# 高等数值分析

张鑫航
国防科技大学

版本：1.0
更新：2024 年 6 月 20 日

判断 $10 \times 3'$

大题 6

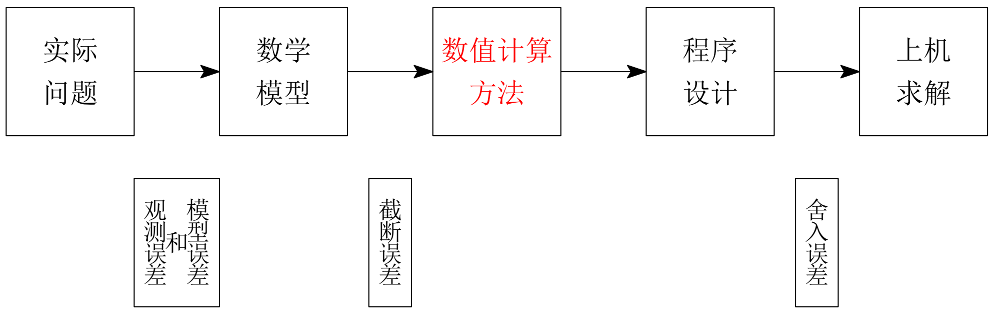
# 目录

# 1 绪论

## 1.1 误差的来源和分类

**定义 1.1 (舍入误差)** 由于计算机字长的有限性，对相关数据进行存储表示时便产生舍入误差。

**定义 1.2 (截断误差)** 计算机必须在有限的时间内得到运行结果，于是无穷的运算过程必须截断为有限过程，由此产生截断误差。




## 1.2 误差度量

**定义 1.3 (误差)** 设 $x$ 为精确值（准确值），$x^*$ 是 $x$ 的一个近似值，称 $e^* = x^* - x$ 为近似 $x$ 的绝对误差或误差。

**定义 1.4 (误差限)** 如果精确值 $x$ 与近似值 $x^*$ 的误差的绝对值不超过某正数 $\varepsilon$，即

$$|e| = |x^* - x| < \varepsilon$$

称 $\varepsilon$ 为绝对误差限或误差限。

**定义 1.5 (相对误差)** 设 $x$ 为精确值(准确值),$x^*$ 是 $x$ 的一个近似值,称 $r = \dfrac{e^*}{x^*} = \dfrac{x^* - x}{x^*}$ 为近似 $x$ 的相对误差。

**定义 1.6 (相对误差限)** 如果有正数 $\varepsilon_r$，使得 $r = \left|\dfrac{e^*}{x^*}\right| < \varepsilon_r$，则称 $\varepsilon_r$ 为 $x$ 的相对误差限。

**定义 1.7 (有效数字)** 当 $x$ 的误差限为某一位的半个单位，则这一位到第一个非零位的位数称为 $x$ 的有效位数。若有效数字共有 $n$ 个，则称 $x$ 有 $n$ 位有效数字，或者说 $x$ 精确到 $n$ 位。

或者说对于用标准形式表示的近似值 $x^*$

$$x^* = \pm 10^m \times \left(a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}\right)$$
$$a_i \in \{1, 2, \cdots 9\}, i = 1, 2, \cdots n - 1$$

有

$$|x^* - x| < \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$$

**定理 1.1** 对于用标准形式表示的近似值 $x^*$

$$x^* = \pm 10^m \times \left(a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}\right)$$
$$a_i \in \{1, 2, \cdots 9\}, i = 1, 2, \cdots n-1$$

若 $x^*$ 具有 $n$ 位有效数字，则其相对误差限为

$$r \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

反之，若 $x^*$ 的相对误差限 $r \leqslant \dfrac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$，则 $x^*$ 至少具有 $n$ 位有效数字。

*证明.* 对于 $x^*$ 有

$$a_1 \times 10^m \leqslant |x^*| \leqslant (a_1 + 1) \times 10^m$$

则，相对误差限 $r$

$$r = \frac{|x^* - x|}{|x^*|} \leqslant \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}}{a_1 \times 10^m} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

反之，若 $r \leqslant \dfrac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$，有

$$|x^* - x| = r|x^*| < \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)} \times (a_1 + 1) \times 10^m = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$$

则 $x^*$ 至少具有 $n$ 位有效数字。证毕！

**定理 1.2** 四舍五入所得皆为有效数字。

*证明.* 若将精确值 $x$ 表示为

$$x = \pm 10^m \times \left(a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)} + a_{n+1} \times 10^{-n} + \cdots\right)$$

将 $x$ 四舍五入到第 $n$ 位得到 $x^*$

$$x^* = \pm 10^m \times \left(a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a'_n \times 10^{-(n-1)}\right)$$

对于四舍五入到第 $n$ 位得到的 $x^*$，有以下两种情况：

1. $a'_n - a_n = 0$，$a_{n+1} < 5$(靠近原点)

$$\left|(a'_n - a_n) - a_{n-1} \times 10^{-1}\right| < \frac{1}{2}$$

2. $a_n' - a_n = 1$，$5 \leqslant a_{n+1} < 10$(远离原点)

$$\left|(a_n' - a_n) - a_{n-1} \times 10^{-1}\right| < \frac{1}{2}$$

那么 $|x^* - x|$ 有

$$\begin{aligned} |x^* - x| &= 10^{m-n+1} \times |(a_n - a_n') + a_{n-1} \times 10^{-1}| \\ &< \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1} \end{aligned}$$

证毕!

**注** 误差的传播：记 $x^*$ 和 $y^*$ 分别为 $x$ 和 $y$ 的近似值，则初始误差与计算结果中产生的误差有下列关系

$$\varepsilon_{x^* \pm y^*} = \varepsilon_{x^*} + \varepsilon_{y^*},\ \varepsilon_{r_{x^* \pm y^*}} = \frac{\varepsilon_{x^*} + \varepsilon_{y^*}}{x^* \pm y^*}$$

$$\varepsilon_{x^* \cdot y^*} = x^* \varepsilon_{y^*} + y^* \varepsilon_{x^*},\ \varepsilon_{r_{x^* \cdot y^*}} = \frac{x^* \varepsilon_{y^*} + y^* \varepsilon_{x^*}}{x^* \cdot y^*}$$

$$\varepsilon_{\frac{x^*}{y^*}} \approx \frac{x^* \varepsilon_{y^*} + y^* \varepsilon_{x^*}}{y^{*2}},\ \varepsilon_{r_{\frac{x^*}{y^*}}} \approx \frac{x^* \varepsilon_{y^*} + y^* \varepsilon_{x^*}}{x^* \cdot y^*}$$

$$\varepsilon(f(\boldsymbol{x}^*)) \approx \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial f(\boldsymbol{x}^*)}{\partial x_i}\right| \varepsilon(x_i^*)$$

$$\varepsilon_r(f(\boldsymbol{x}^*)) \approx \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial f(\boldsymbol{x}^*)}{\partial x_i}\right| \frac{\varepsilon(x_i^*)}{f(\boldsymbol{x}^*)}$$

**例 1.1** 设 $V = \dfrac{4\pi R^3}{3}$，当半径 $R$ 有误差时，求球体积 $V$ 的相对误差与 $R$ 的相对误差的关系。★★★☆☆

$$e_r[V] = \frac{e[V]}{V} = \frac{4\pi R^2 \cdot e[R]}{\frac{4\pi R^3}{3}} = 3\frac{e[R]}{R} = 3e_r R$$

**例 1.2** 设 $x > 0$，$x$ 的相对误差为 $\delta$，求 $\ln x$ 的误差。★★★★☆

$$\ln x - \ln x^* = \ln \frac{x}{x^*} = \ln \frac{x - x^* + x^*}{x^*} = \ln(\delta + 1) \approx \delta$$

或者

$$e(\ln x^*) \approx \frac{e(x^*)}{x^*} = e_r(x^*) = \delta$$

**例 1.3** 设 $x$ 的相对误差为 2%，求 $x^n$ 的相对误差。★★★★☆

$$e_r(x^n) \approx n\frac{x^{*(n-1)} e(x^*)}{x^{*(n)}} = ne_r(x^*) = 0.02n$$

## 1.3 误差分析方法与原则

**定义 1.8 (病态问题)** 对于一个数值问题，若输入数据的微小扰动（即误差）会引起输出数据（即问题解）相对误差很大，这就是病态问题。

**定义 1.9 (数值稳定性)** 一个算法如果原始数据有扰动（即误差），二计算过程中舍入误差不增长，则称此算法是数值稳定的；否则，若误差增长则称算法数值不稳定。

**注** 数值运算中误差分析的方法与原则

- 避免除数的绝对值远远小于被除数
- 避免两相近数相减
- 防止大数“吃掉”小数
- 注意简化计算步骤，减少运算次数

# 2 数值逼近

## 2.1 插值法

**定义 2.1 (插值函数)** 已知函数 $y = f(x)$ 在互异节点 $\{x_i\}_{i=0}^{n} \subset [a,b]$ 处的函数值 $\{y_i = f(x_i)\}_{i=0}^{n}$，若存在简单函数 $p(x)$，使得

$$p(x_i) = y_i,\ (i = 0, 1, \ldots, n) \tag{2-1}$$

成立，则称 $p(x)$ 是 $f(x)$ 关于节点 $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 的一个插值函数。$\{x_i\}_{i=0}^{n}$——插值节点，$[a,b]$——插值区间，$f(x)$——被插值函数。

**注** 用 $p(z)$ 的值作为 $f(z)$ 的近似值，当元在节点形成的区间上时，称该方法为内插法；当元不在节点形成的区间上但在插值区间上，则称该方法为外插法。

**注** 当插值函数 $p(z)$ 为多项式时，称 $p(x)$ 是 $f(x)$ 的一个插值多项式。插值余项 $R(x) \overset{\text{def}}{=} f(x) - p(x)$，插值余项又称为截断误差。

**定理 2.1 (插值多项式的存在惟一性定理)** 满足插值条件 (2-1) 的不超过 $n$ 次的插值多项式 $p(x)$ 是存在唯一的。

**推论** 若 $f(\alpha)$ 是不超过 $n$ 次的多项式，则它的关于 $n+1$ 个互异节点 $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 的不超过 $n$ 次的插值多项式 $p(x)$ 与被插值函数 $f(x)$ 恒等，即有

$$p(x) \equiv f(x)$$

**注** 误差的估计：

- 若被插值函数 $f(x) \in \boldsymbol{C}^{n+1}[a,b]$，则有插值误差估计式

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

- 若仅需估计某一点 $\bar{x}^*$ 处的插值误差，则利用

$$|R(\bar{x})| \leqslant \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega_{n+1}(\bar{x})|, \bar{x} \in [a,b]$$

- 若要估计在整个插值区间上的误差，用

$$|R(\bar{x})| \leqslant \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega_{n+1}(x)|, \forall x \in [a,b]$$

其中，$M_{n+1}$ 和 $\max\limits_{x\in[a,b]}|\omega_{n+1}(x)|$ 用微积分中求极值的方法进行。

## 2.2 Lagrange 插值

设 $p(x)$ 是形如 $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n$，根据 $n+1$ 个互异节点 $\{x_i\}_{i=0}^n$，得到

$$\begin{cases} a_0 + a_1x_0 + \cdots + a_nx_0^n = y_0, \\ a_0 + a_1x_1 + \cdots + a_nx_1^n = y_1, \\ \vdots \\ a_0 + a_1x_n + \cdots + a_nx_n^n = y_n. \end{cases}$$

因为

$$V_n(x_0, x_1, \cdots, x_n) = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{vmatrix} \neq 0$$

所以方程存在唯一一组解 $a_0, a_1, \cdots, a_n$，故而拉格朗日插值多项式也存在且唯一。

$$p_n(x) = L_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i)l_i(x)$$

拉格朗日插值多项式需要满足 $p_n(x_i) = f(x_i)$，故而 $n$ 次多项式 $l_i(x)$ 需要满足

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

可以将拉格朗日插值基函数 $\{l_i(x)\}_{i=0}^n$ 的定义如下：

$$l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_i)\omega'_{n+1}(x_i)}$$

其中

$$\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$
$$\omega'_{n+1}(x_k) = (x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})(x_k-x_n)$$

**定理 2.2 (插值余项定理)** 设 $f^n(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续，$f^{n+1}(x)$ 在 $(a,b)$ 上存在，节点 $a \leqslant x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leqslant b$，$L_n(x)$ 是满足条件 $p_n(x_i) = f(x_i)$ 的多项式，则对任何 $x \in [a,b]$，插值余项

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

这里，$\xi \in (a,b)$ 且依赖于 $x$。

**证明.** 由给定条件知，$R_n(x)$ 在 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 上为 0，即

$$R_n(x_i) = 0$$

于是

$$R_n(x) = K(x)\omega_{n+1}(x)$$

其中 $K(x)$ 是与 $x$ 有关的待定系数。现在把 $x$ 看成 $[a,b]$ 上的一个固定点，做函数

$$\phi(t) = f(t) - L_n(t) - K(x)\omega_{n+1}(t)$$

容易知道 $\phi(t)$ 在点 $x, x_0, \cdots, x_n$ 这 $n+2$ 个点上满足 $\phi(t) = 0$，反复利用 Rolle 定理，知道

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

于是

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

证毕！

**评论** $\xi$ 在 $(a,b)$ 内的具体位置通常不可能给出，如果可以求出 $\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|f^{(n+1)}(x)| = M_{n+1}$，那么插值多项式 $L_n(x)$ 逼近 $f(x)$ 的截断误差是

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

**推论** 若 $f(x)$ 是不超过 $n$ 次的多项式，则它的关于 $n+1$ 个互异节点 $\{x_i\}_{i=0}^n n$ 次的拉格朗日插值多项式 $L_n(x)$ 有

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = 0$$

即

$$f(x) = L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)l_i(x)$$

**例 2.1** 证明 $\sum\limits_{i=0}^{5}(x-x_i)^2 l_i(x)=0$，其中 $l_i(x)$ 是关于 $\{x_0,x_1,\cdots,x_5\}$ 的插值基函数。

★★★★★

**证明.**

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=0}^{5}(x-x_i)^2 l_i(x) &= x^2\sum_{i=0}^{5}1\cdot l_i(x)-2x\sum_{i=0}^{5}x_i\cdot l_i(x)+\sum_{i=0}^{5}x_i^2\cdot l_i(x)\\
&= x^2-2x\cdot x+x^2=0
\end{aligned}
$$

证毕！

**例 2.2** 对一条直线采样 10 个点进行 Lagrange 插值，所得插值多项式是 [1] 次的。

**注** Aitken 逐次线性插值法：

用 Lagrange 插值多项式 $L_n(x)$ 计算函数近似值时，如需增加插值节点，那么原来算出来的数据均不能利用，必须重新计算。为克服这个缺点通常可用逐次线性插值方法得到高次插值。

两个 $k$ 次插值多项式可通过线性插值得到 $k+1$ 次插值多项式

$$
I_{0,1,\cdots,k,l}(x)=I_{0,1,\cdots,k}(x)+\frac{I_{0,1,\cdots,k-1,l}(x)-I_{0,1,\cdots,k}(x)}{x_l-x_k}(x-x_k) \tag{2-2}
$$

这是关于节点 $\{x_0,\cdots,x_k,x_l\}$ 的插值多项式。显然

- 对于 $i=0,1,\cdots,k-1$

$$
I_{0,1,\cdots,k,l}(x_i)=I_{0,1,\cdots,k}(x_i)=f(x_i)
$$

- 对于 $x_k$

$$
I_{0,1,\cdots,k,l}(x_k)=I_{0,1,\cdots,k}(x_k)=f(x_k)
$$

- 对于 $x_l$

$$
I_{0,1,\cdots,k,l}(x_l)=I_{0,1,\cdots,k}(x_l)+\frac{f(x_l)-I_{0,1,\cdots,k}(x_l)}{x_l-x_k}(x_l-x_k)=f(x_l)
$$

这证明了 (2-2) 满足插值条件。

当 $k=0$ 时为线性插值，当 $k=1$ 时插值节点为 $x_0,x_1,x_l$，插值多项式为

$$
I_{0,1,l}(x)=I_{0,1}(x)+\frac{I_{0,l}(x)-I_{0,1}(x)}{x_l-x_1}(x-x_1)
$$

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $x_0$ | $f(x_0)$ | | | | | $x-x_0$ |
| $x_1$ | $f(x_1)$ | $I_{0,1}$ | | | | $x-x_1$ |
| $x_2$ | $f(x_2)$ | $I_{0,2}$ | $I_{0,1,2}$ | | | $x-x_2$ |
| $x_3$ | $f(x_3)$ | $I_{0,3}$ | $I_{0,1,3}$ | $I_{0,1,2,3}$ | | $x-x_3$ |
| $x_4$ | $f(x_4)$ | $I_{0,4}$ | $I_{0,1,4}$ | $I_{0,1,2,4}$ | $I_{0,1,2,3,4}$ | $x-x_4$ |

## 2.3 Newton 插值

$$p_n(x)=N_n(x)=\sum_{i=0}^{n} f\left[x_0,x_1,\cdots,x_i\right]\omega_i(x)$$

其中零阶插商

$$f\left[x_0\right]=f(x_0),\ \omega_0(x)\equiv 1,\ \omega_i(x)=\prod_{k=0}^{i-1}(x-x_k)$$

**定义 2.2 (差商)** 称 $f\left[x_0,x_k\right]=\dfrac{f(x_k)-f(x_0)}{x_k-x_0}$ 为函数 $f(x)$ 关于 $x_0,x_k$ 的一阶差商，称

$$f\left[x_0,x_l,x_k\right]=\frac{f\left[x_0,x_k\right]-f\left[x_0,x_l\right]}{x_k-x_l}$$

为 $f(x)$ 关于 $x_0,x_k,x_l$ 的二阶差商。一般的称

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_m]=\frac{f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-2},x_m]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-2},x_{k-1}]}{x_m-x_{k-1}}$$

为 $f(x)$ 的 $k$ 阶差商。

**注** 插值误差：把 $x$ 当作 $[a,b]$ 一点，可得

$$f(x)=f(x_0)+f\left[x,x_0\right](x-x_0)$$
$$f(x)=f(x_0)+f\left[x_0,x_1\right](x-x_0)+f\left[x,x_0,x_1\right](x-x_0)(x-x_1)$$
$$\cdots$$
$$\begin{aligned}f(x)\ &=f(x_0)+f\left[x_0,x_1\right](x-x_0)\\ &+f\left[x_0,x_1,x_2\right](x-x_0)(x-x_1)+\cdots\\ &+f\left[x_0,\cdots,x_n\right](x-x_0)\cdots(x-x_{n-1})\\ &+f\left[x,x_0,\cdots,x_n\right]\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\rightarrow \text{插值误差 or 余项}R_n(x)\end{aligned}$$

由上，得

$$f(x)=N_n(x)+f\left[x,x_0,\cdots,x_n\right]\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$$

和拉格朗日插值对比

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

**注** 差商有如下性质：

1. $k$ 阶差商可表示为函数值 $f(x_0),\cdots,f(x_k)$ 的线性组合，即

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\sum_{j=0}^{k}\frac{f(x_j)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j+1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_k)}.$$

   这个性质也表明差商与节点的排列顺序无关（插值的对称性）。

2. 差商与导数的关系

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!},\quad \xi\in[a,b]. \tag{2-3}$$

**证明.**

$$f(x)=N_{n-1}(x)+f\left[x,x_0,\cdots,x_{n-1}\right]\omega_n(x)$$

记 $R(x)=f(x)-N_{n-1}(x)=f\left[x,x_0,\cdots,x_{n-1}\right]\omega_n(x)$，固定 $x$，令

$$g(t)=f(t)-N_{n-1}(x)-f\left[x,x_0,\cdots,x_{n-1}\right]\omega_n(t)$$

对于 $\{x,x_0,\cdots,x_{n-1}\}$ 有

$$g(x)=g(x_0)=\cdots=g(x_{n-1})=0$$

反复利用 Rolle 定理，得到

$$g^{(n)}(\xi)=f^{(n)}(\xi)-f\left[x,x_0,\cdots,x_{n-1}\right]n!=0$$

即（这一步将 $x_n$ 带入 $x$，并利用插值的对称性）

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!},\quad \xi\in[a,b].$$

证毕！

| $x_k$ | $f(x_k)$ | 一阶差商 | 二阶差商 | 三阶差商 | 四阶差商 |
|---|---|---|---|---|---|
| $x_0$ | $f(x_0)$ | | | | |
| $x_1$ | $f(x_1)$ | $f[x_0,x_1]$ | | | |
| $x_2$ | $f(x_2)$ | $f[x_1,x_2]$ | $f[x_0,x_1,x_2]$ | | |
| $x_3$ | $f(x_3)$ | $f[x_2,x_3]$ | $f[x_1,x_2,x_3]$ | $f[x_0,x_1,x_2,x_3]$ | |
| $x_4$ | $f(x_4)$ | $f[x_3,x_4]$ | $f[x_2,x_3,x_4]$ | $f[x_1,x_2,x_3,x_4]$ | $f[x_0,x_1,x_2,x_3,x_4]$ |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ |

### 2.3.1 差分与等距节点插值公式

设等式 $y=f(x)$ 在等距节点 $x_k=x_0+kh\,(k=0,1,\cdots,n)$ 上的值 $f_k=f(x_k)$ 为已知，这里 $h$ 为常数，称为步长。

**定义 2.3 (偏差)**

$$\Delta f_k = f_{k+1} - f_k$$
$$\nabla f_k = f_k - f_{k-1}$$
$$\delta f_k = f(x_k + h/2) - f(x_k - h/2) = f_{k+\frac{1}{2}} - f_{k-\frac{1}{2}}$$

分别为向前差分、向后差分以及中心差分。

**推论 (差商与差分的关系★★★★★)**

$$f[x_k, x_{k+1}, \cdots, x_{k+m}] = \frac{1}{m!}\frac{1}{h^m}\Delta^m f_k,\ (m = 1, 2, \cdots, n)$$

$$f[x_k, x_{k-1}, \cdots, x_{k-m}] = \frac{1}{m!}\frac{1}{h^m}\Delta^m f_k$$

同时利用 (2-3) 可以得到

$$\Delta^n f_k = h^n f^{(n)}(\xi),\ \xi \in (x_k, x_{k+n})$$

## 2.4 Hermite 插值

不少实际问题不但要求在节点上函数值相等，而且还要求它的导数值相等，甚至要求高阶导数值也相等. 满足这种要求的插值多项式就是 Hermite 插值多项式.

