{n}\frac{\nabla^k f_n}{k!}\prod_{j=0}^{k-1}(t+j)}$$

§5.5 埃尔米特(Hermite)插值

构造插值多项式H(x)，不仅要求在某些节点上函数值相等，还要求一阶导数甚至高阶导数值相等。

$$f(x_1), f'(x_1), \cdots, f^{(m_1)}(x_1);$$

$$f(x_2), f'(x_2), \cdots, f^{(m_2)}(x_2);$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$f(x_n), f'(x_n), \cdots, f^{(m_n)}(x_n).$$

$$N = \sum_{i=1}^{n} m_i + n$$

寻找一个次数<=N-1的多项式H(x)，满足:

$$f(x_i) = H(x_i) \quad (i = 0,1,...,2)$$

$$f'(x_i) = H'(x_i)$$

$$f^{(m_i)}(x_i) = H^{(m_i)}(x_i)$$

§ 5.7 数据拟合的最小二乘法

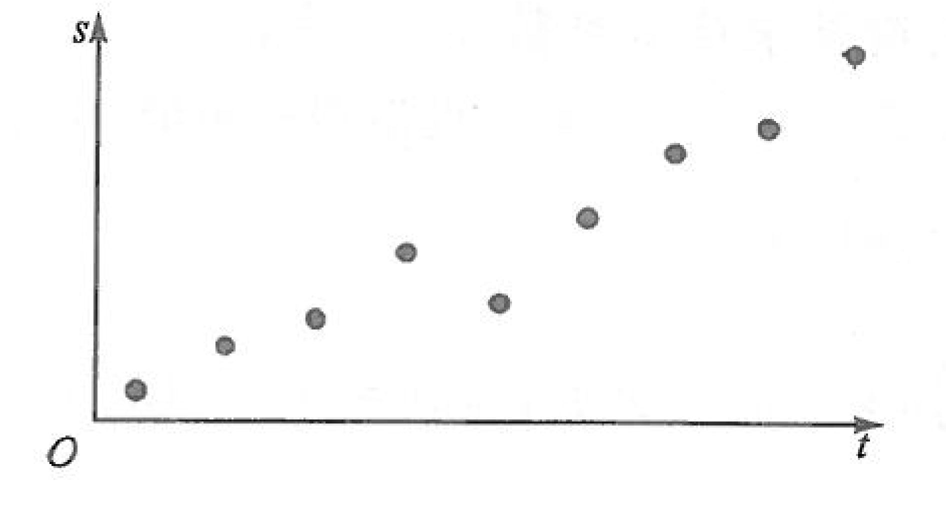

图 5－11　某物体的直线运动数据在坐标平面

$$S(t) = at + b$$

记：$\delta_i = S(t_i) - s_i$

最小化：

$$\boxed{\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \delta_i^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega_i (S(t_i) - s_i)^2}$$

推广至一般情形：

$$\Phi = span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)\}$$

求：

$$S^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j^* \varphi_j(x) \quad (n \le m)$$

满足：

$$\boxed{\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega_i (S^*(x_i) - y_i) = \min_{S \in \Phi} \sum_{i=0}^{m} \omega_i (S(x_i) - y_i)^2}$$

数据拟合的最小二乘法。

§ 5.7.1 法方程组

记：

$$\Psi(a_0,a_1,\ldots,a_n)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i(S(x_i)-y_i)^2=\sum_{i=0}^{m}\omega_i(\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)-y_i)^2$$

由 $$\frac{\partial\Psi}{\partial a_k}=0(k=0,1,\ldots,n)$$

得： $$\sum_{i=0}^{m}\omega_i(\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)-y_i)\varphi_k(x_i)=0$$

即： $$\sum_{j=0}^{n}\left(\sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)\right)a_j=\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\varphi_k(x_i)$$

令： $$\varphi_r=(\varphi_r(x_0),\varphi_r(x_1),\ldots,\varphi_r(x_m))\quad(r=0,1,\ldots,n)$$

$$f=(y_0,y_1,\ldots,y_m)$$

定义内积：

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

有：
$$\sum_{j=0}^{m}(\varphi_j,\varphi_k)a_j=(f,\varphi_k)\quad (k=0,1,\ldots,n)$$

称为函数系在离散点上的法方程。

$$\boxed{\begin{pmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n)\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_0\\ a_1\\ \vdots\\ a_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(f,\varphi_0)\\ (f,\varphi_1)\\ \vdots\\ (f,\varphi_n)\end{pmatrix}}$$

基本要求

- 拉格朗日插值法计算；
- 一次和二次分段拉格朗日插值法计算；
- 差商的计算，牛顿插值法计算；
- 埃尔米特插值基本概念；
- 最小二乘法数据拟合的法方程组方法。