已知节点 $\{x_j\}_{j=0}^n$，满足

$$H(x_j) = y_j,\ H'(x_j) = m_j = f'(x_j)$$

可以确定 $2n+1$ 次的多项式

$$H_{2n+1}(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_{2n+1}x^{2n+1} \tag{2-4}$$

插值误差

$$R_n(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)$$

用基函数表示 (2-4) 为

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n}[\alpha_i(x)f_i + \beta_i(x)f_i']$$

其中 $\alpha_i(x)$ 和 $\beta_i(x)$ 均为 $2n+1$ 次多项式，且满足

$$\begin{cases} \alpha_i(x_k) = \delta_{ik}, & \alpha_i'(x_k) = 0 \\ \beta_i(x_k) = 0, & \beta_i'(x_k) = \delta_{ik} \end{cases} \tag{2-5}$$

**注** 下面的问题就是求满足条件 (2-5) 的基函数 $\alpha_i$ 和 $\beta_i(x)$。

- 先求 $\alpha_i(x)$，可利用 Lagrange 插值基函数 $l_i(x)$，令（1.2$n$+1 次多项式，2. 在 $x_j \neq x_i$ 处为 2 重零点）

$$\alpha_i(x) = [a(x-x_i)+b]l_i^2(x)$$

其中 $l_i(x) = \prod_{j=0,j\neq i}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}$。由 $\alpha_i(x_i)=1$，知 $b=1$；由 $\alpha_i'(x_i)=0$ 知

$$\begin{aligned}
&al_i^2(x_i)+2[a(x_i-x_i)+1]l_i(x_i)l_i'(x_i)=0\\
&a=-2l_i'(x_i)\\
&(\ln l_i(x_i))' = \frac{l_i'(x_i)}{l_i(x_i)} = \sum_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n} \frac{1}{(x_i-x_j)}\\
&a=-2\sum_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n} \frac{1}{(x_i-x_j)}
\end{aligned}$$

故而有

$$\alpha_i(x) = \left[1-2(x-x_i)\sum_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n} \frac{1}{(x_i-x_j)}\right] l_i^2(x)$$

- 再求 $\beta_i(x)$，同理设 $\beta_i(x)=[a(x-x_i)+b]l_i^2(x)$（1.2$n+1$ 次多项式，2. 在 $x_j\neq x_i$ 处为 2 重零点）。由 $\beta_i(x_i)=0$，知 $b=0$；由 $\beta_i'(x_i)=1$ 知，

$$\begin{aligned}
&al_i^2(x_i)+2[a(x_i-x_i)+0]l_i(x_i)l_i'(x_i)=1\\
&a=1
\end{aligned}$$

故而有

$$\beta_i(x)=(x-x_i)l_i^2(x)$$

综上，

$$\begin{aligned}
\alpha_i(x) &= \left[1-2(x-x_i)\sum_{j=0,j\neq i}^{n} \frac{1}{(x_i-x_j)}\right] l_i^2(x)\\
\beta_i(x) &= (x-x_i)l_i^2(x)
\end{aligned}$$

**例 2.3** 设 $f(x)=\ln x$，给定 $f(1)=0, f(2)=0.693147, f'(1)=1, f'(2)=0.5$，用三次 Hermite 插值多项式 $H_3(x)$ 计算 $f(1.5)$ 的近似值。★★★★★

请写出 $x=1$ 处的导数值基函数 $\beta_1(x)$ 和 $x=2$ 处的函数值基函数 $\alpha_2(x)$

**解** $\beta_1(x)=(x-1)\left[\frac{(x-2)}{1-2}\right]^2, \quad \alpha_2(x)=\left[1-2(x-2)\frac{1}{2-1}\right]\left[\frac{(x-1)}{2-1}\right]^2$

**例 2.4** 求一个次数不高于四次的多项式 $p(x)$，使它满足 $p(0)=p'(0)=0$, $p(1)=p'(1)=1$, $p(2)=1$。★★★★★

**解** [解法一]：设 $p(x)=[\alpha_1(x)p(0)+\alpha_2(x)p(1)+\alpha_3(x)p(2)+\beta_1(x)p'(0)+\beta_2(x)p'(1)]$，满足 可以设

| | 函数值 | | | 导数值 | |
|---|---|---|---|---|---|
| | 0 | 1 | 2 | 0 | 1 |
| $\alpha_1(x)$ | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| $\alpha_2(x)$ | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| $\alpha_3(x)$ | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| $\beta_1(x)$ | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| $\beta_2(x)$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |

$$\begin{aligned}
\alpha_1(x) &= (ax+b)(x-1)^2(x-2) \\
\alpha_2(x) &= (ax+b)x^2(x-2) \\
\alpha_3(x) &= bx^2(x-1)^2 \\
\beta_1(x) &= (ax+b)x(x-1)^2 \\
\beta_2(x) &= (ax+b)x^2(x-1)
\end{aligned}$$

上述做法要解多个 2 元方程，虽然每个方程计算量不大。

[解法二]：可以看出关于 $x=0$ 为二重根，设 $p(x)=(ax^2+bx+c)x^2$，可以通过求解 1 个三元方程组

[解法三]：由给定的条件，可确定次数不超过 4 的插值多项式

$$p(x)=f(0)+f[0,1](x-0)+f[0,1,2](x-0)(x-1)+(ax+b)(x-0)(x-1)(x-2)$$

**例 2.5** 求次数不高于三次的多项式 $p(x)$，使得 $p(x_i)=f(x_i)(i=0,1,2)$ 及 $p'(x_1)=f'(x_1)$ 的插值多项式★★★★☆

**解** 可以设 $p(x)$ 为

$$\begin{aligned}
&p(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)+ \\
&A(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)
\end{aligned}$$

可以得到

$$A=\frac{f'(x_1)-f[x_0,x_1]-f[x_0,x_1,x_2](x_1-x_0)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

## 2.5 分段低次插值

### 2.5.1 分段线性插值

设已知节点 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ 上的函数值为 $f_0,f_1,\cdots,f_n,h_i=x_{i+1}-x_i$, $h=\max_{0\le i\le n-1}h_i$, 若一折线 $I_h(x)$ 满足条件：

1. $I_h(x) \in C[a,b]$;
2. $I_h(x_i) = f_i, i = 0, 1, \cdots, n$;
3. $I_h(x)$ 在每个小区间 $[x_i, x_{i+1}](i = 0, 1, \cdots, n-1)$ 上为线性函数。

则称 $I_h(x)$ 为分段线性函数，相应的插值为分段线性插值。

$$I_h(x) = \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} f_i + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} f_{i+1}, \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

**例 2.6** 分段线性插值可否用基函数表示，若能，请写出基函数; 若不能，请说明理由

**解** 其基函数可表示为

$$l_i(x) = \begin{cases} \dfrac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, x_{i-1} \le x \le x_i \\ \dfrac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}, x_i \le x \le x_{i+1} \\ 0, \text{其他} \end{cases}$$

**注** 分段线性插值的误差估计

- 若 $f(x) \in C[a,b]$, 则当 $h \to 0$ 时 $I_h(x)$ 一致收敛于 $f(x)$。
- 若 $f(x) \in C^2[a,b]$, 则余项 $R(x) = f(x) - I_h(x)$ 有估计式

$$\mid R(x) \mid \le \frac{Mh^2}{8}, M = \max_{a \le x \le b} \mid f''(x) \mid$$

### 2.5.2 分段 Hermite 插值

**定义 2.4 (分段 Hermite 插值)** 设已知节点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n < b$ 上的函数值为 $f_0, f_1, \cdots, f_n$，导数值为 $f_0', f_1', \cdots, f_n'$ 满足插值条件

- $I_h(x) \in C^1 [a,b]$
- $I_h(x_i) = f_i$, $I_h'(x_i) = f_i'$
- $I_h(x)$ 在每个小区间为 3 次多项式

## 2.6 三次样条插值

**定义 2.5 (三次样条插值)** 给定 $[a,b]$ 上 $n+1$ 个节点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 和这些点上的函数值 $f(x)_i = y_i$, $i = 0, 1, \cdots, n$。若函数 $S(x)$ 满足条件

1. $S(x_i) = f_i$
2. $S(x) \in C^2[a,b]$
3. $S(x)$ 在每个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上为三次多项式

则称 $S(x)$ 为 $[a,b]$ 上的三次样条插值函数。

**例 2.7** 设 $S(x)=\begin{cases}x^3+x^2, 0\le x\le 1\\ 2x^3+ax^2+bx+c, 1\le x\le 2\end{cases}$ 是以 0,1,2 为节点的三次样条函数，则 $a,b,c$ 应取何值？

**解**

$$\frac{\mathrm{d}(x^3+x^2)}{\mathrm{d}x}=3x^2+2x \qquad \frac{\mathrm{d}^2(x^3+x^2)}{\mathrm{d}x^2}=6x+2$$
$$\frac{\mathrm{d}(2x^3+ax^2+bx+c)}{\mathrm{d}x}=6x^2+2ax+b \qquad \frac{\mathrm{d}^2(2x^3+ax^2+bx+c)}{\mathrm{d}x^2}=12x+2a$$

$$\begin{cases}2+a+b+c=2\\ 6+2a+b=5\\ 12+2a=8\end{cases}$$

解得

$$a=-2, b=3, c=-1$$

给定 $n+1$ 个插值节点，确定 $S(x)$ 需要确定 $4n$（每个区间 4 个参数）。现在有以下

- $S(x_j)=f(x_j)\quad$ (n+1) 个
- $S(x_{j+0})=f(x_{j-0})\quad$ (n-1) 个
- $S'(x_{j+0})=f'(x_{j-0})\quad$ (n-1) 个
- $S''(x_{j+0})=f''(x_{j-0})\quad$ (n-1) 个

少两个条件。

# 3 函数逼近

## 3.1 最佳一致逼近

**定义 3.1** 设 $f\in C[a,b], p_n\in H_n=\mathrm{Span}\{1,x,\cdots,x^n\}$, 称

$$\Delta(f,p_n)=\| f-p_n \|_\infty=\max_{a\le x\le b}| f(x)-p_n(x) |$$

为 $p_n$ 与 $f$ 的偏差

$$E_n=\inf_{p_n\in H_n}\Delta(f,p_n)$$

为 $p_n$ 与 $f$ 的最小偏差

若 $\exists p_n^*\in H_n$，使 $\Delta(f,p_n^*)=E_n$，则称 $p^*$ 为 $f$ 在 $[a,b]$ 上的最佳一致逼近多项式，简称最佳逼近多项式。

**定义 3.2 (偏差点)** 设 $f \in C[a,b], p_n \in H_n$，若 $\exists x_0 \in [a,b]$ 使得

$$| f(x_0) - p(x_0) | = \Delta(f,p) = \mu$$

则称 $x_0$ 是 $p$ 关于 $f$ 的偏差点。

- 若 $p(x_0) - f(x_0) = \mu$，则称 $x_0$ 为正偏差点。
- 若 $p(x_0) - f(x_0) = -\mu$，则称 $x_0$ 为负偏差点。

**定理 3.1** 设 $p_n^* \in H_n$ 为 $f \in [a,b]$ 的最佳一致逼近多项式，则 $p_n^*$ 关于 $f$ 的正负偏差点同时存在。

### 3.1.1 Chebyshev 多项式

**定义 3.3 (Chebyshev 多项式)** 当权函数 $\rho(x) = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，区间为 $[-1,1]$ 时，得到的正交多项式就是 Chebyshev 多项式，它可以表示为

$$T_n(x) = \cos\left(n \arccos x\right), \quad |x| \leqslant 1$$

**推论** 递推关系

$$\begin{gathered} T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x \\ T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad (n = 1, 2, \cdots, n) \end{gathered}$$

由递推关系式还可以得到 $T_n(x)$ 的最高项系数为 $2^{n-1}(n \geqslant 1)$

*证明.* 由和差化积 $\cos(n+1)x - \cos(n-1)x = 2\cos(nx)\cos(x)$ 并令 $x = \arccos x$ 得到

$$\begin{gathered} T_{n+1}(x) - T_{n-1}(x) = 2xT_n(x) \\ \Rightarrow T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) + T_{n-1}(x) \end{gathered}$$

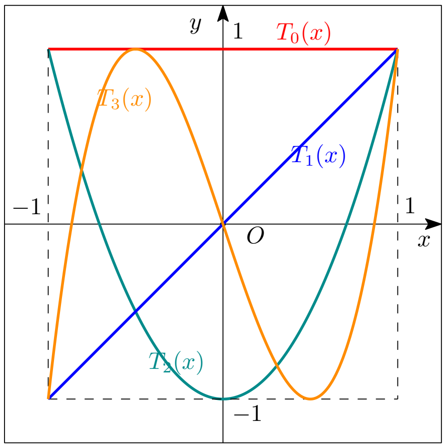
证毕！

**推论** $T_n(x)$ 对零的偏差最小，可以写成如下定理。

**定理 3.2** 在区间 $[-1,1]$ 上所有最高项系数为 1 的一切 $n$ 次多项式中，$\widetilde{T}_n(x) = \dfrac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$ 与零的偏差最小，其偏差为 $\dfrac{1}{2^{n-1}}$ ★★★★★

**注** $T_n(x)$ 的函数及其图形如下：

$$
\begin{aligned}
&T_0(x) = 1 \\
&T_1(x) = x \\
&T_2(x) = 2x^2 - 1 \\
&T_3(x) = 4x^3 - 3x \\
&T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1 \\
&T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x \\
&T_6(x) = 32x^5 - 48x^4 + 18x^2 - 1 \\
&T_7(x) = 64x^7 - 112x^5 + 56x^3 - 7x \\
&T_8(x) = 128x^8 - 256x^5 + 160x^4 - 32x^2 + 1
\end{aligned}
$$




**注** 性质：

1. 正交性

$$
(T_n, T_m) = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ \dfrac{\pi}{2} & m = n \neq 0 \\ \pi & m = n = 0 \end{cases}
$$

2. 递推关系 $T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) + T_{n-1}(x)$
3. 奇偶性 $T_n(-x) = (-1)^n T_n(x)$

**例 3.1** 设 $f(x) = x^4$，在 $[-1, 1]$ 上求 $H_3$ 中的最佳逼近多项式。★★★☆☆

**解** 由定理 3.2知道

$$
\frac{f(x) - p_3^*(x)}{1} = \frac{T_4(x)}{2^{4-1}}
$$

其中 $T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$，故而

$$
\begin{aligned}
p_3^*(x) &= f(x) - \frac{T_4(x)}{2^3} \\
&= x^2 - \frac{1}{8}
\end{aligned}
$$

**例 3.2** 求 $f(x) = 2x^3 + x^2 + 2x - 1$ 在 $[-1, 1]$ 上的最佳一致逼近多项式。★★★★☆

**解**

$$
\frac{f(x) - p_2^*(x)}{a_n} = \frac{T_3(x)}{2^{n-1}}
$$
变成最高次系数为 1 的多项式

故

$$
p_2^*(x) = f(x) - \frac{1}{2}T_3(x) = x^2 + \frac{7}{2}x - 1
$$

**定理 3.3** 若 $P(x) \in H_n$ 是 $f(x) \in C[a, b]$ 的最佳逼近多项式，则 $P(x)$ 同时存在正负偏差点。

**定理 3.4 (Chebyshev)** $p_n^* \in H_n$ 是 $f \in C[a,b]$ 的最佳逼近多项式的充要条件是：在 $[a,b]$ 上至少有 $n+2$ 个轮流为正负的偏差点，即至少有 $n+2$ 个点 $a \leqslant x_1 \leqslant x_2 \leqslant \cdots \leqslant x_{n+2} \leqslant b$ 使得

$$p_n^*(x_k) - f(x_k) = (-1)^k \sigma \|f - p_n^*\|_\infty,\ \sigma = \pm 1,\ k = 1, 2, \cdots, n+2$$

上述点 $\{x_k\}_1^{n+2}$ 称为切比雪夫交错点。

**推论** 设 $f \in C[a,b]$，则在 $H_n$ 中的最佳逼近多项式是唯一的。

**推论** 若 $f \in C[a,b]$，则其最佳逼近多项式 $p_n^*(x) \in H_n$ 是 $f$ 的一个拉格朗日多项式。

**例 3.3** 假定 $f(x) \in C^2[a,b]$，且 $f''(x)$ 在 $(a,b)$ 内不变号，求最佳一次逼近多项式 $P_1(x) = a_0 + a_1 x$。★★★★★

**解** 根据定理 3.4可知，至少有 3 个点 $a \leqslant x_1 \leqslant x_2 \leqslant x_3 \leqslant b$ 使得

$$P_1(x_k) - f(x_k) = (-1)^k \sigma \max_{a \leqslant x \leqslant b} |P_1(x) - f(x)|$$

由于 $f''(x)$ 在 $(a,b)$ 内不变号，故 $f'(x)$ 单调，$f'(x) - a_1$ 在 $(a,b)$ 内只有一个零点，记为 $x_2$，于是

$$P_1'(x_2) - f'(x_2) = a_1 - f'(x_2) = 0, \quad 即\ f'(x_2) = a_1$$

另外两个偏差点必在区间端点，即 $x_0 = a, x_1 = b$，且满足

$$P_1(a) - f(a) = P_1(b) - f(b) = -[P_1(x_2) - f(x_2)]$$

由此得到

$$\begin{cases} a_0 + a_1 a - f(a) = a_0 + a_1 b - f(b) \\ a_0 + a_1 a - f(a) = f(x_2) - (a_0 + a_1 x_2). \end{cases}$$

解得

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{f(b) - f(a)}{b - a} = f'(x_2) \\ a_0 &= \frac{f(a) + f(x_2)}{2} - \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \frac{a + x_2}{2} \end{aligned}$$

**例 3.4** $f(x) = \sqrt{x^2 + 1}$，求 $[0,1]$ 上的最佳一次逼近多项式。★★½☆☆

**解** 先求 $x_2$ 和 $f(x_2)$

$$\begin{aligned} & f'(x_2) = \frac{x_2}{\sqrt{x_2^2 + 1}} = \frac{f(1) - f(0)}{1 - 0} = \sqrt{2} - 1 \approx 0.414 \\ & \Rightarrow x_2 = \sqrt{\frac{\sqrt{2} - 1}{2}} \approx 0.4551,\ f(x_2) = \sqrt{1 + x_2^2} = 1.0986 \end{aligned}$$

## 3.2 最佳平方逼近

**定义 3.4 (正交函数)** 若 $f(x), g(x) \in C[a,b]$ 满足

$$(f,g) = \int_a^b \rho(x)f(x)g(x)\mathrm{d}x = 0,$$

则称 $f$ 与 $g$ 在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交。若函数族 $\varphi_0(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 满足关系

$$(\varphi_j,\varphi_k) = \int_a^b \rho(x)\varphi_j(x)\varphi_k(x)\mathrm{d}x = \begin{cases} 0, & j \neq k, \\ A_k > 0, & j = k, \end{cases}$$

则称 $\varphi_k$ 是 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 得正交族函数。

**定理 3.5** 若 $(f,g) \in C[a,b]$，则有

$$\begin{aligned} &|(f,g)| \leqslant \|f\|_2\|g\|_2 && \text{柯西不等式} \\ &\| f+g \|_2 \leqslant \| f \|_2 + \| g \|_2 && \text{三角不等式} \\ &\| f+g \|_2^2 + \| f-g \|_2^2 = 2(\| f \|_2^2 + \| g \|_2^2) && \text{平行四边形定律} \end{aligned}$$

**定义 3.5 (最佳平方逼近函数)** 设 $f \in [a,b]$，若 $\exists \varphi^* \in \Phi = \mathrm{Span}\{\varphi_0,\cdots,\varphi_n\}$ 使得

$$\|f-\varphi^*\|_2^2 = \inf_{\varphi\in\Phi} \|f-\varphi\|_2^2$$

则称 $\varphi^*$ 为 $f$ 在 $\Phi$ 中的最佳平方逼近函数。

**注** 上述问题等价于求多元函数

$$I(a_0,a_1,\cdots,a_n) = \int_a^b \rho(x)\left[\sum_{j=0}^n a_j\varphi(x) - f(x)\right]^2 \mathrm{d}x$$

的最小值。由于 $I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$ 是关于 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 的二次函数，利用多元函数极值的必要条件

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 2\int_a^b \rho(x)\left[\sum_{j=0}^n a_j\varphi_j(x) - f(x)\right]\varphi_k(x)\mathrm{d}x = 0, \quad (k=0,1,\cdots,n),$$

$$\int_a^b \rho(x)\varphi_k(x)\sum_{j=0}^n a_j\varphi_j(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x)f(x)\varphi_k(x)\mathrm{d}x, \quad (k=0,1,\cdots,n),$$

于是有法方程

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

系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix}$$

**例 3.5** 设 $f(x)=\sqrt{1+x^2}$，求 $[0,1]$ 上的一次最佳平方逼近多项式 $p_1^*(x)=a_0^*+a_1^*x$⭐⭐⭐⭐⭐

解：系数：

$$(\varphi_0,\varphi_0)=1,\quad (\varphi_0,\varphi_1)=\frac{1}{2},\quad (\varphi_1,\varphi_1)=\frac{1}{3}$$

$$(f,\varphi_0)=\int_0^1 f(x)\cdot 1\mathrm{d}x,\quad (f,\varphi_1)=\int_0^1 f(x)\cdot x\mathrm{d}x$$

## 3.3 正交多项式

若取 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^n$ 为正交多项式族，求 $f$ 在 $\Phi=\mathrm{Span}\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\}$ 上的最佳平方逼近，此时法方程的的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为对角阵。

$$a_k^*=\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)},\quad k=0,1,\cdots n$$

**定义 3.6 (正交多项式族)** 若 $\varphi_n$ 是首项次数 $a_n\neq 0$ 的 $n$ 次多项式，若

$$(\varphi_i,\varphi_j)=\int_a^b \varphi_i\varphi_j\rho(x)dx=\begin{cases}0 & i\neq j\\ A_i\neq 0 & i=j\end{cases}$$

则称多项式族序列 $\{\varphi_i\}_0^\infty$ 是在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(X)$ 的正交多项式族，$\varphi_n$ 是在 $[a,b]$ 上带权 $\rho$ 的正交多项式序列。

**定义 3.7 (施密特正交化)** $x^n$ 减去投影到 $1,\cdots,x^{n-1}$ 方向的分量：

- $\dfrac{(x^n,\varphi_k)}{\|\varphi_k\|_2}$：$x^n$ 投影到 $\varphi_k$ 方向的长度
- $\dfrac{\varphi_k}{\|\varphi_k\|_2}$：$\varphi_k$ 方向的单位向量

序列 $\{x^n\}_0^\infty$ 线性无关且正交。

$$\varphi_0(x)=1,\quad \varphi_n(x)=x^n-\sum_{k=0}^{n-1}\frac{(x^n,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}\varphi_k$$

**定理 3.6** 设 $\{\varphi_n\}_0^\infty$ 在 $[a,b]$ 上带权 $\rho$ 的正交多项式序列，则 $\varphi_n(n\geqslant 1)$ 的 $n$ 个根都是单重实根，且都在 $(a,b)$ 内。

*证明.* 设 $\varphi_n(x)$ 有 $m$ 个奇数重根（$m\leqslant n$），记为 $x_1,\cdots,x_m$，证明上述定理就是证明 $m=n$。

记

$$q(x)=(x-x_1)\cdots(x-x_m)$$

那么 $\varphi_n(x)q(x)$ 在 $(a,b)$ 内不变号，

$$(\varphi_n(x), q(x)) = \int_a^b \varphi_n(x)q(x)\mathrm{d}x \neq 0$$

因为（$q(x)$ 可以表示为正交多项式序列 $\{\varphi_n\}_0^n$ 的线性组合），那么若 $m < n$，则 $(\varphi_n(x), q(x)) = 0$。故而 $m = n$，即 $\varphi_n(x)$ 有 $n$ 个单根。证毕！

**定义 3.8 (勒让德（Legendre）多项式)** 区间为 $[-1,1]$ 和权函数为 $\rho = 1$，由 $\{1, x, \cdots\}$ 正交化得到的多项式称为 Legendre 多项式。

下面试着写几个 Legendre 多项式

- $P_0(x) = 1$
- $P_1(x) = x$
- $P_2(x)$

$$\begin{aligned}
P_2(x) &= x^2 - \frac{(x^2,1)}{(1,1)} \cdot 1 - \frac{(x^2,x)}{(x,x)} \cdot x \\
&= x^2 - \frac{\int_{-1}^1 x^2 \cdot 1\mathrm{d}x}{\int_{-1}^1 1 \cdot 1\mathrm{d}x} \cdot 1 - \frac{\int_{-1}^1 x^2 \cdot x\mathrm{d}x}{\int_{-1}^1 x \cdot x\mathrm{d}x} \cdot x \\
&= x^2 - 2\frac{1/3}{2} - \frac{0}{2/3}x = x^2 - \frac{1}{3}
\end{aligned}$$

通项可以写为

$$P_0(x) = 1, P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\{(x^2-1)^n\}, n = 1,2,\cdots$$

**推论** Legendre 多项式有以下性质

1. 正交性

$$(P_m, P_n) = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ \dfrac{2}{2n+1}, & m = n \end{cases}$$

2. 递推关系

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x), \quad n = 1,2,\cdots$$

3. 奇偶性

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$$

**定理 3.7** 在所有首项系数为 1 的 $n$ 次多项式中，Legendre 多项式 $\tilde{P}_n(x)$ 在 $[-1,1]$ 上与零的平方误差最小。

**证明.** 设 $Q_n(x)$ 是首项系数为 1 的 $n$ 次的多项式

$$Q_n(x) = \tilde{P}_n(x) + \sum_{k=1}^n a_k \tilde{P}_k(x)$$

$$
\begin{aligned}
\|Q_n(x)\|_2^2 &= (Q_n(x), Q_n(x)) \\
&= (\tilde{P}_n(x) + \sum_{k=1}^{n-1} a_k \tilde{P}_k(x), \tilde{P}_n(x) + \sum_{k=1}^{n-1} a_k \tilde{P}_k(x)) \\
&= (\tilde{P}_n(x), \tilde{P}_n(x)) + \sum_{k=0}^{n-1} (a_k \tilde{P}_k, a_k \tilde{P}_k) \\
&\geqslant \|\tilde{P}_n(x)\|_2^2
\end{aligned}
$$

当且仅当 $a_0 = a_1 = \cdots = a_{n-1} = 0$ 时取等号。证毕!

## 3.4 最小二乘法

**定义 3.9 (最小二乘问题)** 设 $f$ 由函数表 $(x_i, f_i)$, $i = 1, 2, \cdots, m$ 给出,求 $\varphi^* \in \Phi = \mathrm{Span}\{\varphi_0, \cdots, \varphi_n\}, n < m$, 使

$$
\| f - \varphi^* \|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} [f_i - \varphi^*(x_i)]^2 \rho_i = \inf_{\varphi \in \Phi} \| f - \varphi \|_2^2
$$

就是曲线拟合的最小二乘问题,称 $\varphi^*(x)$ 为 $f$ 在 $\Phi$ 中的最小二乘逼近函数。

求解上述问题也就是求

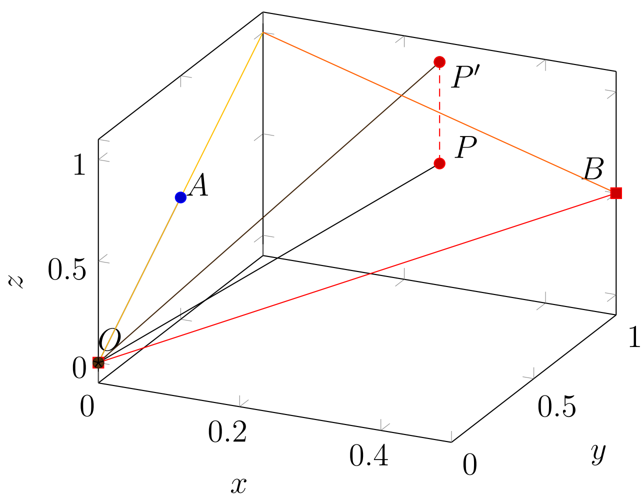
$$
\begin{pmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{nm}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m
\end{pmatrix}
$$

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

投影到以 $\boldsymbol{A}$ 的列向量为基的空间中

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

如图,在三维空间 $O-xyz$ 中,$\overrightarrow{OA} = \boldsymbol{\alpha_1}$、$\overrightarrow{OB} = \boldsymbol{\alpha_2}$,$\overrightarrow{OP'} = \boldsymbol{b}$。显然无解,那么我们可以退而求其次找距离 $\overrightarrow{OP'}$ 最近的解。



# 4 数值积分与数值微分

## 4.1 数值积分基本概念

数值积分就是将定积分的计算用和式近似表示

$$I=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$$

其中 $A_k$ 与被积函数 $f$ 无关，称为求积系数，$x_k$ 为求积节点。

**定义 4.1 (插值型求积公式)** 在 $[a,b]$ 上给定 $n+1$ 个节点 $a\leqslant x_0\leqslant x_1\leqslant\cdots\leqslant x_n\leqslant b$，以及相应的函数值 $f(x_0),\cdots f(x_n)$

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

$$\begin{aligned}I&=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx\int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x\\&=\int_a^b\sum_{k=0}^{n}f(x_k)l_k(x)\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^{n}\int_a^b f(x_k)l_k(x)\mathrm{d}x\\&=\sum_{k=0}^{n}f(x_k)\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)\end{aligned}$$

其中，$A_k=\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x$

$n=1$ 时，由

$$\begin{aligned}I(f)&=\int_a^b\frac{x-b}{a-b}f(a)+\frac{x-a}{b-a}f(b)\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{2}\frac{(x-b)^2}{a-b}f(a)\Big|_a^b+\frac{1}{2}\frac{(x-a)^2}{b-a}f(b)\Big|_a^b\\&=\boxed{\frac{b-a}{2}}[f(a)+f(b)]\end{aligned}$$

$A_0=A_1=\boxed{\frac{b-a}{2}}$，该式称为梯形公式。

**例 4.1** 设 $P_2(x)$ 是以 $0,h,2h$ 为插值点的 $f(x)$ 的二次插值多项式，用 $P_2(x)$ 导出计算积分 $I=\int_0^{3h}f(x)\mathrm{d}x$ 的数值积分公式 $I_h$。★★★☆☆

**解** 易知：

$$\begin{aligned}P_2(x)=&\frac{(x-h)(x-2h)}{(0-h)(0-2h)}f(0)+\frac{(x-0)(x-2h)}{(h-0)(h-2h)}f(h)\\&+\frac{(x-0)(x-h)}{(2h-0)(2h-h)}f(2h)\end{aligned}$$

故而

$$I_h=\left[\frac{3}{2}f(0)+\frac{9}{2}f(2h)\right]h$$

**定义 4.2 (求积公式的代数精确度)** 若求积公式

$$I(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$$

对 $f(x)=1,x,\cdots,x^m$ 时精确成立，而对 $f(x)=x^{m+1}$ 不精确成立，则称求积公式具有 $m$ 次代数精度。

- 当 $f(x)=1$ 时，$\sum\limits_{k=0}^{n}A_k=\int_a^b\mathrm{d}x=b-a$
- 当 $f(x)=x$ 时，$\sum\limits_{k=0}^{n}A_kx=\int_a^b\mathrm{d}x=\frac{1}{2}(b^2-a^2)$
- ……
- 当 $f(x)=x^m$ 时，$\sum\limits_{k=0}^{n}A_kx^m=\int_a^b x^m\mathrm{d}x=\frac{1}{m+1}(b^{m+1}-a^{m+1})$
- 当 $f(x)=x^{m+1}$ 时，$\sum\limits_{k=0}^{n}A_kx^{m+1}\neq\int_a^b x^{m+1}\mathrm{d}x$

$n+1$ 个点的插值型求积公式至少有 $n$ 次代数精确度

**定理 4.1** 求积公式 $I(f)=\sum\limits_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$ 至少有 $n$ 次代数精确度的充分必要条件是它是插值型的。

*证明.* 由插值余项定理，可知

$$R[f]=I-I_n=\int_a^b\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}(x)\mathrm{d}x$$

如果是插值型的，$R[f]=0$。证毕！

**例 4.2** 求积公式

$$\int_0^1 f(x)dx\approx A_0f(0)+A_1f(1)+B_0f'(0),$$

已知其余项表达式为 $R(f)=kf'''(\xi),\xi\in(0,1)$。试确定 $A_0,A_1$ 及 $B_0$，使该求积公式具有尽可能高的代数精确度，并给出代数精确度的次数及求积公式余项。★★★★★

**解**

- 当 $f(x)=1$ 时，$A_0+A_1=1$
- 当 $f(x)=x$ 时，$A_1+B_0=\frac{1}{2}$
- 当 $f(x)=x^2$ 时，$A_1=\frac{1}{3}$

得到 $A_0=\frac{2}{3},A_1=\frac{1}{3},B_0=\frac{1}{6}$，公式的代数精确度为 2。
令 $f(x)=x^3$，余项为

$$R[f]=\int_0^1 x^3\mathrm{d}x-\frac{2}{3}\cdot 0^3-\frac{1}{3}\cdot 1^3-\frac{1}{6}(3\cdot 0)^2$$
$$-\frac{1}{12}=3!\,f'''(\xi)$$

故而，$k=-\dfrac{1}{72}$。

**例 4.3** 确定求积公式中的待定系数 $a$，使其代数精度尽量高，并指出其具有的代数精度及余项★★★★★

$$\int_0^h f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{2}[f(0)+f(h)]+ah^2[f'(0)-f'(h)]$$

**解**

- 当 $f(x)=1$ 时，$h=h+0$ 恒成立
- 当 $f(x)=x$ 时，$\dfrac{h^2}{2}=\dfrac{h^2}{2}+0$ 恒成立
- 当 $f(x)=x^2$ 时，$\dfrac{h^3}{3}=\dfrac{h^3}{2}+ah^2\cdot(-2h)$，得

$$a=-\frac{1}{12}$$

代数精度为 3。

**定义 4.3** 对任给 $\varepsilon>0$，若 $\exists\delta>0$，只要 $|f(x_k)-\tilde{f}_k|\leqslant\delta(k=0,1,\cdots,n)$ 就有

$$|I_n(f)-I_n(\tilde{f})|=\left|\sum_{k=0}^{n}A_k(f(x_k)-\tilde{f}_k)\right|\leqslant\varepsilon$$

成立，则称求积公式是稳定的。

**定理 4.2** 若求积公式中系数 $A_k>0(k=0,1,\cdots,n)$，则此求积公式是稳定的。

## 4.2 Newton-Cotes 求积公式

**定义 4.4 (Newton-Cotes 公式)** 考虑等间距剖分情况下的插值型求积公式，设等距节点：$x_k=a+kh$，其中 $h=\dfrac{b-a}{n}$，$k=0,1,\cdots,n$。插值基函数 $l_k(x)$ 为

$$l_k(x)=\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}=\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{t-j}{k-j}$$

$$\mathrm{d}x=\frac{b-a}{n}\mathrm{d}t$$

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &\approx \sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)=\sum_{k=0}^{n}f(x_k)\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x\\&=\sum_{k=0}^{n}f(x_k)\int_0^n\frac{b-a}{n}\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{t-j}{k-j}\mathrm{d}t\\&=(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k)+R_n[f]\end{aligned}$$

其中，$C_k^{(n)} = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n} \frac{t-j}{k-j}\mathrm{d}t$

下面列出了一些 Cotes 系数

| $n$ | $C_k^{(n)}$ | | | |
|---|---|---|---|---|
| 1 | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ | | |
| 2 | $\frac{1}{6}$ | $\frac{4}{6}$ | $\frac{1}{6}$ | |
| 3 | $\frac{1}{8}$ | $\frac{3}{8}$ | $\frac{3}{8}$ | $\frac{1}{8}$ |

**定理 4.3** 当阶数 $n$ 为偶数时，Newton-Cotes 公式至少有 $n+1$ 次代数精度。

**注** 梯形公式：

$$I(f) = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$
$$E(f) = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)\mathrm{d}x = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$$

**注** Simpson 公式：

$$I(f) = \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$$
$$E(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)$$

### 4.2.1 复化求积法及其收敛性

**定义 4.5 (复化求积公式)** 考虑等间距剖分情况下的插值型求积公式，设等距节点：$x_k = a+kh$, 其中 $h = \frac{b-a}{n}$, $k = 0,1,\cdots,n$。先用低阶的 Newton-Cotes 公式求得每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上的积分值 $I_k$ 然后再求和用作为所求分的近似值，然后再求和。

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

其积分余项

$$\begin{aligned}I - T_n &= \sum_{k=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right]\\ &= -\frac{h^3}{12}n\sum_{k=0}^{n-1}\left[\frac{f''(\eta_k)}{n}\right]\\ &= -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta).\end{aligned}$$

最后一个 = 这里用到连续函数介值定理

这里称 Simpson 是 2 阶收敛的。

**注** 梯形公式

$$I_1(f) = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \quad E_1(f) = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$$

复合梯形公式

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

误差

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

**注** Simpson 求积公式

$$I_2(f) = \frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)] \quad E_2(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)$$

复合 Simpson 求积公式

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

误差

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

**注** Romberg 算法：

- 梯形公式,Simpson 公式,Cotes 公式的代数精度分别为 1 次,3 次和 5 次
- 复化梯形、复化 Simpson、复化 Cotes 公式的收敛阶分别为 2 阶、4 阶和 6 阶

**定义 4.6 (求积公式收敛阶)** 若一种复化求积公式 $I_n$ 当 $h \to 0$ 时成立

$$\frac{I-I_n}{h^p} \to C(C \neq 0)$$

则称求积公式 $I_n$ 是 $p$ 阶收敛的。

## 4.3 Romberg 算法

将定积分 $I = \int_a^b f(x) = \mathrm{d}x$ 的积分区间 $[a,b]$ 分割为 $n$ 等份，复化梯形 (Trapz) 公式为

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

如果将 $[a,b]$ 分割为 $2n$ 等份，则

$$T_{2n}=\frac{b-a}{4n}[f(a)+2\sum_{j=1}^{n-1}f(x_j)+2\sum_{j=0}^{n-1}f(x_{j+\frac{1}{2}})+f(b)]$$

$$T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{b-a}{2n}\sum_{j=0}^{n-1}f(x_{j+\frac{1}{2}})$$

**注** 递推得梯形公式

$$\begin{cases} T_0(0)=\dfrac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right] \\ T_0(k)=\dfrac{1}{2}T_0(k-1)+\dfrac{b-a}{2^k}\sum\limits_{j=0}^{2^{k-1}}f\left(a+(2j+1)\dfrac{b-a}{2^k}\right) \end{cases}$$

**例 4.4** 已知 $S_n=n\sin\frac{\pi}{n}=\pi-\frac{\pi^3}{3!n^2}+\frac{\pi^5}{5!n^4}-\cdots,$，如果采用 Richardson 外推法来基于 $S$，计算 $\pi$ 的值，那么下列公式中的加权系数分别是多少?★★★★★

**解**

1. $\pi\approx\alpha_1S_3+\alpha_2S_6$ 有

$$\begin{cases} \alpha_1+\alpha_2=1 \\ -\alpha_1/9-\alpha_2/36=0 \end{cases}$$

解得：

$$\alpha_1=-\frac{1}{3},\alpha_2=\frac{4}{3}$$

2. $\pi\approx\beta_1S_3+\beta_2S_9$ 有

$$\begin{cases} \alpha_1+\alpha_2=1 \\ -\alpha_1/9-\alpha_2/81=0 \end{cases}$$

解得：

$$\beta_1=-\frac{1}{8},\alpha_2=\frac{9}{8}$$

**例 4.5** 外推加速公式★★★★★

$$\lambda_1F(h)=a+a_1h^p+o(h^8)$$

$$\lambda_2F(h)=a+a_1\left(\frac{h}{2}\right)^p+o(h^8)$$

**解**

$$\lambda_1F(h)+\lambda_2F(h)=(\lambda_1+\lambda_2)a+a_1h^p(\lambda_1+\frac{\lambda_2}{2^p})$$

$$\begin{cases} \lambda_1+\lambda_2=1 \\ \lambda_1+\dfrac{\lambda_2}{2^p}=0 \end{cases}$$

得到

$$\begin{cases} \lambda_1 = -\dfrac{1}{2^p - 1} \\ \lambda_2 = \dfrac{2^p}{2^p - 1} \end{cases}$$

**例 4.6** 由复化梯形公式得余项公式☆☆☆☆☆

**解**

$$I(f) - T_n = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\eta)$$

有

$$I(f) - T_{2n} = -\frac{b-a}{12} \frac{h^2}{4} f''(\eta)$$

结合二者可以得到

$$\begin{cases} \lambda_1 T_n = \boxed{\lambda_1} I(f) + \boxed{\lambda_1} \cdot \left[ -\dfrac{b-a}{12} \boxed{h^2} f''(\eta) \right] \\ \lambda_2 T_{2n} = \boxed{\lambda_2} I(f) + \boxed{\lambda_2} \cdot \left[ -\dfrac{b-a}{12} \boxed{\dfrac{h^2}{4}} f''(\eta) \right] \end{cases}$$

那么

$$\begin{cases} \boxed{\lambda_1} + \boxed{\lambda_2} = 1 \\ -\boxed{\lambda_1} - \boxed{\dfrac{1}{4}\lambda_2} = 0 \end{cases}$$

解得

$$\begin{cases} \lambda_1 = -\dfrac{1}{3} \\ \lambda_2 = \dfrac{4}{3} \end{cases}$$

可以得到外推加速公式

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

## 4.4 高斯（Gauss）公式

考虑带权积分 $I(f) = \int_a^b f(x)\rho(x)\mathrm{d}x$，寻找形如

$$I(f) \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = I_n(f)$$

的求积公式使它具有最高的代数精确度。式中含有 $2n+2$ 个待定参数 $x_k, A_k(k = 0, 1, \cdots, n)$ 适当选择这些参数，有可能使得求积公式具有 $2n+1$ 次代数精度。

**定义 4.7 (Gauss 型求积公式)** 具有最高代数精度的插值型求积公式称为 Gauss 型求积公式，相应的求积节点 $a \leqslant x_0, < x_1 < \cdots < x_n \leqslant b$ 称为 Gauss 点。

当插值型节点个数比较多时，方程求解比较困难。因此我们可以先找出满足条件的插值节点（Gauss 点）。

**定理 4.4** 插值型求积公式的求积节点 $\{x_k\}_{k=0}^n$ 是高斯点的充要条件是：在 $[a,b]$ 上以这组节点为根的多项式 $\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$ 与任何次数 $\leqslant n$ 的多项式 $P(x)$ 带权 $\rho(x)$ 正交，即

$$\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)\rho(x)dx=0$$

**证明.** 先证明必要性：即 $\{x_k\}_{k=0}^n$ 是高斯点 $\Rightarrow \int_a^b Q(x)\rho(x)\mathrm{d}x=0$

设 $x_k$ 为 Gauss 点，那么有

$$Q(x)=P(x)\omega_{n+1}(x)$$

是次数不超过 $(2n+1)$ 次的多项式，则

$$\int_a^b Q(x)\rho(x)\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^n A_k Q(x_k)=0$$

前一个等号利用了高斯节点的定义，后面是因为 $\omega_{n+1}(x_k)=0$

再证明充分性：即 $\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)\rho(x)\mathrm{d}x=0\Rightarrow\int_a^b P_{2n+1}(x)\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^n A_kP_{2n+1}(x_k)$