第六章 数值微分与积分

- 6.1 数值微分
- 6.2 牛顿-柯特斯求积公式
- 6.3 复合求积法
- 6.4 龙贝格求积法
- 6.5 高斯求积公式

§6.1 数值微分

§6.1.1 差商公式

$$f'(a)=\lim_{h\to 0}\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$$

近似为：

向前差商： $$f'(a)\approx\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$$

向后差商： $$f'(a)\approx\frac{f(a)-f(a-h)}{h}$$

中心差商： $$f'(a)\approx\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$$

§6.1.2 中点方法的加速

$$G(h)=f'(a)+a_1h^2+a_2h^4+a_3h^6+\cdots$$

$$G\left(\frac{h}{2}\right)=f'(a)+\frac{a_1}{4}h^2+\hat{a}_2h^4+\hat{a}_3h^6+\cdots$$

$$\boxed{G_1(h)=\frac{4}{3}G(\frac{h}{2})-\frac{1}{3}G(h)}$$

$$G_1(h)=f'(a)+\beta_1h^4+\beta_2h^6+\cdots$$

进一步，令：

$$\boxed{G_2(h)=\frac{16}{15}G_1(\frac{h}{2})-\frac{1}{15}G_1(h)}$$

$$G_2(h)=f'(a)+\gamma h^6+\cdots$$

$$\boxed{G_3(h)=\frac{64}{63}G_2(\frac{h}{2})-\frac{1}{63}G_2(h)}$$

§6.1.3 插值型的求导公式

利用$f(x)$在$x_k\,(k=0,1,\ldots,n)$处的函数值，求n次插值多项式$p_n(x)$，计算导数作为近似：

$$f'(x)\approx p'_n(x)$$

$$f'(x_0)\approx\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)]$$

$$f'(x_1)\approx\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]$$

$$f'(x_2)\approx\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]$$

§ 6.2 牛顿-柯特斯求积公式

§ **6.2.1** 插值型求积公式及**Cotes**系数

设$f(x)\in c[a,b]$，求定积分$I=\int_a^b f(x)dx$的近似值。

将[a,b]n等分，步长为h=(b-a)/n。取节点:

$$x_k = a + kh \quad (k = 0,1,\dots,n)$$

f(x)可表示为**Lagrange**插值多项式及其余项之和：

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x) + R_n(x)$$

$$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n}\left(\int_a^b l_k(x)dx\right)f(x_k)+\int_a^b R_n(x)dx$$

$$=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)+\int_a^b R_n(x)dx$$

其中 $A_k=\int_a^b\left(\prod_{j=0,j\neq k}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right)dx$

$$\boxed{C_k^{(n)}=\frac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!(n-k)!}\int_0^n\prod_{j=0,j\neq k}^{n}(t-j)dt}$$

$$\boxed{I_n=(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k)}$$

在**Newton-Cotes**公式中，最重要的是**n=1**、**2**、**4**时的**3**个公式。

梯形公式：

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

Simpson公式：

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

Cotes公式：

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

定义6.1 如果某个求积公式，对于任何次数不超过m的代数多项式都能准确成立，但对于m+1次代数多项式不能准确成立，则称该求积公式具有**m次代数精度**。

梯形公式、**Simpson**公式、**Cotes**公式的代数精度分别为**1**阶、**3**阶和**5**阶。

§6.3 复合求积法

§6.3.1 复合求积公式

将[a,b]等分成n个子区间，在每个区间上使用低阶求积公式进行计算，然后求和。

分区间利用梯形公式：

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$$

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$$

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

复合梯形公式：

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

复合**Simpson**公式：

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

复合**Cotes**公式：

$$S_n = \frac{b-a}{90n}[7f(a) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/4}) + 12\sum_{k=1}^{n-1} f(x_{k+1/2})$$

$$+ 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+3/4}) + 14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 7f(b)]$$

§6.3.2 复合求积公式的余项与收敛的阶

复合梯形公式余项：

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

复合**Simpson**公式余项：

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

定义6.2 如果一种复合求积公式$\mathbf{I_n}$，当$\mathbf{h \to 0}$时，有

$$\lim_{h\to 0}\frac{I-I_n}{h^P}=c \quad (c\neq 0)$$

则称求积公式$\mathbf{I_n}$是$\mathbf{P(\geq 1)}$阶收敛的。

T_n、S_n、C_n分别是2、4、6阶收敛。

§6.3.3 步长的自动选择

- 计算精度与步长有关；
- 高阶导数不易求，根据余项估计不可行。
- 通过计算自动选择：

$$I - T_{2n} \approx -\frac{1}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 [f'(b) - f'(a)]$$

$$\frac{I - T_{2n}}{I - T_n} \approx \frac{1}{4} \qquad I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}\left(T_{2n} - T_n\right)$$