设 $P_{2n+1}(x)$ 是任意次数 $\leqslant 2n+1$ 次的多项式

$$P_{2n+1}(x)=P(x)\omega_{n+1}(x)+Q(x)$$

其中 $P(x),Q(x)$ 是次数 $\leqslant n$ 的多项式

$$\begin{aligned}&\int_a^b P_{2n+1}(x)\mathrm{d}x\\&=\cancel{\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)\rho(x)\mathrm{d}x}+\int_a^b Q(x)\mathrm{d}x\\&=0+\sum_{k=0}^n A_kQ(x_k)=\sum_{k=0}^n A_kP_{2n+1}(x_k)\end{aligned}$$

最后一个等号是因为 $P(x_k)\omega_{n+1}(x_k)=0$

故公式有 $2n+1$ 次代数精度。证毕！

**定理 4.5** Gauss 型求积公式的求积系数 $A_k>0(k=0,1,\cdots,n)$

**证明.** 设 $\{x_k\}$ 为高斯点，$l_k(x)$ 是 $x_k$ 点时对应的拉格朗日插值基函数，那么有

$$0<\int_a^b l_k^2(x)\rho(x)\mathrm{d}x=\sum_{j=0}^n A_jl_k^2(x_j)=A_k$$

**推论** Gauss 型求积公式是稳定的。

**定理 4.6** 设 $f \in C[a,b]$，则 Gauss 型求积公式是收敛的, 即

$$\lim_{n\to\infty} I_n(f) = \int_a^b f(x)\rho(x)dx$$

**证明.** 仅对 $\rho(x)=1$ 进行证明，因 $f \in C[a,b]$，由 Weierstrass 定理知，对 $\forall\varepsilon > 0, \exists P_n(x)$，使得

$$\|f(x) - P_n(x)\|_\infty < \varepsilon$$

$$\begin{aligned}
&\left|I_n(f) - \int_a^b f(x)\mathrm{d}x\right| \\
\leqslant &\left|I_n(f) - I_n(P) + I_n(P) - \int_a^b f(x)\mathrm{d}x\right| \\
\leqslant &\left|I_n(f) - I_n(P)\right| + \left|I_n(P) - \int_a^b f(x)\mathrm{d}x\right|
\end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned}
|I_n(f) - I_n(P)| &\leqslant \sum_{k=0}^{n} A_k\left|f(x_k) - P(x_k)\right| \\
&\leqslant \sum_{k=0}^{n} A_k\|f - P_n\|_\infty = (b-a)\|f - P_n\|_\infty
\end{aligned}$$

又

$$\begin{aligned}
\left|I_n(P) - \int_a^b f(x)\mathrm{d}x\right| &\leqslant \int_a^b |P - f|\,\mathrm{d}x \\
&\leqslant \|P - f\|_\infty(b-a)
\end{aligned}$$

证毕！

**定理 4.7** Gauss-Legendre 求积公式的余项

$$R(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b \omega^2(x)\mathrm{d}x$$

**例 4.7** 利用 Gauss-Legendre 求积公式求在 $[a,b]$ 区间内的求积公式

**解**

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \overset{x=\frac{b+a}{2}+\frac{b-a}{2}t}{=} \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} F(t)\mathrm{d}t \approx \frac{b-a}{2}\sum_{k=0}^{n} A_k F(t_k)$$

高斯点 $t_0, t_1, \cdots, t_n$ 时 $P_{n+1}$ 的零点。

**例 4.8** 求两点 Gauss-Legendre 积分的求积公式，并用其计算⭐⭐⭐⭐⭐

$$I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin x\mathrm{d}x$$

**解**

$$I=\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin x\mathrm{d}x=\frac{\pi}{4}\int_{-1}^{1}\sin(\frac{\pi}{4}+\frac{\pi}{4}t)\mathrm{d}t$$

$$t_0=-\frac{1}{\sqrt{3}},\quad t_1=\frac{1}{\sqrt{3}}$$

**例 4.9** 区间 $[3,5]$ 上两点 Gauss-Legendre 公式的求积节点分别为★★★★★

**解**

$$x_0=4-\frac{1}{\sqrt{3}},x_1=4+\frac{1}{\sqrt{3}}$$

**注** Gauss-Chebyshev 公式

$$[-1,1],\rho=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

$T_n(x)$ 的零点为 $x_k=\dfrac{2k-1}{2n}\pi,\quad k=1,2,\cdots,n$

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

### 4.4.1 固定部分节点的高斯型求积公式

在实际应用中有时希望预先固定高斯型公式的一个或几个求积节点。

**例 4.10** 假设求积公式中 $m$ 个节点固定，$n$ 个节点待定。★★★½☆
则该公式的代数精确度为 $[2n+m-1]$

**注** 采用自适应 Simpson 公式计算 $I=\int_a^{a+h}f(x)\mathrm{d}x$

$$S_1(a,a+h)=\frac{h}{6}\left[f(a)+4f(a+\frac{h}{2})+f(b)\right]$$

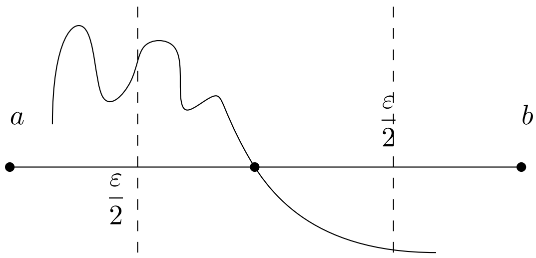
$$I-S_1(a,a+h)=-\frac{h^5}{2880}f^{(4)}(\eta)$$

$$S_2=S_1(a,a+\frac{h}{2})+S_1(a+\frac{h}{2},a+h)$$

$$I-S_2(a,a+h)=-\frac{1}{2880}\left(\frac{h}{2}\right)^5f^{(4)}(\overline{\eta})$$

$$S_1-S_2=\frac{1}{2880}\left(\frac{15}{16}\right)h^5f^{(4)}(\overline{\eta})$$

$$I-S_2(a,a+h)\mid\approx\frac{1}{15}\mid S_1(a,a+h)-S_2(a,a+h)\mid<\varepsilon$$




## 4.5 二重积分计算方法

$$
\begin{aligned}
I(f) &= \iint_{\Omega} f(x,y)dxdy \\
&\int_a^b \mathrm{d}x \int_{\varphi(x)}^{\psi(x)} f(x,y)\mathrm{d}y = \int_a^b F(x)\mathrm{d}x \\
&\approx \sum_{k=0}^{n} A_k F(x_k) \\
&\approx \sum_{k=0}^{n} A_k \left[\sum_{l=0}^{m} B_{kl} f(x_k, y_l)\right]
\end{aligned}
$$

**例 4.11** 计算上述二重积分的梯形公式为

**解**

$$
\begin{aligned}
T(f) = \frac{b-a}{2}[&\frac{\psi(a)-\varphi(a)}{2}(f(a,\varphi(a))+f(a,\psi(a))) \\
&+\frac{\psi(b)-\varphi(b)}{2}(f(b,\varphi(b))+f(b,\psi(b)))]
\end{aligned}
$$

### 4.5.1 复合求积公式

考虑矩形区域的重积分 $\Omega=[a,b]\times[c,d]$

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

**注** 复合梯形公式

$$
\begin{aligned}
I(f) &= \iint_{\Omega} f(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \\
&\approx \frac{h_x h_y}{4} \sum_{i=0}^{n}\sum_{i=0}^{m} \lambda_{ij} f(x_i, y_j)
\end{aligned}
$$

$$
\Lambda = \begin{bmatrix}
1 & 2 & 2 & \cdots & 2 & 2 & 1 \\
2 & 4 & 4 & \cdots & 4 & 4 & 2 \\
\vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\
2 & 4 & 4 & \cdots & 4 & 4 & 2 \\
1 & 2 & 2 & \cdots & 2 & 2 & 1
\end{bmatrix} = (\lambda_{\mathbf{ij}})
$$

## 4.6 数值微分

### 4.6.1 机械求导公式

$$f'(x_0)=\lim_{h\to 0}\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

$$f'(x_0)\approx\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}=f'(x_0)+\frac{f''(x_0)}{2}h^2$$

**注** 中点公式 (二阶截断误差)

$$G(h)=\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$$ $h$ 过小，两相近的数相减，影响舍入误差

$$G(h)=f'(a)+\frac{h^2}{3!}f'''(a)+\frac{h^4}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots$$ $h$ 小，截断误差小

- 从舍入误差看，$h$ 不宜过小
- 从截断误差看，$h$ 越小，计算越准确

**例 4.12** 以下关于数值微分的说法不正确的是 ()

A 在实际应用中，基于插值多项式的微分方法，其插值次数不能太高

B 近似导数 $f'(x)$ 的数值微分公式 $\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$ 和 $\frac{f(x_0)-4f(x_0+h)+3f(x_0+2h)}{2h}$ 误差阶相同

C 数值微分公式的误差包括截断误差和舍入误差两部分

D 当插值多项式 $L_n(x)$ 收敛于 $f(x)$ 时，其导数 $L_n'(x)$ 收敛于 $f'(x)$

**定义 4.8 (插值型求导公式)** 建立 $f(x)$ 的插值多项式 $P_n(x)$，用 $P_n'(x)$ 作为 $f'(x)$ 的近似值

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

其中 $\omega_{n+1}'(x_k)=(x-x_0)(x-x_1)(x-x_{k-1})\cdots(x-x_{k+1})(x-x_n)$.

两点公式：给定两个节点 $x_0,x_1$，做线性插值多项式 $P_1(x)$

$$P_1'(x_0)=P_1'(x_1)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}$$

$$f'(x_0)=P_1'(x_0)-\frac{h}{2}f''(\xi)\quad f'(x_1)=P_1'(x_1)+\frac{h}{2}f''(\xi)$$

三点公式：给定三个节点 $x_0,x_1,x_2$，做二次插值多项式 $P_2(x)$

$$P_2'(x_0)=\frac{-f(x_2)+4f(x_1)-3f(x_0)}{2h}$$

$$P_2'(x_1)=\frac{f(x_2)-f(x_0)}{2h}$$

$$P_2'(x_2) = \frac{3f(x_2) - 4f(x_1) + f(x_0)}{2h}$$

以上公式近似相应导数的误差分别为 $\frac{h^2}{3}f'''(\xi), -\frac{h^2}{6}f'''(\xi), \frac{h^2}{3}f'''(\xi)$.

# 5 微分方程数值解的基本概念（没有大题）

## 5.1 微分方程数值解的基本概念

**定理 5.1** 如果方程 $\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x,y), \\ y(x_0) = y_0. \end{cases}$ 中右端函数 $f(x,y)$ 满足

1. $f(x,y)$ 是实值函数
2. $f(x,y)$ 在矩形区域 $\Omega = \{(x,y)|x \in [x_0, T], y \in (-\infty, +\infty)\}$ 内连续
3. $f(x,y)$ 关于 $y$ 满足 Lipschitz 条件：即存在正常数 $L$，使得对任意 $x \in [x_0, T]$，均成立不等式

$$|f(x,y_1) - f(x,y_2)| \le L|y_1 - y_2|$$

则方程存在唯一解 $y(x) \in C^1[x_0, T]$

**定义 5.1 (扰动问题)** 考虑扰动问题 $\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x,y) + \delta(x), x_0 \le x \le T, \\ y(x_0) = y_0 + \varepsilon. \end{cases}$

**例 5.1** 以下初值问题是否关于数据的扰动稳定？

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = 100u - 101e^{-t} \\ u(0) = 1 \end{cases}$$

A 是

B 否

**解** 原问题的通解为

$$\begin{aligned} u(t) &= e^{-\int -100\mathrm{d}t}\left(\int -101e^{-t}e^{\int -100\mathrm{d}t}\mathrm{d}t + C\right) \\ &= e^{100t}\left(e^{-101t} + C\right) \end{aligned}$$

代入初始条件 $u(0) = 1$ 得到

$$u(t) = e^{-t}$$

现在有初值的扰动 $u(0) = 1 + \varepsilon$ 得到

$$u(t) = e^{-t} + \varepsilon e^{100t}$$

显然对 $\forall \varepsilon > 0, u(t;\varepsilon)$ 偏离真解很大，故问题不稳定。

## 5.2 Euler 方法

**定义 5.2 (Euler 方法)** 考虑问题

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x} = f(x, y(x)), x_0 \leq x \leq T, \\ y(x_0) = y_0. \end{cases}$$

将区域 $[x_0, T]$ 剖分成 $m$ 等份，步长 $h = \dfrac{T - x_0}{m}$，网点 $x_n = x_{n-1} + h = x_0 + (n-1)h, n = 1, 2, \cdots, m$.

**注** 梯形法

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

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

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

- 梯形法为二阶方法

$$\mid y(x_n) - y_n \mid = O(h^2), \text{当} h \to 0\text{时}$$

- 梯形法为单步隐式方法
- 梯形法计算格式

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n), \\ y_{n+1}^{(m+1)} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(m)})], \\ m = 0, 1, 2, \cdots \end{cases}$$

- 梯形格式收敛的条件是什么？

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

记 $y_{n+1}^{(m)} - y_{n+1}^* = \varepsilon^m$，则

$$\begin{aligned} |\varepsilon^{(m+1)}| &= \frac{h}{2}\left[f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(m)}) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)\right] \\ &\leqslant \frac{hL}{2}|y_{n+1}^{(m)} - y_{n+1}^*| = \frac{hL}{2}\varepsilon^{(m)} \\ &= \left(\frac{hL}{2}\right)^m \varepsilon^{(0)} \end{aligned}$$

$$\lim_{m\to\infty} |\varepsilon^{(m+1)}| \Longrightarrow \boxed{\frac{hL}{2} < 1}$$

**例 5.2** 下列关于梯形法的叙述错误的是★★★☆☆

A 梯形法是一个显式方法

B 梯形法的整体截断误差是 $O(h^3)$

C 梯形法是一个稳定的方法

D 梯形法的迭代步长可以任取

**注** 改进 Euler 法

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

预测校正格式还可写为

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

$$\begin{cases} y_p = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_c = y_n + hf(x_{n+1}, y_p) \\ y_{n+1} = \dfrac{1}{2}[y_n + y_p] \end{cases}$$

**例 5.3** 改进 Euler 法是 [单] 步（填“单”或“多”）[显] 格式（填“显”或“隐”）格式★★★⯪☆

## 5.3 Runge-Kutta 方法

### 定义 5.3 (Taylor 级数法)

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2}y''(x_0) + \cdots + \frac{h^q}{q!}y^{(q)}(x_0) + O(h^{q+1})$$

$$\begin{aligned} y'(x_0) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x, y)\big|_{x=x_0} = (f'_x + f'_y\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x})\big|_{x=x_0} \\ &= f'_x(x_0, y_0) + f'_y(x_0, y_0)f(x_0, y_0) \end{aligned}$$

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2}y''_n + \cdots + \frac{h^q}{q!}y_n^{(q)}$$

**注** Taylor 级数法优缺点：

- 优点：可达任意阶精度
- 缺点：求导复杂，不实用

**注** Runge-Kutta 方法的基本思想

$$\frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} = y'(x_n + \theta h)$$

$$
\begin{aligned}
y(x_{n+1}) - y(x_n) &= \int_{x_n}^{x_{(n+1)}} f(x,y)\mathrm{d}x \\
&= f(x_n+\theta h, y(x_n+\theta h))h
\end{aligned}
$$

**定义 5.4 (Runge-Kutta 法)** 设 $s$ 是一个正整数代表使用函数值 $f$ 的个数,$\alpha_i,\beta_{ij}$ 和 $W_i$ 是一些待定的权因子 (为实数)，方法

$$
y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{s} W_i K_i
$$

其中 $K_i$ 满足下列方程:

$$
\begin{aligned}
&K_1 = f(x_n, y(x_n)), K_2 = f(x_n+\alpha_2 h, y(x_n) + h\beta_{21}K_1) \\
&K_3 = f(x_n+\alpha_3 h, y(x_n) + h\beta_{31}K_1 + h\beta_{32}K_2) \\
&\cdots\cdots \\
&K_s = f(x_n+\alpha_s h, y(x_n) + h\sum_{j=1}^{s-1}\beta_{sj}K_j)
\end{aligned}
$$

被称为一阶常微分方程的 $s$ 级显式Runge-Kutta 方法。

**注** Runge-Kutta 方法可采用 Butcher 表表示

$$
\begin{aligned}
&y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{s} W_i K_i \\
&K_1 = f(x_n, y(x_n)) \\
&K_i = f(x_n+\alpha_i h, y(x_n) + h\beta_{i1}K_1 + \cdots + h\beta_{i,i-1}K_{i-1})
\end{aligned}
$$

$$
\begin{array}{c|ccccc}
\alpha_1 & & & & & \\
\alpha_2 & \beta_{21} & & & & \\
\alpha_3 & \beta_{31} & \beta_{32} & & & \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & & \\
\alpha_s & \beta_{s1} & \beta_{s2} & \cdots & \beta_{s,s-1} & \\
\hline
 & W_1 & W_2 & \cdots & W_{s-1} & W_s
\end{array}
$$

**例 5.4** 4 级 Runge-Kutta 方法的局部截断误差是 [5] 阶.

**注** s 级 Runge-Kutta 法的精度

- 当 $\leqslant 4$ 时，$s$ 级 RK 方法的阶 $q(s)=s$;
- 当 $s=5,6,7$ 时，$s$ 级 RK 方法的阶 $q(s)=s-1$;
- 当 $s=8,9$ 时，$s$ 级 RK 方法的阶 $q(s)=s-2$;

- $q(10) < 8$.

  以上都是单步法的代表。

**注** 一般单步法: 显式单步法的一般形式

$$y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, h)$$

- Euler 法

$$\varphi(x, y, h) = f(x, y)$$

- Taylor 级数法

$$\varphi(x, y, h) = \sum_{j=1}^{k} \frac{h^{j-1}}{j!} y^{(j)}(x)$$

- s 级四阶 RK 方法

$$\varphi(x, y, h) = \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

**定义 5.5 (收敛)** 若对于任意的初值 $y_0$ 及任意 $x \in [x_0, T]$

$$\lim_{h \to 0} y_n = y(x_n),$$

称 $\varepsilon(x, y, h)$ 确定的单步方法是收敛的

**定义 5.6 (单步法的阶数)** 单步法

$$y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, h)$$

称为 $p$ 阶的，是指: 对于真解 $y(x), p$ 是使关系式

$$y(x+h) - y(x) = h\varphi(x, y(x), h) + O(h^{p+1})$$

成立的最大整数.

**定理 5.2** 假设单步法具有 $p$ 阶精度，且增量函数 $\varepsilon(x, y, h)$ 关于满足 Lipschitz 条件:

$$\mid \varphi(x, y, h) - \varphi(x, \overline{y}, h) \mid \leq L_\varphi(y - \overline{y})$$

又设初值 $y_0 = y(x)$ 是准确的，则整体截断误差为

$$y(x_n) - y_n = O(h^p)$$

**证明.**

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \varphi(x_n, y_n, h) \\ y(x_{n+1}) = y(x_n) + h\varphi(x_n, y(x_n), h) + Ch^{p+1} \end{cases}$$

令 $\varepsilon_n = y(x_n) - y_n$，那么有

$$
\begin{aligned}
|\varepsilon_{n+1}| &\leqslant |\varepsilon_n| + h|\left[\varphi(x_n, y(x_n), h) - \varphi(x_n, y_n, h)\right]| + Ch^{p+1} \\
&\leqslant |\varepsilon_n| + hL|y(x_n) - y_n| + Ch^{p+1}
\end{aligned}
$$

所以

$$
\begin{aligned}
|\varepsilon_{n+1}| &\leqslant (1+hL)|\varepsilon_n| + Ch^{p+1} \\
&\leqslant (1+hL)|^2\varepsilon_{n-1}| + \left[(1+hL)+1\right]Ch^{p+1} \\
&\leqslant (1+hL)^n|\varepsilon_0| + \left[(1+hL)^n + (1+hL)^{n-1} + \cdots + 1\right]Ch^{p+1} \\
&\leqslant (1+hL)^n|\varepsilon_0| + \frac{1}{\cancel{h}L}Ch^{\cancel{p+1}}
\end{aligned}
$$

证毕！

**例 5.5** 分析改进 Euler 法的收敛性★★★☆☆

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

**解**

$$
\varphi(x, y, h) = \frac{1}{2}\left[f(x, y) + f(x+h, y+hf(x, y))\right]
$$

那么有

$$
\begin{aligned}
&|\varphi(x, y, h) - \varphi(x, \bar{y}, h)| \\
&\leqslant \frac{1}{2}|f(x, y) - f(x, \bar{y})| + \frac{1}{2}\left|f(x+h, y+hf(x, y)) - f(x+h, \bar{y}+hf(x, \bar{y}))\right| \\
&\leqslant \frac{L}{2}\left|y - \bar{y}\right| + \frac{L}{2}|(y-\bar{y}) + h\left[f(x, y) - f(x, \bar{y})\right]| \\
&\leqslant (L + \frac{L^2h}{2})|y - \bar{y}|
\end{aligned}
$$

## 5.4 单步法的收敛性与稳定性

对于模型问题 $y' = \lambda y$，考察格式的稳定性，有 $y = Ce^{\lambda x}$

- Euler 法 $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$(条件稳定)
  根据 $\varepsilon_n = y_n - z_n$ 有

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + h\lambda y_n \\
z_{n+1} &= z_n + h\lambda z_n
\end{aligned}
$$

$$
\varepsilon_{n+1} = (1+h\lambda)\varepsilon_n
$$

- 后退 Euler 法 $y_{n+1}=y_n+hf(x_{n+1},y_{n+1})$（无条件稳定）

$$y_{n+1}=y_n+h\lambda y_{n+1}\Rightarrow y_{n+1}=\frac{1}{1-\lambda h}y_n$$

那么有

$$(1-h\lambda)\varepsilon_{n+1}=\varepsilon_n$$
$$\varepsilon_{n+1}=\frac{|\varepsilon_n|}{|(1-h\lambda)|}\leqslant|\varepsilon_n|$$

当 $|1-h\lambda|>1$，即 $h\geqslant 0$ 时，格式稳定

## 5.5 线性多步法（1）

基于数值积分的构造方法

$$y(x_{n+k})-y(x_{n-j})=\int_{x_{n-j}}^{x_{n+k}}f(x,y(x))\mathrm{d}x$$

用 $f(x,y(x))\approx P_q(x)=\sum_{i=0}^{q}f(x_{n-i},y_{n-i})L_i(x)$ 来估计，其中

$$L_i(x)=\prod_{\substack{l=0\\l\neq i}}^{q}\frac{x-x_{n-l}}{x_{n-i}-x_{n-l}}.$$

得到

$$\begin{aligned}
y(x_{n+k})-y(x_{n-j})&=\sum_{i=0}^{q}f(x_{n-i},y_{n-i})\int_{x_{n-j}}^{x_{n+k}}L_i(x)\mathrm{d}x\\
&=\sum_{i=0}^{q}f(x_{n-i},y_{n-i})\int_{x_{n-j}}^{x_{n+k}}\prod_{\substack{l=0\\l\neq i}}^{q}\frac{x-x_{n-l}}{x_{n-i}-x_{n-l}}\mathrm{d}x\\
&\overset{x=x_n+th}{=}\sum_{i=0}^{q}f(x_{n-i},y_{n-i})\int_{x_{n-j}}^{x_{n+k}}\prod_{\substack{l=0\\l\neq i}}^{q}\frac{(x_n+th)-(x_n-lh)}{(x_n-ih)-(x_n-lh)}\mathrm{d}x\\
&=h\sum_{i=0}^{q}f(x_{n-i},y_{n-i})\int_{-j}^{k}\prod_{\substack{l=0\\l\neq i}}^{q}\frac{l+t}{l-i}\mathrm{d}t
\end{aligned}$$

线性多步法的计算公式

- $k=1,j=0$ 时，得到 Adams 显式方法:

$$y_{n+1}=y_n+h\sum_{i=0}^{q}\beta_{qi}f_{n-i}$$

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}(55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3})$$

- $k=0, j=1$ 时，得到 Adams 隐式方法:

$$y_n = y_{n-1} + h\sum_{i=0}^{q}\beta_{qi}f_{n-i}$$

$$y_{n+1} = y_n + h[\beta_{q0}f_{n+1} + \beta_{q1}f_n + \cdots + \beta_{qq}f_{n-q+1}]$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})$$

**例 5.6** 假设网格点等间距分布，空间步长为 $h$，请采用数值积分方法基于 $x_{n-1}, x_n, x_{n+1}$ 构造一个隐式多步法。★★★★★

**解** 3 个点，对 2 阶拉格朗日多项式换元积分，得到

$$\begin{aligned}
&\int_{x_n}^{x_{n+1}} f_{n-1}\frac{(x-x_n)(x-x_{n+1})}{(x_{n-1}-x_n)(x_{n-1}-x_{n+1})} + f_n\frac{(x-x_{n-1})(x-x_{n+1})}{(x_n-x_{n-1})(x_n-x_{n+1})} \\
&+ f_{n+1}\frac{(x-x_{n-1})(x-x_n)}{(x_{n+1}-x_{n-1})(x_{n+1}-x_n)}\mathrm{d}x \\
&\overset{x=x_n+th}{=} h\int_0^1 f_{n-1}\frac{t(t-1)}{-1\cdot(-2)} + f_n\frac{(t+1)(t-1)}{1\cdot(-1)} + f_{n+1}\frac{(t+1)t}{2\cdot 1} \\
&= h\left[\frac{-1}{12}f_{n-1} + \frac{2}{3}f_n + \frac{5}{12}f_{n+1}\right]
\end{aligned}$$

故而，隐式多步法可以构造为

$$\begin{aligned}
y_{n+1} - y_n &= h\left[\frac{-1}{12}f_{n-1} + \frac{2}{3}f_n + \frac{5}{12}f_{n+1}\right] \\
\Rightarrow y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{12}\left[5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}\right]
\end{aligned}$$

**注** 基于 Taylor 展开的构造方法

- 线性 $k$ 步法的一般形式

$$y_{n+1} = \sum_{k=0}^{r}\alpha_k y_{n-k} + h\sum_{k=-1}^{r}\beta_k f_{n-k}$$

**例 5.7** 关于前面预测-校正算法，下列叙述正确的是？★★★★☆

A 预测-校正算法是一个显式方法

B 预测-校正算法是一个显式方法预测步和校正步的截断误差为同阶

C 预测-校正算法的整体截断误差是 $O(h^5)$

D 由于初始时刻无预测值和校正值，所以可令它们的差为零，然后多次校正

## 5.6 方程组与刚性问题

**例 5.8** 考虑方程组 $\begin{cases}\frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}x} = JY, 0 \le x \le 1, \\ Y(0) = (2,1,2)^{\mathrm{T}}\end{cases}$

其中 $J=\begin{pmatrix} -0.1 & -49.9 & 0 \\ 0 & -50 & 0 \\ 0 & 70 & -30000 \end{pmatrix}$

**解** 上述问题的解为

$$\begin{cases} Y_1(x)=e^{-0.1x}+e^{-50x} \\ Y_2(x)=e^{-50x} \\ Y_3(x)=e^{-50x}+e^{-30000x} \end{cases}$$

不同的解的分量有不同的衰减速度

考虑方程组

$$\frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}x}=JY+Z$$

设 $J$ 有互异的特征值 $\lambda_k$，对应的特征向量为 $C_k$，则方程组的通解为

$$Y=\sum_{k=1}^{m}U_k e^{\lambda_k}C_k+V(x)$$

其中 $Q_k$ 为常数，$V(x)$ 为特解

**定义 5.7 (刚性)** 上述线性方程组称为刚性的,若 $\mathrm{Re}(\lambda_k)<0$,$\max|\mathrm{Re}(\lambda_k)|\gg\min|\mathrm{Re}(\lambda_k)|$, 此时 $\frac{\max|\mathrm{Re}(\lambda_k)|}{\min|\mathrm{Re}(\lambda_k)|}$ 称为刚性比

**例 5.9** 一阶微分方程初值问题

$$\begin{cases} u_1'=-0.01u_1-99.99u_2 \\ u_2'=-100u_2 \\ u_1(0)=2, u_2(0)=1. \end{cases}$$

的刚性比 [10000] 。★★★★☆

**解**

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} -0.01 & 99.99 \\ 0 & -100 \end{bmatrix}$$

特征值为 $\lambda_1=-0.01$, $\lambda_2=-100$。故而刚性比为 $\dfrac{100}{0.01}=10000$

## 5.7 边值问题的解法

考虑两点边值问题

$$y''=f(x,y,y'), a<x<b,$$
$$y(a)=\alpha$$
$$y(b)=\beta$$

**注** 试射法 (shooting)：将边值问题转化为初值问题求解，反复调整初始时刻的斜率 $y'(a)$，使得初值问题的解能够命中 $y(b)=\beta$. 试射法也称打靶法设

$$
\begin{aligned}
y_1'' &= f(x, y_1, y_1') & y_2'' &= f(x, y_2, y_2') \\
y_1(a) &= \alpha & y_2(a) &= \alpha \\
y_1'(a) &= m_1 & y_2'(a) &= m_2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
c_1 y_1(b) + c_2 y_1(b) = y_1(b) &\Rightarrow c_2 = \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b) - y_1(b)} \\
c_1 y_2(b) + c_2 y_2(b) = y_2(b) &\Rightarrow c_1 = \frac{\beta - y_2(b)}{y_1(b) - y_2(b)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{gathered}
y = c_1 y_1 + c_2 y_2 \\
c_1 + c_2 = 1 \\
c_1 y_1(b) + c_2 y_2(b) = \beta
\end{gathered}
$$

**注** 有限差分法

$$
\begin{cases}
y'' = f(x, y, y'), a \le x \le b, \\
y(a) = \alpha, y(b) = \beta.
\end{cases}
$$

将求解区域 $[a,b]$ 分成 $N$ 等份，步长 $h=\dfrac{b-a}{N}$ 网点 $x_n = a + nh, n = 0, 1, 2, \cdots, N.$

$$
y''|_{x_n} = \boxed{\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2}} \quad y'|_{x_n} = \boxed{\frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h}} + O(h^2)
$$

差分近似得到

$$
\begin{gathered}
\boxed{\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2}} = f(x_n, y_n, \boxed{\frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h}}) \\
y_0 = \alpha, y_n = \beta.
\end{gathered}
$$

$N+1$ 个差分点，$N-1$ 个未知量，$N-1$ 个差分方程

# 6 方程求根

## 6.1 非线性方程求根的基本概念

**定义 6.1 (单根区间、多根区间、有根区间)** 如果方程 $f(x)=0$ 在区间 $[a,b]$ 上只有一个根、多个跟、至少有一个根，称 $[a,b]$ 为单根区间、多根区间、有根区间。

## 6.2 跟的搜索与二分法

**例 6.1** 求方程 $f(x) = x^3 - 11.1x^2 + 38.8x - 41.77 = 0$ 的有根区间。

**解** 方程的三个有根区间为 $[2.3][3,4]$ 和 $[5,6]$

**注** 逐步搜索法：

- 搜索步长的选取是逐步搜索法的关键，当步长缩小时，搜索步数增多，计算量增大
- 如果精度要求比较高，单用逐步搜索法不合算

**注** 二分法: 假设 $a_0 = a, b_0 = b$

- 取 $x_0 = \dfrac{a_0 + b_0}{2}$，将区间 $[a_0, b_0]$ 分为两半
  若 $f(a_0)f(x_0) > 0$，则取 $a_1 = x_0, b_1 = b_0$，否则取 $a_1 = a_0, b_1 = x_0$
- 取 $x_1 = \dfrac{a_1 + b_1}{2}$，将区间 $[a_1, b_1]$ 分为两半
  若 $f(a_1)f(x_1) > 0$，则取 $a_2 = x_1, b_2 = b_1$，否则取 $a_2 = a_1, b_2 = x_1$

## 6.3 不动点迭代法

**定义 6.2 (不动点迭代法)** 将非线性方程 $f(x) = 0$ 化为一个同解方程

$$x = \varphi(x)$$

任取一个初值 $x_0$ 代入上式右端，得到

$$x_1 = \varphi(x_0), x_2 = \varphi(x_1), \cdots, x_{k+1} = \varphi(x_k)$$

求解非线性方程 $f(x) = 0$ 的不动点迭代法。

如果存在一点 $x^*$，使得 $\lim\limits_{k \to \infty} x_k = x^*$，则称迭代法收敛, 否则称为发散。

**定义 6.3 (压缩映射)**

$$|x_k - x^*| = |\varphi(x_{k-1}) - \varphi(x^*)| \leqslant L|x_{k-1} - x^*| (0 < L < 1)$$

称为压缩映射。

**定理 6.1** 设迭代函数且满足 $\varphi(x) \in C[a, b]$ 且满足

1. $\forall x \in [a, b]$，有 $\varphi(x) \in [a, b]$
2. 存在 $L \in (0, 1)$，使得 $\forall x, y \in [a, b]$

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

则

1. $\varphi(x)$ 在区间 $[a, b]$ 内存在唯一不动点
2. 对于任意初值 $x_0 \in [a, b]$, 由迭代法生成的迭代序列 $\{x_k\}$ 均收敛于 $x^*$

3. $\mid x_k - x^* \mid \leq \frac{L}{1-L} \mid x_k - x_{k-1} \mid$
4. $\mid x_k - x^* \mid \leq \frac{L^k}{1-L} \mid x_1 - x_0 \mid$

**证明.** 证明 1：令 $F(x) = \varphi(x) - x$，则 $F(x) \in C[a,b]$ 且

$$F(a) = \varphi(a) - a \geqslant 0, F(b) = \varphi(b) - b \leqslant 0,$$

有闭区间连续函数的性质知道，$\exists x^* \in [a,b]$ 使得 $F(x^*) = \varphi(x^*) - x^*$

设 $y^*$ 也是 $\varphi(x)$ 的不动点，则

$$0 < |y^* - x^*| = |\varphi(y^*) - \varphi(x^*)| \leqslant L|y^* - x^*|$$

矛盾！

证明 2：

$$0 < |x_k - x^*| = |\varphi(x_{k-1}) - \varphi(x^*)| \leqslant \cdots \leqslant L^k|x_0 - x^*|$$

证明 3：

$$|x_k - x^*| \leqslant L|x_{k-1} - x^*| \leqslant L\left(|x_{k-1} - x^k| + |x_k - x^*|\right)$$
$$\Rightarrow |x_k - x^*| \leqslant \frac{L}{1-L}|x_k - x_{k-1}|$$

证明 4：

$$|x_k - x^*| \leqslant \frac{L}{1-L}|\varphi(x_{k-1}) - \varphi(x_{k-2})| \leqslant \cdots \leqslant \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0|$$
$$\Rightarrow |x_k - x^*| \leqslant \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0|$$

证毕！

**注** 利用拉格朗日中值定理

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| = |\varphi'(\xi)||x - y| \leqslant \underbrace{\max_{x\in[a,b]} |\varphi(x)'|}\,|x - y|$$

**例 6.2** 构造不同的迭代法求 $x^2 - 3 = 0$ 根 $x^* = 3$. 要求计算结果精确到小数点后第 7 位

- 迭代格式 1：$x_{k+1} = \dfrac{3}{x_k}$
- 迭代格式 2：$x_{k+1} = x_k - \dfrac{1}{4}(x^2 - 3)$
- 迭代格式 3：$x_{k+1} = \dfrac{1}{2}\left(x_k + \dfrac{3}{x_k}\right)$

上述迭代格式中收敛的是 [2,3] ，收敛最快的是 [3]

解

$$
\begin{aligned}
|\varphi_1'(x)| &= \frac{3}{x^2} & |\varphi_1'(\sqrt{3})| &= 1 \\
|\varphi_2'(x)| &= |1-\frac{x}{2}| & |\varphi_2'(\sqrt{3})| &= 1-\frac{\sqrt{3}}{2} \\
|\varphi_3'(x)| &= \frac{1}{2}\left|1-\frac{3}{x^2}\right| & |\varphi_3'(\sqrt{3})| &= 0
\end{aligned}
$$

$$
|\varphi_3'(x)| = \frac{1}{2}\left|1-\frac{3}{x^2}\right|, |\varphi_3'(\sqrt{3})| = 0, |\varphi_3''(\sqrt{3})| = \frac{6}{(\sqrt{3})^3} \neq 0
$$

迭代格式 3 是二阶收敛的

**定义 6.4 (收敛)** 若存在实数 $p \geq 1$ 和常数 $c > 0$ 满足

$$
\lim_{k\to\infty} \frac{\varepsilon_{k+1}}{\varepsilon_k^p} = c
$$

则称迭代法 $p$ 阶收敛，当 $p = 1$ 时称为线性收敛，$p > 1$ 时称为超线性收敛，$p = 2$ 时称为平方收敛。

显然，$p$ 越大，收敛速度也就越快。

**注** 如何确定 $p$，从而确定收敛阶呢？

$$
\begin{aligned}
\varphi(x) = \varphi(x^*) + \varphi'(x^*)(x-x^*) + \frac{\varphi''(x^*)}{2!}(x-x^*)^2 + \cdots \\
+ \frac{\varphi^{(p-1)}(x^*)}{(p-1)!}(x-x^*)^{p-1} + \frac{\varphi^{(p)}(x^*)}{p!}(x-x^*)^p + \cdots
\end{aligned}
$$

如果 $\varphi'(x^*) = \varphi''(x^*) = \cdots = \varphi^{(p-1)}(x^*) = 0$，从而 $\varphi^{(p)}(x^*) \neq 0$

$$
\varphi(x) = \varphi(x^\star) + \frac{\varphi^{(p)}(x^\star)}{p!}(x-x^\star)^p + \cdots
$$

$$
x_{k+1} = \varphi(x_k) = \varphi(x^\star) + \frac{\varphi^{(p)}(x^\star)}{p!}(x_k-x^\star)^p + \cdots
$$

$$
\frac{|x_{k+1}-x^*|}{|x_k-x^*|^p} = \left|\frac{\varphi^{(p)}(x^*)}{p!} + \frac{\varphi^{(p+1)}(x^*)}{(p+1)!}(x_k-x^*) + \cdots\right| \to \left|\frac{\varphi^{(p)}(x^*)}{p!}\right|, (k\to\infty)
$$

即迭代法 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 的收敛阶是 $p$

**定理 6.2** 如果迭代法迭代函数 $\varphi(x)$ 在根 $x^*$ 附近满足

1. $\varphi(x)$ 存在 $p$ 阶导数且连续；
2. $\varphi'(x^*) = \varphi''(x^*) = \cdots = \varphi^{(p-1)}(x^*) = 0$，而 $\varphi^{(p)}(x^*) \neq 0$

**注** Aitken 加速方法

设 $x_0$ 是根 $x^*$ 的某个近似值，用迭代公式校正一次得，

$$
x_1 = \varphi(x_0)
$$

$$x_1 - x^* = \varphi(x_0) - \varphi(x^*) = \varphi'(\xi)(x_0 - x^*)$$

若将 $x_1$ 再迭代一次得,

$$x_2 = \varphi(x_1)$$
$$x_2 - x^* = \varphi'(\eta)(x_1 - x^*)$$
$$\frac{x_1 - x^*}{x_2 - x^*} \approx \frac{x_0 - x^*}{x_1 - x^*} \Rightarrow x^* \approx \frac{x_0 x_2 - x_1^2}{x_2 - 2x_1 + x_0} = x_0 - \frac{(x_1 - x_0)^2}{x_2 - 2x_1 + x_0}$$

记

$$\overline{x}_{k+1} = x_k - \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{x_{k+2} - 2x_{k+1} + x_k}$$

可以证明,

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\overline{x}_{k+1} - x^*}{x_k - x^*} = 0$$

**定义 6.5 (Aitken 迭代法)** 假设 $\{x_k\}$ 是由不动点迭代得到的序列,

$$\begin{cases} y_k = \varphi(x_k), z_k = \varphi(y_k), \\ x_{k+1} = x_k - \dfrac{(y_k - x_k)^2}{z_k - 2y_k + x_k} \end{cases} \quad (k = 0, 1, 2, \cdots)$$

称上述公式为 Aitken 迭代法。

其中，相当于将原来的迭代改为另一种不动点迭代,

$$x_{k+1} = \psi(x_k)$$

$$\boxed{\psi(x) = x - \frac{[\varphi(x) - x]^2}{\varphi(\varphi(x)) - 2\varphi(x) + x}}$$

**例 6.3** 迭代格式 l: $x_{k+1} = \dfrac{3}{x_k}, k = 0, 1, \cdots$ ★★★★★

**解** Aitken 加速后:

$$x_{k+1} = \frac{x_k^2 + 3}{2x_k}, k = 0, 1 \cdots$$
$$\psi'(x) = \frac{1}{2} - \frac{3}{2x^2}, \psi'(\sqrt{3}) = 0$$
$$\psi''(x) = \frac{3}{x^3}, \psi''(\sqrt{3}) = \frac{1}{\sqrt{3}} \neq 0.$$

## 6.4 Newton 迭代法

**定义 6.6 (Newton 迭代法公式)** 采用 Aitken 方法加速 $f(x) = 0$ 的迭代法：令 $\varphi(x) = x + f(x)$，设 $L = \varphi'(x) = 1 + f'(x)$

$$x_{k+1} = x_k + f(x_k), \quad \bar{x}_{k+1} = x_k + f(x_k)$$
$$x_{k+1} = \bar{x}_{k+1} + \frac{L}{1 - L}(\bar{x}_{k+1} - x_k)$$

记 $M = L - 1$, 则 $x_k + 1 = x_k - \dfrac{f(x_k)}{M}$

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

称为解方程 $f(x) = 0$ 的 Newton 迭代法。

注 Newton 迭代法几何解释: Newton 迭代法也称为切线法

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

切线方程

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

注 收敛性问题

- 若 $x^*$ 是 $f(x) = 0$ 的一个单根, 则 $\varphi'(x^*) = 0$, 即 Newton 法在附近是平方收敛的.

$$\varphi'(x) = 1 - \frac{[f'(x)]^2 - f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2},\ \varphi'(x^*) = 0$$

- 若 $x^*$ 是 $f(x) = 0$ 的 $m(m \geq 2)$ 重根, 则 Newton 法仅为线性收敛.
  有 $f(x^*) = f'(x^*) = \cdots = f^{(m-1)}(x^*) = 0$, 则

$$\begin{aligned}
x_{k+1} - x^* &= x_k - x^* - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \\
&= x_k - x^* - \frac{f^{(m)}(x^*)\dfrac{(x_k - x^*)^m}{m!} + o(x_k - x^*)^{m+1}}{f^{(m)}(x^*)\dfrac{(x_k - x^*)^{(m-1)}}{(m-1)!} + o(x_k - x^*)^{m-1}} \\
&= x_k - x^* - \frac{1}{m}\frac{f^{(m)}(x^*)(x_k - x^*)^m + o(x_k - x^*)}{f^{(m)}(x^*) + o(1)}
\end{aligned}$$

  有

$$\frac{x_{k+1} - x^*}{x_k - x^*} = 1 - \frac{1}{m} \quad (k \to \infty)$$

- 改进 $\varphi(x) = x - m\dfrac{f(x)}{f'(x)}$ 设 $f(x) = (x - x^*)^m g(x)$, $g(x^*) \neq 0$

$$\begin{aligned}
\varphi(x) = x - m\frac{f(x)}{f'(x)} &= x - m\frac{(x - x^*)^m g(x)}{m(x - x^*)^{m-1}g(x) + (x - x^*)^m g'(x)} \\
&= x - m\frac{(x - x^*)g(x)}{mg(x) + (x - x^*)g'(x)}
\end{aligned}$$