以T_{2n}为近似，截断误差绝对值约为$\Delta \approx \frac{1}{3}|T_{2n} - T_n|$

令$h=b-a$，计算T_1；

步长折半，计算T_2及$\Delta=\frac{1}{3}|T_2-T_1|$；

反复计算，真到误差满足要求$\Delta\leq\varepsilon$

Simpson公式：

$$I-S_{2n}\approx\frac{1}{15}(S_{2n}-S_n),\Delta=\frac{1}{15}\left|S_{2n}-S_n\right|$$

Cotes公式：

$$I-C_{2n}\approx\frac{1}{63}(C_{2n}-C_n),\Delta=\frac{1}{63}\left|C_{2n}-C_n\right|$$

§ 6.4 龙贝格(Romberg)求积法

§ 6.4.1 梯形法的递推化

$$T_n = \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)]$$

步长折半，增加节点$x_{i+1/2} = \frac{1}{2}(x_i + x_{i+1})$,

在$[x_i, x_{i+1}]$积分为$\frac{h}{4}[f(x_i) + 2f(x_{i+1/2}) + f(x_{i+1})]$

$$T_{2n} = \frac{h}{4}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{i+1/2}) + f(x_{i+1})]$$

$$= \frac{h}{4}\sum_{i=0}^{n}[f(x_i) + f(x_{i+1})] + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1/2})$$

$$\boxed{T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1/2})}$$

§6.4.2 龙贝格求积法

由：$I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}\left(T_{2n} - T_n\right)$

得：$\overline{T} = T_{2n} + \frac{1}{3}\left(T_{2n} - T_n\right) = \frac{4}{4-1}T_{2n} - \frac{1}{4-1}T_n$

即$Simpson$公式：$S_n = \frac{4}{4-1}T_{2n} - \frac{1}{4-1}T_n$

由$Simpson$公式：

$$I \approx S_{2n} + \frac{1}{4^2-1}(S_{2n} - S_n) = \frac{4^2}{4^2-1}S_{2n} - \frac{1}{4^2-1}S_n$$

即$Cotes$公式：$C_n = \frac{4^2}{4^2-1}S_{2n} - \frac{1}{4^2-1}S_n$

由$Cotes$公式得$Romberg$公式：$R_n=\dfrac{4^3}{4^3-1}C_{2n}-\dfrac{1}{4^3-1}C_n$

继续下去，以$T_0^{(k)}$表示二分k次后的梯形值，

$T_m^{(k)}$表示序列$\{T_0^{(k)}\}$的m次线性组合，得：

$$\boxed{T_m^{(k)}=\frac{4^m}{4^m-1}T_{m-1}^{(k+1)}-\frac{1}{4^m-1}T_{m-1}^{(k)}=T_{m-1}^{(k+1)}+\frac{1}{4^m-1}(T_{m-1}^{(k+1)}-T_{m-1}^{(k)})}$$

K=0,1,2,…; m=1,2,3,…

表 6－4 $T_m^{(k)}$ 三角形表

k	**n** $=2^k$	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	…
0	1	$T_0^{(0)}$				
1	2	$T_0^{(1)}$	$T_1^{(0)}$			
2	4	$T_0^{(2)}$	$T_1^{(1)}$	$T_2^{(0)}$		
3	8	$T_0^{(3)}$	$T_1^{(2)}$	$T_2^{(1)}$	$T_3^{(0)}$	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋱

Romberg求积算法：

$$(1)\ T_0^{(0)} = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)], \quad k=1$$

$$(2)\ T_0^{(k)} = \frac{1}{2}T_0^{(k-1)} - \frac{b-a}{2^k}\sum_{i=0}^{2^{k-1}} f[a+(2i-1)\frac{b-a}{2^k}]$$

$$(3)\ T_i^{(k-i)} = \frac{4^i T_{i-1}^{(k-i+1)} - T_{i-1}^{(k-i)}}{4^i - 1},\ \ i=1,2,\ldots,k$$

(4) 若$\left|T_k^{(0)} - T_{k-1}^{(0)}\right| < \varepsilon$，则输出$T_k^{(0)}$；否则$k=k+1$返回(2)。