  求导

$$\varphi'(x) = 1 - m\frac{g(x)[mg(x) + (x - x^*)g'(x)] - (x - x^*)g(x)[\cdots]}{[mg(x) + (x - x^*)g'(x)]^2}$$

$$\varphi'(x^*) = 1 - m\frac{g(x^*)mg(x^*)}{[mg(x^*)]^2} = 0$$

- 或者改进，记 $\mu(x)=\dfrac{f(x)}{f'(x)}$，则可对 $\mu(x)$ 应用 Newton 法：

$$\varphi(x)=x-\frac{\mu(x)}{\mu'(x)}$$

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

**例 6.4** 构造一个二阶收敛的格式计算方程★★★☆☆

$$x^3+x^2-3x-3=0$$

的二重根 $x=\sqrt{3}$

**解**

$$\begin{aligned}f(x)&=x^3+x^2-3x-3\\f'(x)&=3x^2+2x-3\\f''(x)&=6x+2\end{aligned}$$

$$x_{k+1}=\frac{(x_k^3+x_k^2-3x_k-3)(3x_k^2+2x_k-3)}{(3x_k^2+2x_k-3)^2-(x_k^3+x_k^2-3x_k-3)(6x_k+2)}$$

**注** 牛顿下山法

如果在构造迭代法时加入要求：$|f(x_{k+1})|<|f(x_k)|$，因此考虑引入一因子 $\lambda$, 建立迭代法

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

在迭代时，选择一个 $\lambda$, 使得

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

这种方法称为 Newton 下山法，$\lambda$ 称为下山因子。$\lambda$ 的选取方式按 $\lambda=1,\frac{1}{2},\frac{1}{2^2},\frac{1}{2^3},\cdots$ 的顺序，直到 $\mid f(x_{k+1})\mid<\mid f(x_k)\mid$ 成立为止。

## 6.5 非线性方程组的解法

$$\begin{cases}f_1(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0\\\cdots\\f_n(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0\end{cases},\ \boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\\cdots\\x_n\end{pmatrix},\ \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})=\begin{pmatrix}f_1(\boldsymbol{x})\\f_2(\boldsymbol{x})\\\cdots f_n(\boldsymbol{x})\end{pmatrix}$$

向量值函数 $F:D\subset\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n,\quad \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^*)=0,\ \boldsymbol{x}^*\in D$

**例 6.5** 判断下列说法是否正确，正确请填“T”，错误请填“F”★★☆☆☆

- 非线性方程组的解通常不唯一. [T]
- 二分法可以推广到多维方程组的求解. [F]

给定向量值函数 $\boldsymbol{F}: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, 求 $\boldsymbol{x}^* \in D$, 使得

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^*) = 0$$

迭代求解需要讨论的几个问题

- 迭代序列的适定性;
- 迭代序列的收敛性;
- 迭代序列的收敛速度与效率。

**例 6.6** 判断下列说法是否正确，正确请填“T”，错误请，填“F”

对于求解非线性方程组的不动点迭代 $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^k)$, 若 $\boldsymbol{x}^*$ 为不动点且 $\rho(\boldsymbol{G}'(\boldsymbol{x}^k)) < 1$, 则对任意初值 $\boldsymbol{x}^0$, 迭代序列均收敛. [F]

**注** Newton 法及其变形

$$\begin{aligned} &F{:}D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, \quad F(x) = 0F(x) \approx F(x^k) + F'(x^k)(x - x^k) = 0 \\ &x^{k+1} = x^k - [F'(x^k)]^{-1}F(x^k) \quad (k = 0, 1, \cdots) \end{aligned}$$

Newton 迭代法

$$\begin{cases} x^{k+1} = x^k + \Delta x^k \\ F'(x^k)\Delta x^k = -F(x^k) \quad (k = 0, 1, \cdots) \end{cases}$$

**例 6.7** 判断下列说法是否正确，正确请填“T”，错误请填“F” .★★★☆☆

Newton 迭代法是不动点迭代的一个特例. [T]

**注** 简化的 Newton 迭代法 (Simplified Newton iterative method)

$$x^{k+1} = x^k - BF(x^k) \quad (k = 0, 1, \cdots), \quad B = [F'(x^0)]^{-1}$$

**例 6.8** 判断下列说法是否正确，正确请填“T”，错误请填“F” ★★★☆☆

简化 Newton 迭代法是不动点迭代的一个特例 [T]

**例 6.9** 练习★★★★★

1. 设权函数 $\rho(x) = 1 + x^2$, 区间为 [-1,1], 试求首项系数为 1 的正交多项式 $\varphi_n(x), n = 0, 1, 2, 3$.

   **解**

$$\varphi_0(x) = 1$$

$$
\begin{aligned}
\varphi_1(x) &= x - \frac{(x,1)}{(1,1)}\cdot 1 \\
&= x - \frac{\int_{-1}^{1}(1+x^2)x\cdot 1\mathrm{d}x}{\int_{-1}^{1}(1+x^2)1\cdot 1\mathrm{d}x}\cdot 1 \quad = x
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\varphi_2(x) &= x^2 - \frac{(x^2,1)}{(1,1)}\cdot 1 - \frac{(x^2,x)}{(x,x)}\cdot x \\
&= x^2 - \frac{\int_{-1}^{1}(1+x^2)x^2\cdot 1\mathrm{d}x}{\int_{-1}^{1}(1+x^2)1\cdot 1\mathrm{d}x}\cdot 1 - \frac{\int_{-1}^{1}(1+x^2)x^2\cdot x\mathrm{d}x}{\int_{-1}^{1}(1+x^2)x\cdot x\mathrm{d}x}\cdot x \\
&= x^2 - \frac{2}{5}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\varphi_3(x) &= x^3 - \frac{(x^3,1)}{(1,1)}\cdot 1 - \frac{(x^3,x)}{(x,x)}\cdot x - \frac{(x^3,x^2)}{(x^2,x^2)}\cdot x \\
&= x^3 - \frac{\int_{-1}^{1}(1+x^2)x^3\cdot 1\mathrm{d}x}{\int_{-1}^{1}(1+x^2)1\cdot 1\mathrm{d}x}\cdot 1 - \frac{\int_{-1}^{1}(1+x^2)x^3\cdot x\mathrm{d}x}{\int_{-1}^{1}(1+x^2)x\cdot x\mathrm{d}x}\cdot x - \frac{\int_{-1}^{1}(1+x^2)x^3\cdot x^2\mathrm{d}x}{\int_{-1}^{1}(1+x^2)x^2\cdot x^2\mathrm{d}x}\cdot x^2 \\
&= x^3 - \frac{9}{14}x
\end{aligned}
$$

2. $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为对称正定阵，经一步顺序 Gauss 消元后 $\boldsymbol{A}$ 约化为 $\begin{bmatrix} a_{11} & \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \\ 0 & \boldsymbol{A}_2 \end{bmatrix}$，证明 $\boldsymbol{A}_2$ 也是对称正定阵

证明. 可以设 $\boldsymbol{A}$ 为

$$
\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{A}_2' \end{bmatrix}
$$

其中 $\boldsymbol{A}_2'$ 为对称正定阵。
根据 Gauss 消元的性质，得到

$$
\boldsymbol{A}_2 = \boldsymbol{A}_2' - \frac{1}{a_{11}}\begin{bmatrix} a_{21}\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \\ a_{31}\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \\ \ddots \\ a_{n1}\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}
$$

所以，有

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}} &= \boldsymbol{A}_2'^{\mathrm{T}} - \frac{1}{a_{11}}\begin{bmatrix} a_{21}\boldsymbol{a}_1 & a_{31}\boldsymbol{a}_1\cdots & a_{n1}\boldsymbol{a}_1 \end{bmatrix} \\
&= \boldsymbol{A}_2' - \frac{1}{a_{11}}\begin{bmatrix} a_{21}\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \\ a_{31}\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \\ \cdots \\ a_{n1}\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

3. $G(x)=\frac{1}{3}x+3$, 证明 $G$ 在 $[0,1]$ 上是压缩的，但没有不动点

**证明.** 因为 $|G'(x)| = \dfrac{1}{3} < 1$，故而 $G$ 在 $[0,1]$ 上是压缩的.

接下开证明没有不动点，令 $G(x) = x$，解得 $x = -\dfrac{9}{2} \notin [0,1]$。

综上所述，$G(x) = \dfrac{1}{3}x + 3$, 证明 $G$ 在 $[0,1]$ 上是压缩的，但没有不动点。证毕！

# 7 解线性方程组的直接法

**定义 7.1 (特征值和谱半径)** 设 $\boldsymbol{A} = (a_{ij}) \in \mathrm{R}^{n\times n}$, 若存在一个数 $\lambda$(实数或复数) 和非零向量 $\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}} \in \mathrm{R}^n$, 使

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

则称 $\lambda$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，$\boldsymbol{x}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 对应 $\lambda$ 的特征向量，$\boldsymbol{A}$ 的全体特征值称为 $\boldsymbol{A}$ 的谱，记作 $\sigma(\boldsymbol{A})$, 即 $\sigma(\boldsymbol{A}) = \{\lambda_1, \cdots, \lambda_n\}$,

$$\rho(\boldsymbol{A}) = \max_{\lambda \in \sigma(\boldsymbol{A})} |\lambda|$$

称为 $\boldsymbol{A}$ 的谱半径。

**定义 7.2** 设 $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n, \sigma$ 为实数，则

$$E(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \sigma) = \boldsymbol{I} - \sigma \boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}$$

称为初等矩阵。

初等矩阵 = 单位矩阵减去秩最多为 1 的方阵

**注** 记 $\boldsymbol{u} = (u_1, u_2, \cdots, u_n)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{v} = (v_1, v_2, \cdots, v_n)^{\mathrm{T}}$ 则

$$E(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \sigma) = (\delta_{ij} - \sigma u_i v_j)_{n\times n}$$

1. 初等矩阵的逆矩阵

$$E^{-1}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \sigma) = I - \beta \boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^T$$

   其中 $\beta = \dfrac{\sigma}{\sigma \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u} - 1}$

2. 其行列式

$$\det(E(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \sigma)) = 1 - \sigma \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}$$

**定义 7.3 (初等-k 下三角矩阵（或 Gauss 变换）)** 设

$$\boldsymbol{l}_k = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ m_{k+1} \\ \vdots \\ m_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_k = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

称矩阵 $\boldsymbol{L}_k(\boldsymbol{l}_k)=E(\boldsymbol{l}_k,\boldsymbol{e}_k,1)=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{l}_k\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}$ 的初等-k 下三角矩阵（或 Gauss 变换）

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}_k(\boldsymbol{l}_k)&=E(\boldsymbol{l}_k,\boldsymbol{e}_k,1)=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{l}_k\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}\\&=\begin{bmatrix}1&&&&&\\&\ddots&&&&\\&&1&&&\\&&-m_{k+1}&1&&\\&&\vdots&&\ddots&\\&&-m_n&&&1\end{bmatrix}\end{aligned}$$

对其逆矩阵 $\beta=\dfrac{1}{\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{l}-1}=1$

**定理 7.1** 设有向量 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$, 且 $x_k\neq 0$, 则存在唯一的初等下三角矩阵 (指标为 $k$)$\boldsymbol{L}_k(\boldsymbol{l}_k)=E(\boldsymbol{l}_k,\boldsymbol{e}_k,1)=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{l}_k\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}$, 使

$$\boldsymbol{L}_k(\boldsymbol{l}_k)\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}x_1\\\vdots\\x_k\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}\equiv y$$

其中

$$\boldsymbol{l}_k=(0,\cdots,0,m_{k+1},m_n)^{\mathrm{T}}$$
$$m_i=\frac{x_i}{x_k},\quad (i=k+1,\cdots,n)$$

**定义 7.4 (初等反射矩阵)** 设 $\boldsymbol{w}\in\mathbb{R}^n$ 满足 $\|\boldsymbol{w}\|_2^2=\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}=1,\sigma=2$, 称初等矩阵

$$E(\boldsymbol{w},\boldsymbol{w},2)=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\equiv H(\boldsymbol{w})$$

为初等反射矩阵或 Householder 变换。

**定理 7.2** 设 $H(\boldsymbol{w})=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}$ 为初等反设矩阵，则

1. $H(\boldsymbol{w})^{\mathrm{T}}=H(\boldsymbol{w})$（对称）
2. $H(\boldsymbol{w})^{\mathrm{T}}=H(\boldsymbol{w})^{-1}$（正交）
3. 设 $\boldsymbol{A}$ 为对称阵，那么

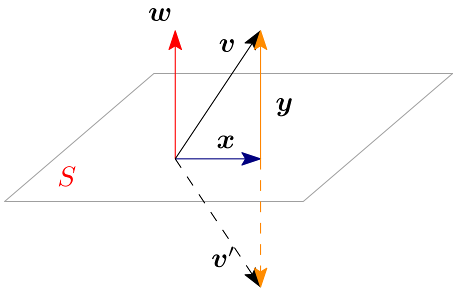
$$\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{H}$$

也是对称的

**注** 初等反设矩阵的几何意义

$$H(\boldsymbol{w})=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}},\quad \|\boldsymbol{w}\|_2^2=\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}=1,$$

$\boldsymbol{v}'$ 为 $\boldsymbol{v}$ 关于平面 $S$ 的镜面反设




$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}\boldsymbol{v} &= \boldsymbol{v} - 2\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} \\
&= \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - 2\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\
&= \boldsymbol{x} - 2\boldsymbol{y} = \boldsymbol{v}'
\end{aligned}
$$

## 7.1 Gauss 消元法

得到等价的线性代数方程组

$$
\begin{cases}
a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\
a_{ii}^{(i)}x_i + a_{i,i+1}^{(i)}x_{i+1} + \cdots + a_{in}^{(i)}x_n = b_i^{(i)} \\
\cdots \\
a_{n-1,n-1}^{(n-1)}x_{n-1} + a_{n-1,n}^{(n-1)}x_n = b_{n-1}^{(n-1)} \\
a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)}
\end{cases}
$$

**算法 7.1:** Gauss 消元法

**输入:** $[\boldsymbol{A}\,|\boldsymbol{b}]$

**输出:** $\boldsymbol{x}$

$\boldsymbol{Z} = [\boldsymbol{A}\,|\boldsymbol{b}]$

**for** $k = 1 \to n-1$ **do**

  **for** $i = k+1 \to n$ **do**

    $\boldsymbol{Z}[i,:] \leftarrow \boldsymbol{Z}[i,:] - \dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}\boldsymbol{Z}[k,:]$

  **end**

**end**

$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Z}[:,1:n]$

$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{Z}[:,n+1]$

**for** $i = n \to 1$ **do**

  $\boldsymbol{x}[i] = \boldsymbol{b}[i]$

  $\boldsymbol{x}[i] = \boldsymbol{x}[i] - \boldsymbol{A}[i,i+1:]\boldsymbol{x}[i+1:]$

  $\boldsymbol{x}[i] = \boldsymbol{x}[i]/\boldsymbol{A}[i,i]$

**end**

**return** $\boldsymbol{x}$

注 高斯消元法的运算量

$$
MD = \frac{n^3}{3} - \frac{n}{3} = \frac{n^3}{3} + O(n)
$$

**例 7.1** 用 Gauss 消去法解线性方程组 (用四位有效数字计算)

$$\begin{cases} 0.0001x_1 + 2x_2 = 1 \\ 2x_1 + 3x_2 = 2 \end{cases} \quad \boldsymbol{x}^* = \begin{pmatrix} 0.25001875 \\ 0.49998750 \end{pmatrix}$$

**解** 用 Gauss 消去法求解 回代得到 $x_1 = 0.0000$, $x_2 = 0.5000$

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}] &= \begin{bmatrix} 0.0001 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0.0001 & 2 & 1 \\ 0 & -4.000\times10^4 & -2.000\times10^4 \end{bmatrix} \\ & \qquad\qquad\quad -39997 \qquad\quad -19998 \end{aligned}$$

**注** 问题:

与精确解相比, 该结果相当糟糕

原因: 在求行乘数时用了很小的数 0.0001 作除数

**例 7.2** 将两个方程互换为

$$\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 = 2 \\ 0.0001x_1 + 2x_2 = 1 \end{cases}$$

**解** 再采用 Gauss 消去法求解 回代得到 $x_1 = 0.2500$, $x_2 = 0.5000$

$$[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}] = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 0.0001 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 2 \\ 0 & 2 & 0.9998 \end{bmatrix} 0.99985$$

$$1.99985$$

**定义 7.5 (列主元 Gauss 消元法)** 经过 $k$ 步约化后

$$\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A}^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & & & \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \\ & \mathbf{0} & & a_{mk}^{(k)} & \cdots & a_{mn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

在 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的第 $k$ 列选主元, $|a_{i_k,k}^{(k)}| = \max_{k\le i\le n}|a_{ik}^{(k)}|$。若 $i_k > k$, 则在 $[\boldsymbol{A}^{(k)} \mid \boldsymbol{b}^{(k)}]$ 中将 $i_k$ 与 $k$ 行互换, 再按照 Gauss 消元公式求出 $[A^{(k+1)} \mid b^{(k+1)}]$。重复以上过程直到求出 $[\boldsymbol{A}^{(n)}|\boldsymbol{b}^{(n)}]$

**例 7.3** 要将这段顺序 Gauss 消元法的 Matlab 程序改成列主元 Gauss 消元法, 需要在 [A] 处添加代码★★★☆☆

**算法 7.2:** Gauss 列主元消元法

**输入:** $[\boldsymbol{A}\,|\boldsymbol{b}]$

**输出:** $\boldsymbol{x}$

$\boldsymbol{Z} = [\boldsymbol{A}\,|\boldsymbol{b}]$

**for** $k = 1 \to n-1$ **do**

    // A

    **for** $i = k+1 \to n$ **do**

        // B

        $\boldsymbol{Z}[i,:] \leftarrow \boldsymbol{Z}[i,:] - \dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}\boldsymbol{Z}[k,:]$

    **end**

    // C

**end**

$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Z}[:,1:n]$

$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{Z}[:,n+1]$

**for** $i = n \to 1$ **do**

    // D

    $\boldsymbol{x}[i] = \boldsymbol{b}[i]$

    $\boldsymbol{x}[i] = \boldsymbol{x}[i] - \boldsymbol{A}[i,i+1:]\boldsymbol{x}[i+1:]$

    $\boldsymbol{x}[i] = \boldsymbol{x}[i]/\boldsymbol{A}[i,i]$

**end**

**return** $\boldsymbol{x}$

## 7.2 直接三角分解法

经过以下变换

$$\boldsymbol{L}_1(\boldsymbol{l}_1) = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_1\boldsymbol{e}_1^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{l}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{a_{21}}{a_{11}} & \frac{a_{31}}{a_{11}} & \frac{a_{41}}{a_{11}} \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{L}_1(\boldsymbol{l}_1) = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -\dfrac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{1}} & 1 & & \\ -\dfrac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{1}} & & 1 & \\ -\dfrac{a_{41}^{(1)}}{a_{11}^{1}} & & & 1 \end{pmatrix}, \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}^{(2)} & \boldsymbol{b}^{(2)} \end{bmatrix} = \boldsymbol{L}_1(\boldsymbol{l}_1)\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}^{(1)} & \boldsymbol{b}^{(1)} \end{bmatrix}$$

$$
\boldsymbol{L}_2\left(\boldsymbol{l}_2\right)=\begin{pmatrix} 1 & & & \\ 0 & 1 & & \\ 0 & -\dfrac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} & 1 & \\ 0 & -\dfrac{a_{42}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} & & 1 \end{pmatrix},\ \begin{bmatrix}\boldsymbol{A}^{(3)} & \boldsymbol{b}^{(3)}\end{bmatrix}=\boldsymbol{L}_2\left(\boldsymbol{l}_2\right)\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}^{(2)} & \boldsymbol{b}^{(2)}\end{bmatrix}
$$

$$
\boldsymbol{L}'\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\Rightarrow\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}
$$

其中

$$
\boldsymbol{L}'=\boldsymbol{L}_1(\boldsymbol{l}_2)\boldsymbol{L}_2(\boldsymbol{l}_1)\cdots\boldsymbol{L}_{n-1}(\boldsymbol{l}_{n-1})=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ \vdots & l_{32} & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & \cdots & 1 \end{bmatrix}
$$

**定理 7.3** 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 非奇异，且各阶顺序主子式

$$
D_k=\det\ \boldsymbol{A}_k=\begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix}\neq 0
$$

则 $\boldsymbol{A}$ 可唯一地分解为一个单位下三角阵 $\boldsymbol{L}$ 与一个上三角阵 $\boldsymbol{U}$ 的乘积，即

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

**例 7.4** 请将下列矩阵进行三角分解★★★☆☆

$$
\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ 4 & 2 & 5 \\ 1 & 2 & 0 \end{bmatrix}
$$

**解**

第一行 $\boldsymbol{L}$

| | | |
|---|---|---|
| 1 | 0 | 0 |
| | 1 | 0 |
| | | 1 |

$\boldsymbol{U}$

| | | |
|---|---|---|
| 2 | -1 | 3 |
| 0 | | |
| 0 | 0 | |

第一列 $\boldsymbol{L}$

| | | |
|---|---|---|
| 1 | 0 | 0 |
| 2 | 1 | 0 |
| $\frac{1}{2}$ | | 1 |

$\boldsymbol{U}$

| | | |
|---|---|---|
| 2 | -1 | 3 |
| 0 | | |
| 0 | 0 | |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 第二行 | $\boldsymbol{L}$ | 1 | 0 | 0 | $\boldsymbol{U}$ | 2 | -1 | 3 |
| | | 2 | 1 | 0 | | 0 | 4 | -1 |
| | | $\frac{1}{2}$ | | 1 | | 0 | 0 | |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 第二列 | $\boldsymbol{L}$ | 1 | 0 | 0 | $\boldsymbol{U}$ | 2 | -1 | 3 |
| | | 2 | 1 | 0 | | 0 | 4 | -1 |
| | | $\frac{1}{2}$ | $\frac{5}{8}$ | 1 | | 0 | 0 | |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 第三行 | $\boldsymbol{L}$ | 1 | 0 | 0 | $\boldsymbol{U}$ | 2 | -1 | 3 |
| | | 2 | 1 | 0 | | 0 | 4 | -1 |
| | | $\frac{1}{2}$ | $\frac{5}{8}$ | 1 | | 0 | 0 | $-\frac{7}{8}$ |

**例 7.5** 用 Doolittle 分解法求解线性方程组★★★★☆

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 6 \\ 5 \end{bmatrix}$$

**解**

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 1/2 & 1 & \\ 1/2 & 3/5 & 1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ & 5/2 & 3/2 \\ & & 3/5 \end{bmatrix}$$

求解 $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}$ 得 $\boldsymbol{y} = (4, 4, 3/5)^{\mathrm{T}}$

求解 $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$ 得 $\boldsymbol{x} = (1, 1, 1)^{\mathrm{T}}$

**定义 7.6** 若 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 对称正定，则存在唯一的对角元为正的下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$, 使 $\boldsymbol{A}$ 分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LL}^{\mathrm{T}}$$

**例 7.6** 用平方根法求解线性方程组★★★★☆

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -0.5 \\ 1.25 \end{pmatrix}$$

则分解后矩阵中的 $l_{21}$ = [-0.5]。

## 7.3 大型带状方程组的求解

**定义 7.7 (三对角方程)** 方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{f}$ 称为三对角方程

其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{f}=\begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}.$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}&=\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \\ &=\begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_1\beta_1 & & & \\ \gamma_2 & \gamma_2\beta_1+\alpha_2 & \alpha_2\beta_2 & & \\ & \gamma_3 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \gamma_{n-1}\beta_{n-2}+\alpha_{n-1} & \alpha_{n-1}\beta_{n-1} \\ & & & \gamma_n & \gamma_n\beta_{n-1}+\alpha_n \end{pmatrix}\end{aligned}$$

## 7.4 向量和矩阵范数

**定义 7.8** 设 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$( 或 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$), 关于 $\boldsymbol{x}$ 的某个实值非负函数 $N(\boldsymbol{x})\equiv\|\boldsymbol{x}\|$, 如果满足下列条件:

1. $\|\boldsymbol{x}\|\geq 0$, 且 $\|\boldsymbol{x}\|=0\Leftrightarrow\boldsymbol{x}=0$
2. $\|\alpha\boldsymbol{x}\|=|\alpha|\cdot\|\boldsymbol{x}\|,\alpha\in\mathbb{R}(\mathbb{C})$;
3. $\|\boldsymbol{x}+y\|\leq\|\boldsymbol{x}\|+\|y\|,\forall\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n(\mathbb{C}^n)$.

则称 $N(\boldsymbol{x})\equiv\|\boldsymbol{x}\|$ 是 $\mathbb{R}^n$( 或 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$) 上的一个向量范数 (或模)。

**注** 常用的向量范数

有 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^n$

- $\infty$ 范数 $\|\boldsymbol{x}\|_\infty=\max\limits_{1\leq i\leq n}|x_i|$
- 1-范数 $\|\boldsymbol{x}\|_1=\sum\limits_{i=1}^n|x_i|$

- 2-范数 $\|\boldsymbol{x}\|_2=\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i^2)^{1/2}$

**定义 7.9 (向量的 $w$ 范数)** 向量的 $w$ 范数由矩阵 $\boldsymbol{w}$ 诱导

1. 设 $N(\boldsymbol{x})=\|\boldsymbol{x}\|_v$ 是 $\mathbb{R}^n$ 上的一个向量范数
2. 设 $\boldsymbol{w}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为非奇异矩阵，则 $M(\boldsymbol{x})\equiv\|\boldsymbol{x}\|_w\equiv\|\boldsymbol{wx}\|_v$ 是 $\mathbb{R}^n$ 上的一个向量范数

**定义 7.10 (矩阵范数)** 关于矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 的某个实值非负函数 $N(\boldsymbol{A})\equiv\|\boldsymbol{A}\|$, 如果满足下列条件：

1. $\|\boldsymbol{A}\|\geq 0$, 且 $\|\boldsymbol{A}\|=0\Leftrightarrow\boldsymbol{A}=0$;
2. $\|\alpha\boldsymbol{A}\|=|\alpha|\cdot\|\boldsymbol{A}\|,\alpha\in\mathbb{R}$;
3. $\|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\|\leq\|\boldsymbol{A}\|+\|\boldsymbol{B}\|,\forall\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{R}^{n\times n}$;
4. $\|\boldsymbol{AB}\|\leq\|\boldsymbol{A}\|\cdot\|\boldsymbol{B}\|,\forall\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{R}^{m\times n}$。

则称 $N(\boldsymbol{A})$ 是 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 上的一个矩阵范数 (或模)。

**定义 7.11 (矩阵的 F 范数)** $F(\boldsymbol{A})\equiv\|\boldsymbol{A}\|_F=\left(\sum\limits_{i,j=1}^{n}a_{ij}^2\right)^{1/2}$

**定义 7.12 (矩阵的算子范数)** 设 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$，已经给出了一种向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|_v$ 定义一个矩阵的非负函数

$$N(\boldsymbol{A})\equiv\|\boldsymbol{A}\|_v=\max_{\substack{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n\\ \boldsymbol{x}\neq 0}}\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_v}{\|\boldsymbol{x}\|_v}=\max_{\substack{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n\\ \|\boldsymbol{y}\|=1}}\|\boldsymbol{Ay}\|_v$$

**注** 常用的矩阵范数

设 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$

- $\|\boldsymbol{A}\|_\infty=\max\limits_{1\leq i\leq n}\sum_{j=1}^n|a_{ij}|$，行范数
- $\|\boldsymbol{A}\|_1=\max\limits_{1\leq j\leq n}\sum_{i=1}^n|a_{ij}|$，列范数
- $\|\boldsymbol{A}\|_2=\sqrt{\rho(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})}$，2-范数

**注** 矩阵特征值的界

1. 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 则 $\rho(\boldsymbol{A})\leq\|\boldsymbol{A}\|_v$, $\|\boldsymbol{A}\|_v$ 为满足相容条件的矩阵范数；
2. 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为对称矩阵，则 $\|\boldsymbol{A}\|_2=\rho(\boldsymbol{A})$

**定理 7.4** 设 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 则

$$\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{A}^k=0\Leftrightarrow\rho(\boldsymbol{A})<1$$

**定理 7.5** 设 $\boldsymbol{B}\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 且 $\|\boldsymbol{B}\|<1$($\|\boldsymbol{B}\|$ 为矩阵的算子范数), 则 $\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{B}$ 为非奇异矩阵，且有估计

$$\|(\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{B})^{-1}\|\leq\frac{1}{1-\|\boldsymbol{B}\|}$$

证明. 只证明 $\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{B}$ 为非奇异矩阵，设 $\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}$ 为奇异矩阵，则存在非零向量 $\boldsymbol{x}$ 使得

$$(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}=\mathbf{0}$$

那么有

$$\begin{aligned}\|(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}\| &= \|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}\| \le \|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}\| \\ &\le \|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{B}\|\|\boldsymbol{x}\| = (1+\|\boldsymbol{B}\|)\|\boldsymbol{x}\| \\ &< 2\|\boldsymbol{x}\|\end{aligned}$$

## 7.5 条件数与病态矩阵

例 7.7 已知 $A=\begin{pmatrix}1 & -3\\ -1 & 2\end{pmatrix}$, 求 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty\,\|\boldsymbol{A}\|_1\,,\|\boldsymbol{A}\|_2\,.$★★★★☆

解 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty=4\|\boldsymbol{A}\|_1=5$

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & -1\\ -3 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -3\\ -1 & 2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2 & -5\\ -5 & 13\end{pmatrix}$$

$$\lambda_{1,2}=\frac{15\pm\sqrt{221}}{2}\qquad \|\boldsymbol{A}\|_2=\sqrt{\frac{15+\sqrt{221}}{2}}\approx 3.864$$

注 常用条件数:

$$\mathrm{Cond}(\boldsymbol{A})_\infty=\|\boldsymbol{A}^{-1}\|_\infty\cdot\|\boldsymbol{A}\|_\infty$$

$$\begin{aligned}&\mathrm{Cond}(\boldsymbol{A})_2=\|\boldsymbol{A}^{-1}\|_2\cdot\|\boldsymbol{A}\|_2\\ &=\sqrt{\lambda_{\max}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\right)^{-1}}\cdot\sqrt{\lambda_{\max}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\right)}=\frac{\sqrt{\lambda_{\max}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\right)}}{\sqrt{\lambda_{\min}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\right)}}\end{aligned}$$

$\boldsymbol{A}$ 非奇异、对称，$\|\lambda_1\|\ge\|\lambda_2\|\ge\cdots\ge\|\lambda_n\|$

$$\mathrm{Cond}(\boldsymbol{A})_2=\frac{\|\lambda_1\|}{\|\lambda_n\|}$$

例 7.8 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1. & 1.\\ 1. & 1.0001\end{bmatrix}$ 的条件数 $\mathrm{Cond}(\boldsymbol{A})_\infty=$ [40000]

解

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1. & 1.\\ 1. & 1.0001\end{bmatrix}$$

$$
\boldsymbol{A}^{-1}=\begin{bmatrix}1.0001 & -1. \\ -1. & 1.\end{bmatrix}\cdot\frac{1}{0.0001}
$$

$$
\|\boldsymbol{A}\|_\infty=2.0001 \quad \|\boldsymbol{A}^{-1}\|_\infty=2.0001\times 10^4
$$

$$
\mathrm{Cond}(\boldsymbol{A})_\infty\approx 4.\times 10^4
$$

注 如何判断 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 是病态？

1. 估计条件数；
2. 若用列主元消去法求解方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，在约化中出现小主元，可能是病态；
3. $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 出现一个相对很大的解，可能是病态；
4. $\boldsymbol{A}$ 中的元素的数量级相差很大，可能是病态；
5. 当 $\det(\boldsymbol{A})$ 相对很小、或 $\boldsymbol{A}$ 某些行 (列) 近似线性相关，可能是病态

# 8 解线性方程组的迭代法

## 8.1 迭代法的构造

注 迭代法的基本思想：

$$
\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}\Leftrightarrow\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Bx}+\boldsymbol{f}
$$

选取初始向量 $x^{(0)}$，构造迭代格式：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}^{(1)}&=\boldsymbol{Bx}^{(0)}+\boldsymbol{f}\\
\boldsymbol{x}^{(2)}&=\boldsymbol{Bx}^{(1)}+\boldsymbol{f}\\
&\vdots\\
\boldsymbol{x}^{(k)}&=\boldsymbol{Bx}^{(k-1)}+\boldsymbol{f}
\end{aligned}
$$

两边取极限得到

$$
\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{Bx}^*+\boldsymbol{f}
$$

注 迭代法构造的一般原则：

将系数矩阵分解为

$$
\boldsymbol{A}=\boldsymbol{M}-\boldsymbol{N}
$$

故而有

$$
\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}\Leftrightarrow\boldsymbol{Mx}=\boldsymbol{Nx}+\boldsymbol{b}
$$

从而方程组等价化为

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

需要满足以下条件

- $\boldsymbol{M}$ 非奇异
- $\boldsymbol{M}^{-1}$ 容易求

迭代法的收敛性

**定理 8.1 (迭代法基本定理)** 对于任意的初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$，迭代法构

$$\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k-1)}+\boldsymbol{f}$$

收敛的充分必要条件为

$$|\lambda_i(\boldsymbol{B})|<1,\quad (i=1,\cdots,n)$$

或者

$$\rho(\boldsymbol{B})<1$$

**例 8.1** 用迭代法求解下列方程组

$$\begin{cases}8x_1-3x_2+2x_3=20\\4x_1+11x_2-x_3=33\\6x_1+3x_2+12x_3=36\end{cases}\qquad\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3.0000\\2.0000\\1.0000\end{pmatrix}$$

**解** 将系数矩阵分解为

$$\begin{pmatrix}8&-3&2\\4&11&-1\\6&3&12\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}8&&\\&11&\\&&12\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&3&-2\\-4&0&1\\-6&-3&0\end{pmatrix}$$

从而构造迭代法

$$\boldsymbol{x}^k=\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}^{(k-1)}+\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{b}$$

**定理 8.2** 对于任意的初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$, 若存在 $\boldsymbol{B}$ 的某种范数 $\|\cdot\|$, 使得 $\|\boldsymbol{B}\|=q<1$, 则迭代法收敛，且

1. $\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|\leq\frac{q}{1-q}\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)}\|$;
2. $\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|\leq\frac{q^k}{1-q}\|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(0)}\|$ .

**证明.** 先证明 1

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|&=\|\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}^{(k-1)}-\boldsymbol{x}^*)\|\\&\leq\|\boldsymbol{B}\|\|(\boldsymbol{x}^{(k-1)}-\boldsymbol{x}^*)\|\\&=\|\boldsymbol{B}\|\|(\boldsymbol{x}^{(k-1)}-\boldsymbol{x}^k)+(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*)\|\\&\leq\|\boldsymbol{B}\|\|(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})\|+\|\boldsymbol{B}\|\|(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*)\|\\&=q\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)}\|+q\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|\end{aligned}$$

故而

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

再证明 2

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

**例 8.2** 对线性方程组

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \end{pmatrix}$$

若用迭代法

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{b})$$

求解，则 $\alpha \in$ [(-0.5,0)] 时迭代收敛，$\alpha =$ [-0.4] 时迭代收敛最快。

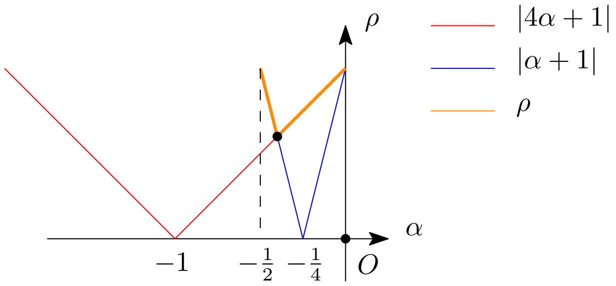
**解** 由 $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} - b)$ 知道

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (\alpha\boldsymbol{A} + \boldsymbol{I})\boldsymbol{x}^{(k)} - \alpha b$$

求 $\alpha\boldsymbol{A} + I$ 的谱半径 $\rho$

$$\begin{aligned} &\begin{vmatrix} \lambda - 3\alpha - 1 & -2\alpha \\ -\alpha & \lambda - 2\alpha - 1 \end{vmatrix} \\ &= \lambda^2 - (5\alpha+2)\lambda + (3\alpha+1)(2\alpha+1) - 2\alpha^2 \\ &= \lambda^2 - (5\alpha+2)\lambda + 4\alpha^2 + 5\alpha + 1 \\ &= [\lambda - (4\alpha+1)][\lambda - (\alpha+1)] \end{aligned}$$

谱半径的图像 $\rho = \max\{|4\alpha+1|, |\alpha+1|\}$




当 $\alpha \in (-0.5, 0)$ 时迭代收敛，$\alpha = -0.4$ 时迭代收敛最快

### 8.1.1 Jacobi 迭代法

设 $a_{ii} \neq 0$, $(i = 1, 2, \cdots n)$, $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{N} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{A}$，有

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{B}_J = \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{D} - \boldsymbol{A}) = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}) \\ &\boldsymbol{f} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b} \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}_J \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}$$

**定理 8.3 (Jacobi 迭代的收敛性定理)** Jacobi 迭代法收敛有以下结论

- Jacobi 迭代法收敛的充分必要条件是

$$\rho(\boldsymbol{B}_J) < 1$$

- Jacobi 迭代法收敛的充分条件是存在一种范数 $\|\cdot\|$，使得 $\|\boldsymbol{B}_J\| \leqslant 1$

### 8.1.2 Gauss-Seidel 迭代法

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{11}}(b_1 - \sum_{j=2}^{n} a_{1j} x_j^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21} x_1^{(k+1)} - \sum_{j=3}^{n} a_{2j} x_j^{(k)}) \\ &\cdots\cdots \\ x_i^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}) \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}_G$$

其中

$$\boldsymbol{G} = (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U},\ \boldsymbol{f}_G = (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$$

**定理 8.4 (GS 迭代的收敛性定理)** GS 迭代法收敛的充分必要条件是

- GS 迭代法收敛的充分必要条件是

$$\rho(\boldsymbol{G}) < 1$$

- GS 迭代法收敛的充分条件是存在一种范数 $\|\cdot\|$，使得 $\|\boldsymbol{G}\| \leqslant 1$

### 8.1.3 SOR

$$\widetilde{x}_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)})$$

$$\begin{aligned}
x_i^{(k+1)} &= (1-\omega)x_i^{(k)} + \omega\widetilde{x}_i^{(k+1)} \\
&= x_i^{(k)} + \omega\left(\widetilde{x}_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}\right) \\
&= (1-\omega)x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)})
\end{aligned}$$

其中 $\omega$ 为可选择的松弛因子

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (1-\omega)\boldsymbol{x}^{(k)} + \omega\boldsymbol{D}^{-1}\left(\boldsymbol{b} + \boldsymbol{L}\boldsymbol{x}^{(k+1)} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}^{(k)}\right) \\
&(\boldsymbol{D} - \omega\boldsymbol{L})\boldsymbol{x}^{(k+1)} = [(1-\omega)\boldsymbol{D} + \omega\boldsymbol{U}]\boldsymbol{x}^{(k)} + \omega\boldsymbol{b}
\end{aligned}$$

表示为矩阵

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{G}_\omega\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}_\omega$$

$$\boldsymbol{G}_\omega = (\boldsymbol{D} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}[(1-\omega)\boldsymbol{D} + \omega\boldsymbol{U}]$$

$$\boldsymbol{f} = \omega(\boldsymbol{D} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$$

**定理 8.5 ((SOR 方法收敛的必要条件))** 设解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n})$ 的 SOR 方法收敛。则 $0 < \omega < 2$.

**证明.** SOR 法收敛就是 $\rho(\boldsymbol{G}_\omega) < 1$ 因为 $\boldsymbol{G}_\omega = (D - \omega\boldsymbol{L})^{-1}[(1-\omega)\boldsymbol{D} + \omega\boldsymbol{U}]$

$$|\det(\boldsymbol{D} - \omega\boldsymbol{L})| = \prod_{i=1}^{n} |a_{ii}|$$

$$|\det((1-\omega)\boldsymbol{D} + \omega\boldsymbol{U})| = |(1-\omega)^n| \prod_{i=1}^{n} |a_{ii}|$$

$$|\det(\boldsymbol{G}_\omega)| = |(1-\omega)^n| \le \rho(\boldsymbol{G}_\omega)^n$$

$$\begin{aligned}
&|(1-\omega)| < \rho(\boldsymbol{G}_\omega) < 1 \\
&-1 < 1-\omega < 1 \\
&0 < \omega < 2
\end{aligned}$$

证毕!

**注** 关于解特殊方程组迭代法的收敛性

**定义 8.1 (对角占优)** 设 $\boldsymbol{A} = (a_ij) \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 则

- 若 $| a_{ii} |> \sum_{j=1}^{n} | a_{ij} | (i = 1, 2, \cdots, n)$, 称 $\boldsymbol{A}$ 为严格对角占优矩阵 (或强占优阵)。

- 若 $\mid a_i i \mid \geq \sum_{i=1}^{n} \mid a_{ij} \mid (j=1,2,\cdots,n)$, 且至少有一个不等式严格成立，则称 $\boldsymbol{A}$ 为弱对角占优阵。

**定义 8.2 ((可约与不可约阵))** 设 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times n}(n\geq 2)$, 如果存在置换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 使

$$\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12}\\ 0 & \boldsymbol{A}_{22}\end{pmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{A}_{11}$ 为 $r$ 阶方阵，$\boldsymbol{A}_{22}$ 为 $n-r$ 阶方阵 $(1\leq r<n)$, 则称 $\boldsymbol{A}$ 为可约矩阵；否则如果不存在这样的置换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 使上式成立，称 $\boldsymbol{A}$ 为不可约阵.

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}\Rightarrow\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}x=\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$
$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12}\\ 0 & \boldsymbol{A}_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{C}_1\\ \boldsymbol{C}_2\end{pmatrix}$$

**定理 8.6** 设 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$,$\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times n}$,

- 如果 $\boldsymbol{A}$ 为严格对角占优阵，则解方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的 J 法及 GS 法均收敛.
- 如果 $\boldsymbol{A}$ 为弱对角占优阵且不可约阵，则解方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的 J 法及 GS 法均收敛.