§6.5 高斯求积公式

考虑如下带权求积公式：

$$I=\int_a^b \rho(x)f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

当积分具有**2n+1**次代数精度时，插值点称为高斯点。

先考虑$\rho(x)\equiv 1$的特殊情况：

定理**6.1**　高斯求积公式中节点$x_i(i=0,1,2,\ldots,n)$是高斯点的充要条件是这些点为零点的多项式$\omega(x)=\prod_{i-0}^{n}(x-x_i)$与任意不超过$n$的多项式$p(x)$均正交，即$\int_a^b p(x)\omega(x)dx=0$

基本要求

- 数值微分，差商近似导数的计算；
- 梯形、Simpson求积公式；
- 梯形、Simpson复合求积法；
- 龙贝格积分法和高斯求积公式的基本思想。

第七章 常微分方程的数值解法

- 7.1 欧拉(Euler)法
- 7.2 改进的欧拉法
- 7.3 龙格-库塔(Runge-Kutta)法
- 7.4 线性多步法

引言

一阶常微分方程的初值问题：

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x,y) & a \le x \le b \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

假设函数f(x,y)连续，且满足**Lipschitz**条件：

$$\left| f(x,y) - f(x,\bar{y}) \right| \le L \,|\, y - \bar{y} \,|$$

§7.1 欧拉(Euler)法

§7.1.1 Euler方法公式

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

向后差商隐式迭代法:

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

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)}) & (k = 0,1,\ldots) \end{cases}$$

§7.1.2 Euler方法的估计误差

定义**7.1** 单步法的局部截断误差：

$$R_{n+1}=y(x_{n+1})-y(x_n)-h\varphi(x_n,y_n,x_{n+1},y(x_{n+1}),h)$$

Euler法泰勒展开式估计：

$$R_{n+1}=y(x_{n+1})-y(x_n)-hf(x_n,y(x_n))$$

$$=y(x_n+h)-y(x_n)-hy'(x_n)=\frac{1}{2}h^2y''(\xi)$$

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

局部截断误差为$O(h^{p+1})$，则称该方法是p阶的。

§ 7.2 改进的欧拉法

§ 7.1.1 梯形公式

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) \approx \frac{h}{2}[f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))]$$

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

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

$$= -\frac{h^3}{12} y'''(\xi) \qquad (x_n < \xi < x_{n+1})$$

梯形公式为二阶方法，属隐式格式，一般用迭代法求解。

§7.2.2 改进Euler法

在梯形公式中，隐式公式的求解只迭代一次：

$$\boxed{\begin{cases} \bar{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) & \text{预测} \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1})] & \text{校正} \end{cases}}$$

为编程方便，改写为：

$$\boxed{\begin{cases} y_p = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_q = y_n + hf(x_n + h, y_p) \\ y_{n+1} = (y_p + y_q)/2 \end{cases}}$$

§7.3 龙格-库塔(Runge-Kutta)法

§7.3.1龙格-库塔法基本思想

(1)Euler公式：

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

(2)改进的Euler公式：

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

利用函数f(x,y)在某些点上的线性组合来计算 $y(x_{n+1})$的近似值y_{n+1}。

可利用近似Taylor展开式的更多项来增加精度。

$$y_{n+1} = y_n + hy'(x_n) + \frac{h}{2!}y''(x_n) + \ldots + \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x_n)$$

§7.3.2 龙格-库塔法的构造

算法 7.1

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

参数确定原则：其Taylor展开式与y(x)在x_n尽可能多项重合。

§7.3.3 变步长的龙格-库塔法

y(x)变化可能不均匀，等步长求解可能有些地方精度过高，有些地方精度过低。

如何根据精度自动调节步长？

$$\boxed{\left|y(x_{n+1})-y_{n+1}^{(h)}\right| \approx \frac{2^p}{(2^p-1)}\left|y_{n+1}^{(h)}-y_{n+1}^{(h/2)}\right| \approx \Delta}$$

缩小或放大**h**直到达到要求计算精度。

§7.4 线性多步法

单步法在计算y_{n+1}时仅利用了y_n，多步法利用y_n，y_{n-1}，y_{n-2}，…

一般形式：

$$\boxed{y_{n+1} = \sum_{i=0}^{r} a_i y_{n-i} + \sum_{i=-1}^{r} \beta_i f_{n-i}}$$

若$\beta_{-1}=0$，显式；若 $\beta_{-1} \neq 0$，隐式。

基本要求

- 欧拉法；
- 改进的欧拉法；
- 龙格-库塔法及线性多步法的基本思想。

考试时间：2015.6.25

考试地点	人数	教学班
逸105	109	计1301[1],计1303[35],计1202[1],计1304[33],电信13[30],重修[8],信安1102[1]
逸204	99	计1302[34],计1303[2],计1301[37],信安1102[1],计1204[1],计1201[2],电信12[1],重修[12],信安1202[4],信安1201[5]