**定理 8.7** 设 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 若

1. $\boldsymbol{A}$ 严格对角占优或弱对角占优且不可约，
2. $0<\omega\leq 1$,

则解方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的 SOR 法收敛。

**定理 8.8** 设 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 若

1. $\boldsymbol{A}$ 为对称正定矩阵，
2. $0<\omega<2$,

则解方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的 SOR 法收敛。

**注** 送代法的收敛速度

记 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}=\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{*}$,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{(k+1)}&=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)}+f\\ \boldsymbol{x}^{(*)}&=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(*)}+f\\ \boldsymbol{\varepsilon}^{(k+1)}&=\boldsymbol{B}\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}=\cdots=\boldsymbol{B}^{k+1}\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}\end{aligned}$$

则有 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}=\boldsymbol{B}^{k}\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}$

若迭代 $k$ 步后，有 $\parallel\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}\parallel\leq 10^{-m}\parallel\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}\parallel$

误差模的缩减因子接近 $[\rho(\boldsymbol{B})]^k$

$$\boxed{[\rho(\boldsymbol{B})]^k \leq 10^{-m}}$$

称

$$R(\boldsymbol{B}) = -\ln \rho(\boldsymbol{B})$$

为迭代法的渐近收敛速度。

## 8.2 梯度法

线性方程组（$\boldsymbol{A}$ 对称正定）：

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

- 经典算法：Gauss 消元法、系数矩阵三角分解法
- 算法缺陷：计算时间随问题规模急速增长。

将问题转化为

$$\min f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$$

## 8.3 最速下降法

$$\boldsymbol{d}_k = -\nabla f(\boldsymbol{x}_k) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

$$\alpha_k = \arg\min_{\alpha\in\mathbb{R}} f(\boldsymbol{x}_k + \alpha\boldsymbol{d}_k) = \frac{\langle \boldsymbol{d}_k, \boldsymbol{d}_k\rangle}{\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{d}_k, \boldsymbol{d}_k\rangle}$$

### 8.3.1 共轭方向法

**定义 8.3 (共轭方向)** 对对称正定阵 $\boldsymbol{A}$，若 $\boldsymbol{d}_1, \boldsymbol{d}_2 \in \mathbb{R}^n$，满足 $\boldsymbol{d}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{d}_2 = 0$，则称 $\boldsymbol{d}_1, \boldsymbol{d}_2$ 关于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 共轭，并称其为 $A$ 的共轭方向。

共轭是正交的推广。

**定义 8.4 (线性共轭方向的推广)** 若向量组 $\boldsymbol{d}_1, \boldsymbol{d}_2, \cdots, \boldsymbol{d}_n$ 关于对称正定阵 $\boldsymbol{A}$ 两两共轭，即满足

$$\boldsymbol{d}_i\boldsymbol{A}\boldsymbol{d}_j = 0,\ 1 \leqslant i \neq j \leqslant k$$

**推论** 若向量组 $\boldsymbol{d}_1, \boldsymbol{d}_2, \cdots, \boldsymbol{d}_n$，关于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 共轭，则它们线性无关。

**注** 线性共轭方向法：

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathrm{R}^n} f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}x$$

1. 初始点 $\boldsymbol{x}_0$，搜索方向 $\boldsymbol{d}_0$ 满足 $\langle \boldsymbol{d}_0, \boldsymbol{g}_0 \rangle < 0$，终止参数 $\varepsilon \geqslant 0$，令 $k = 0$
2. 若 $\|\boldsymbol{g}_k\| \leqslant \varepsilon$，算法终止；否则，进入下一步
3. 计算最优步长 $\alpha = \arg\min\limits_{\alpha \geqslant 0} \{f(\boldsymbol{x}_k + \alpha \boldsymbol{d}_k)\}$，令 $\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{d}_k$
4. 构造 $\boldsymbol{d}_{k+1}$ 使其与 $\boldsymbol{d}_0, \cdots, \boldsymbol{d}_k$ 关于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 共轭，令 $k \leftarrow k + 1$，返回步 2

**定理 8.9 (二次终止性)** 对严格凸二次函数 $\min f(\boldsymbol{x}) = \dfrac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$,向量组 $\boldsymbol{d}_0, \boldsymbol{d}_1, \cdots, \boldsymbol{d}_{n-1}$ 关于 $\boldsymbol{A}$ 共轭。共轭方向发产生点列 $\{\boldsymbol{x}_k\}$。则对任意 $0 \leqslant k \leqslant n-1$，$\boldsymbol{x}_{k+1}$ 是目标函数在仿射集 $\boldsymbol{x}_0 + \operatorname{span}[\boldsymbol{d}_0, \cdots, \boldsymbol{d}_k]$ 上的最小值点，算法至多 $n$ 步迭代后终止。

**例 8.3** 利用共轭梯度法求 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 或者说，利用共轭梯度法求 $\min x_1^2 + \dfrac{1}{2}x_2^2 + \dfrac{1}{2}x_3^2$
★★★★★

其中，

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

**解** 取初始点 $\boldsymbol{x}_0 = (1,1,1)^{\mathrm{T}}$，迭代过程：

1. $\boldsymbol{x}_0 = (1,1,1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{g}_0 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{0} = (2,1,1)^{\mathrm{T}}$，$\beta_{-1} = 0$，$\boldsymbol{d}_0 = -\boldsymbol{g}_0$.

$$\begin{aligned} \alpha &= \arg\min f(\boldsymbol{x}_0 + \alpha \boldsymbol{d}_0) \\ &= (1-2\alpha)^2 + \tfrac{1}{2}(1-\alpha)^2 + \tfrac{1}{2}(1-\alpha)^2 = \tfrac{3}{5} \end{aligned}$$

2. $\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{d}_0 = \frac{1}{5}(-1,2,2)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{g}_0 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{0} = \frac{1}{5}(-1,2,2)^{\mathrm{T}}$，$\beta_0 = \frac{\boldsymbol{g}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}_1}{\boldsymbol{g}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}_0} = \frac{2}{25}$

$$\boldsymbol{d}_1 = -\boldsymbol{g}_1 + \beta_0 \boldsymbol{g}_0 = -\frac{6}{25}(1,-2,-2)^{\mathrm{T}}$$

$$\begin{aligned} \alpha &= \arg\min f(\boldsymbol{x}_0 + \alpha \boldsymbol{d}_0) \\ &= (1-2\alpha)^2 + \tfrac{1}{2}(1-\alpha)^2 + \tfrac{1}{2}(1-\alpha)^2 = \tfrac{3}{5} \end{aligned}$$

3. $\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_1 + \alpha_1 \boldsymbol{d}_1 = \boldsymbol{0}$，$\|\boldsymbol{g}_2\| = 0$，终止。

| $k$ | $\boldsymbol{x}_k$ | $\boldsymbol{g}_k$ | $\beta_{k-1}$ | $\boldsymbol{d}_k$ | $\alpha_k$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | $(1,1,1)^{\mathrm{T}}$ | $(2,1,1)^{\mathrm{T}}$ | 0 | $-(2,1,1)^{\mathrm{T}}$ | $\frac{3}{5}$ |
| 1 | $\frac{1}{5}(-1,2,2)^{\mathrm{T}}$ | $\frac{1}{5}(-2,2,2)^{\mathrm{T}}$ | $\frac{2}{25}$ | $-\frac{6}{25}(1,-2,-2)^{\mathrm{T}}$ | $\frac{5}{6}$ |
| 2 | $(0,0,0)^{\mathrm{T}}$ | $(0,0,0)^{\mathrm{T}}$ | | | |

**定理 8.10 (收敛速度)** 对严格凸二次函数 $f(\boldsymbol{x}) = \dfrac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$. 若系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 $r$ 个相异特征根，则最优步长规则下的共轭梯度法至多 $r$ 步迭代后终止。

# 9 矩阵的特征值和特征向量的计算

## 9.1 特征值理论

**定理 9.1 (Gerschgorin 圆盘定理)** 关于 $\boldsymbol{A}$ 有以下结论

1. 设 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}$，则 $\boldsymbol{A}$ 的每一个特征值必属于下述某个圆盘; $\mid \lambda - a_{ii} \mid\leq r_i = \sum_{j\neq i}\mid a_{ij}\mid (j=1,2,\cdots,n)$
2. 若 $\boldsymbol{A}$ 的 $m$ 圆盘组成并集 $S($ 连通的) 且与余下的 $n-m$ 个圆盘是分离的 (即不相交)，则 S 内恰包含 $m$ 个 $\boldsymbol{A}$ 的特征值。特别，当 S 是由一个圆盘组成且与其他 $n-1$ 个圆盘是分离的 (即为孤立圆盘)，则 S 中精确地包含 $\boldsymbol{A}$ 的一个特征值。

**证明.** 设 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量，那么有

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

取 $\boldsymbol{x}$ 中分量的绝对值最大的一个，设为 $x_i$

$$\begin{aligned}(\lambda-a_{ii})x_i=&\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}a_{ij}x_j\\ \Rightarrow|\lambda-a_{ii}||x_i|=&|\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}a_{ij}||x_j|\\ \Rightarrow|\lambda-a_{ii}|=&|\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}a_{ij}|\left|\frac{x_j}{x_i}\right|<r_i\end{aligned}$$

证毕！

**定理 9.2** 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为对称矩阵，其特征值为 $\lambda_1\geq\lambda_2\geq\cdots\geq\lambda_n$，其对应的特征向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 组成规范化正交组，则

1. $\lambda_n\leq\dfrac{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}\leq\lambda_1\ (\forall\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\boldsymbol{x}\neq0)$
2. $\lambda_1=\max\limits_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}R(\boldsymbol{x})$
3. $\lambda_n=\min\limits_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}R(\boldsymbol{x})$

## 9.2 幂法

### 9.2.1 幂法

一种计算矩阵主特征值 (按模最大特征值) 及其特征向量的迭代法。设 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 有一组线性无关的特征向量组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i=\lambda_i\boldsymbol{x}_i \quad (i=1,2,\cdots,n)$$

其中 $\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n\}$ 线性无关，且满足：$|\lambda_1|>|\lambda_2|\geq\cdots\geq|\lambda_n|$

注 基本思想：任取初始向量 $\boldsymbol{v}_0\in\mathbb{R}^n$ 且 $\boldsymbol{v}_0\neq 0$

$$\begin{cases}\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_0\\ \boldsymbol{v}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{v}_0\\ \vdots\\ \boldsymbol{v}_{k+1}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_k=\boldsymbol{A}^{k+1}\boldsymbol{v}_0\\ \vdots\end{cases}$$

设 $\boldsymbol{v}_0=\sum\limits_{i=1}^n\alpha_i\boldsymbol{x}_i$，$\boldsymbol{v}_k=\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{v}_0=\boldsymbol{A}^k\left(\sum\limits_{i=1}^n\alpha_i\boldsymbol{x}_i\right)=\sum\limits_{i=1}^n\alpha_i\lambda_i^k\boldsymbol{x}_i$, 两边同时除以 $\lambda_1^k$

$$\frac{\boldsymbol{v}_k}{\lambda_1^k}=\alpha_1\boldsymbol{x}_1+\sum_{i=2}^n\alpha_i\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k\boldsymbol{x}_i\approx\alpha_1\boldsymbol{x}_1$$

有

$$\boldsymbol{v}_{k+1}\approx\alpha_1\lambda_1^{k+1}\boldsymbol{x}_1$$
$$\boldsymbol{v}_k\approx\alpha_1\lambda_1^k\boldsymbol{x}_1$$
$$\lim_{k\to\infty}\frac{\boldsymbol{v}_k}{\lambda_1^k}=\alpha_1\boldsymbol{x}_1\qquad\lim_{k\to\infty}\frac{(\boldsymbol{v}_{k+1})_i}{(\boldsymbol{v}_k)_i}=\lambda_1$$

### 9.2.2 改进幂法

设 $\boldsymbol{u}_0=\boldsymbol{v}_0\neq\boldsymbol{0}(\alpha_1\neq 0)$

迭代 $\boldsymbol{v}_k=\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_{k-1}$，$\mu_k=\max(\boldsymbol{v}_k)$，$k=1,2,\cdots$

规范化：$\boldsymbol{u}_k=\boldsymbol{v}_k/\mu_k$

仍然设 $\boldsymbol{v}_0=\sum\limits_{i=1}^n\alpha_i\boldsymbol{x}_i$，那么

$$\boldsymbol{u}_k=\frac{\sum\limits_{i=1}^n\alpha_i\lambda_i^k\boldsymbol{x}_i}{\max\left(\sum\limits_{i=1}^n\alpha_i\lambda_i^k\boldsymbol{x}_i\right)}\overset{\text{同时除以}\lambda_1^k}{=}\frac{\alpha_1\boldsymbol{x}_1+\sum\limits_{i=2}^n\alpha_i(\frac{\lambda_i}{\lambda_1})^k\boldsymbol{x}_i}{\max\left(\alpha_1\boldsymbol{x}_1+\sum\limits_{i=2}^n\alpha_i(\frac{\lambda_i}{\lambda_1})^k\boldsymbol{x}_i\right)}=\frac{\boldsymbol{x}_1}{\max(\boldsymbol{x}_1)},\ k\to\infty$$

同时

$$\mu_k=\max(\boldsymbol{v}_k)=\lambda_1$$

$$
\begin{array}{cc}
\text{迭代序列} & \text{规范化序列} \\
\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_0 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_0 & \boldsymbol{u}_1 = \dfrac{\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_0}{\max(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_0)} \\
\boldsymbol{v}_2 = \dfrac{\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{v}_0}{\max(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_0)} & \boldsymbol{u}_2 = \dfrac{\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{v}_0}{\max(\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{v}_0)} \\
\cdots & \cdots \\
\boldsymbol{v}_k = \dfrac{\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{v}_0}{\max(\boldsymbol{A}^{k-1}\boldsymbol{v}_0)} & \boldsymbol{u}_k = \dfrac{\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{v}_0}{\max(\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{v}_0)}
\end{array}
$$

**定理 9.3 (改进幂法)** 设（1）$A=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 有 $n$ 个线性无关的特征向量；（2）设 $A$ 的特征值满足：$|\lambda_1|>|\lambda_2|\geq\cdots\geq|\lambda_n|$ 且 $Ax_i=\lambda_i x_i\ (i=1,2,\cdots,n)$；（3）$\{u_k\},\{\nu_k\}$ 由改进幂法得到，则有：

1. $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{u}_k=\dfrac{\boldsymbol{x}_1}{\max(\boldsymbol{x}_1)}$
2. $\mu_k=\max(\boldsymbol{v}_k)=\lambda_1$
3. 且收敛速度 $r=\left|\dfrac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|$ 确定。

# 10 2023 春考试题目

**例 10.1** 已知 $f(1)=5, f'(1)=7, f'(0)=1$，试问满足上插值述条件的多项式是否适定？若不适定请说明理由；若适定，则求出该多项式并给出误差估计.★★★★★

**解** 设插值多项式 $p(x)=a_0+a_1x+a_2x^2$ 满足题述条件，那么有

$$
\begin{cases}
a_0+a_1+a_2=5\\
a_1+2a_2=7\\
a_1=1
\end{cases}
$$

解得 $a_0=1,\ a_1=1,\ a_2=3$，方程组有唯一解，插值多项式适定。

设插值误差为 $R(x)$，并做 $\varphi(t)=f(t)-p(t)-W(t)$ 满足 $\varphi(x)=0$，即

$$W(x)=R(x)$$

因为 $R(x)$ 满足 $R(1)=R'(1)=0$，故而设 $W(t)=(mt+n)(t-1)^2$，由 $W'(0)=0$ 可得

$$m(0-1)^2+(m\cdot 0+n)\cdot 2\cdot(0-1)=0$$

解得 $m=2n$

两次利用罗尔定理可得

$$\varphi'''(\xi)=f'''(\xi)-3!m=0$$

解得 $m = \dfrac{f'''(\xi)}{6}$。故而

$$R(x) = \frac{f'''(\xi)}{12}(x-1)^2(2x+1)$$

**例 10.2** 设 $f(x) = 0$ 有单根 $x^*$，$x = \varphi(x)$ 是 $f(x) = 0$ 的等价方程，若 $\varphi(x) = x - m(x)f(x)$，且所有函数都充分光滑。证明：当 $m(x^*) \neq \frac{1}{f'(x^*)}$ 时，$x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 至多是一阶收敛的；当 $m(x^*) = \frac{1}{f'(x^*)}$ 时，$x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 至少是二阶收敛的。★★★★★

**证明.** 由 $x^*$ 是 $f(x) = 0$ 的单根，有

$$f(x^*) = 0,\ f'(x^*) \neq 0$$

由 $\varphi(x) = x - m(x)f(x)$，有

$$\varphi'(x) = 1 - m'(x)f(x) - m(x)f'(x)$$
$$\varphi'(x^*) = 1 - m'(x)^*f(x^*) - m(x^*)f'(x^*) = 1 - m(x^*)f'(x^*)$$

由迭代阶的定理，当 $m(x^*) \neq 1/f'(x^*)$ 时，$\varphi'(x^*) = 1 - m(x^*)f'(x^*) \neq 0$. 此时若 $|\varphi'(x^*)| < 1$，则迭代法 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 一阶收敛；若 $|\varphi'(x^*)| \geq 1$，则迭代法 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 不收敛；故迭代法是最多是一阶收敛的。

$m(x^*) = 1/f'(x^*)$ 时，$\varphi'(x^*) = 1 - m(x^*)f'(x^*) = 0$. 此时则迭代法 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 至少是二阶收敛的.

**例 10.3** 对下列线性代数方程组给出使 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法均收敛的迭代格式，要求分别写出这两个迭代格式，并说明迭代法收敛的理由。★★★★★

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + x_4 = 1 \\ x_1 - x_3 + 5x_4 = 6 \\ x_2 + 4x_3 - x_4 = 8 \\ -x_1 + 3x_2 - x_3 = 3 \end{cases}$$

**解**

$$\left[\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b}\right] = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 5 & 6 \\ 0 & 1 & 4 & -1 & 8 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & 3 \end{bmatrix} \xrightarrow[r_1\times 10 + r_2]{r_2 \leftrightarrow r_4} \begin{bmatrix} 19 & -7 & -1 & 10 & 10 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 4 & -1 & 8 \\ 1 & 0 & -1 & 5 & 6 \end{bmatrix}$$

因其变化后为等价方程组，且严格对角占优，故而 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法均收敛。

Jacobi 迭代格式为：

$$\begin{cases} x_1^{(m+1)} = \frac{1}{19}(7x_2^{(m)} + x_3^{(m)} - 10x_4^{(m)} + 10) \\ x_2^{(m+1)} = \frac{1}{3}(x_1^{(m)} + x_3^{(m)} + 3) \\ x_3^{(m+1)} = \frac{1}{4}(-x_2^{(m)} + x_4^{(m)} + 8) \\ x_4^{(m+1)} = \frac{1}{5}(-x_1^{(m)} + x_3^{(m)} + 6) \end{cases} \qquad (m = 0, 1, 2, \cdots)$$

Gauss-Seidel 迭代格式：

$$\begin{cases} x_1^{(m+1)} = \frac{1}{19}(7x_2^{(m)} + x_3^{(m)} - 10x_4^{(m)} + 10) \\ x_2^{(m+1)} = \frac{1}{3}(x_1^{(m+1)} + x_3^{(m)} + 3) \\ x_3^{(m+1)} = \frac{1}{4}(-x_2^{(m+1)} + x_4^{(m)} + 8) \\ x_4^{(m+1)} = \frac{1}{5}(-x_1^{(m+1)} + x_3^{(m+1)} + 6) \end{cases} \qquad (m = 0, 1, 2, \cdots)$$

**例 10.4** 求 $f(x) = 3x^3 + 2x^2 + x$ 在区间 $[-1, 1]$ 上的 2 次最佳一致逼近多项式。

**解** 切比雪夫多项式为

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_2(x) &= 2x^2 - 1 \\ T_3(x) &= 2xT_2(x) - T_1(x) = 4x^3 - 3x \end{aligned}$$

有

$$\begin{aligned} &\frac{f(x) - p(x)}{3} = \frac{T_3(x)}{4} \\ &\Rightarrow p(x) = 2x^2 + \frac{13}{4}x \end{aligned}$$

**例 10.5** 已知 $f(-1) = 1, f(-0.5) = 4, f(0) = 6, f(0.5) = 9, f(1) = 2$，且 $|\ f^{(4)}(x)\ | \leq M(\forall x \in [-1, 1])$,$M$ 为常数，试估计用复合 Simpson 公式计算积分 $\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x$ 的整体截断误差限.

**解** 因为

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} f(x)dx &= \int_{-1}^{0} f(x)\mathrm{d}x + \int_{0}^{1} f(x)\mathrm{d}x \\ &\approx [\frac{1}{6}f(-1) + \frac{4}{6}f(-0.5) + \frac{1}{6}f(0)] + [\frac{1}{6}f(0) + \frac{4}{6}f(0.5) + \frac{1}{6}f(1)] \\ &\approx \frac{1}{6}[1 + 4 \times 4 + 6 + 6 + 4 \times 9 + 2] = \frac{67}{6} \approx 11.1667 \end{aligned}$$

误差

$$
\begin{aligned}
|I-S_2| &\le \left|\int_{-1}^{0}\frac{f^{(4)}(\xi_1)}{4!}(x+1)(x+0.5)^2(x-0)\mathrm{d}x\right|+\left|\int_{0}^{1}\frac{f^{(4)}(\xi_2)}{4!}(x-0)(x-0.5)^2(x-1)\mathrm{d}x\right| \\
&\le \frac{M}{24}\left[\int_{-1}^{0}\Big|(x+1)(x+0.5)^2(x-0)\Big|\mathrm{d}x+\int_{0}\Big|(x-0)(x-0.5)^2(x-1)\Big|\mathrm{d}x\right] \\
&\le \frac{M}{12}\int_{0}^{1}\Big|(x-0)(x-0.5)^2(x-1)\Big|\mathrm{d}x=\frac{M}{6}\int_{0}^{0.5}t^2(0.25-t^2)\mathrm{d}t=\frac{M}{6}\times 0.0042 \\
&\le 0.008M
\end{aligned}
$$

**例 10.6** 设 $n$ 阶实矩阵 $A$ 的特征值满足：$\lambda_1=\lambda_2,\lambda_1>|\lambda_3|\ge\cdots\ge|\lambda_n|$，试讨论用幂法如何求主特征值，并分析收敛性.

**例 10.7** 设多元函数 $G:D\subset\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n,\forall\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in D_0\subset D$ 都有 $\|G(\boldsymbol{x})-G(\boldsymbol{y})\|\le\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|$，则称 $G$ 在 $D_0$ 为非膨胀映射，若当 $\boldsymbol{x}\ne\boldsymbol{y}$ 时不等式严格成立，则称 $G$ 在 $D_0$ 为严格非膨胀映射.

假定 $G$:$D\subset\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$, 在有界闭集 $D_0\subset D$ 上是严格非膨胀映射，且 $G(D_0)\subset D_0$，证明 $G$ 在 $D_0$ 中有唯一不动点.★★★★★

**证明.** 设 $\varphi(\boldsymbol{x})=\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x})\|$

显然，设 $\varphi(\boldsymbol{x})=\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x})\|$ 在 $D_0$ 上连续，而 $D_0$ 为闭集，故 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 在 $D_0$ 上有最小值，记为 $\varphi(\boldsymbol{x}^*)=\min\limits_{\boldsymbol{x}\in D_0}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x})\|$

若 $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^*)\ne\boldsymbol{x}^*$，则有

$$\varphi(\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^*))=\|\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^*)-\boldsymbol{G}(\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^*))\|<\|\boldsymbol{x}^*-\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^*)\|$$

矛盾！

所以必有 $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^*)=\boldsymbol{x}^*$。