

《计算方法》总结

(2020年)

数学与统计学院 马军



目录

第1章 绪论

(误差分析基础)

第2章 线性代数方程组

第3章 数据近似

} (基本工具)

第4章 数值微积分

第5章 非线性方程求解

第6章 常微分方程数值解法

} (计算方法应用)



第1章 绪论

1. 误差: 近似值与真正值之差

分为模型误差、数据误差、**截断误差**、**舍入误差**

2. 数制表示

实数 x 可以表示以下形式的 β 进制 t 位有效数字

$$x = \pm \left(\frac{d_1}{\beta} + \frac{d_2}{\beta^2} + \cdots + \frac{d_t}{\beta^t} \right) \times \beta^l, 1 \leq d_1 < \beta, 0 \leq d_j < \beta, \quad j = 2, 3, \dots, t$$

浮点数系: 表示为 $F(\beta, t, L, U)$, 个数: $2(\beta - 1)\beta^{t-1}(U - L + 1) + 1$

上溢: $l > U$ 下溢: $l < L$

有效数字: 指一个近似数的有意义的数字的位数

若 $x = \pm 0.d_1 d_2 \cdots d_t \cdots \times 10^l, \tilde{x} = \pm 0.d_1 d_2 \cdots \tilde{d}_t \times 10^l$,

如果 $|x - \tilde{x}| \leq 0.5 \times 10^{l-t}$, 则称 \tilde{x} 有 t 位有效数字



第1章 绪论

3. 舍入误差: 对数进行舍入, 得到有 t 位尾数的浮点数 $fl(x)$

$$\text{舍入误差: } |x - fl(x)| \leq \frac{1}{2} \times \beta^{l-t}$$

$$\text{相对舍入误差: } \delta(x) = \frac{x - fl(x)}{x} \quad |\delta(x)| \leq \frac{1}{2} \beta^{1-t}$$

$$\text{性质: } fl(x \pm y) = (1 - \delta_1)(x \pm y) \quad fl(xy) = (1 - \delta_2)(xy) \quad fl\left(\frac{x}{y}\right) = (1 - \delta_3)\left(\frac{x}{y}\right)$$

浮点运算的四个原则

- (1) 避免产生大结果的运算, 尤其是避免小数作为除数参加运算;
- (2) 避免“大”“小”数相加减;
- (3) 避免相近数相减, 防止大量有效数字损失;
- (4) 尽可能简化运算步骤, 减少运算次数。

第1章 绪论

4. 问题的性态: 问题的解对原始数据扰动的敏感性

良态问题 输入数据相对小的扰动不会引起解的相对大的变化

病态问题 输入数据相对小的扰动引起解的相对大的变化

条件数: 问题解的相对误差与输入数据相对误差的比值 $\left| \frac{f(x) - f(x)}{f(x)} \right| \leq m \left| \frac{x - x}{x} \right|$

对于单参数问题 $f(x)$ $cond(f) \approx \left| x \frac{f'(x)}{f(x)} \right|$

条件数大的问题可称为病态问题, 条件数小的问题可称为良态问题

5. 算法的稳定性

数值稳定: 若初始误差导致最终解的误差能被有效地控制

数值不稳定: 若初始误差导致最终解的误差不能被有效地控制

第1章 绪论

例. $x = 2.718281828\dots$, $x_1 = 2.71828325$, 则 x_1 的有 6 位有效位数

若 $fl(x) = 2.71828225$, 则有 7 位有效位数

例. 已知 $\pi \approx 3.14159265\dots$, 则其近似数 $\pi_1 = 3.14152$ 具有 位有效数字。

例. 在 $F(10, 5, -2, 3)$ 中有多少个数?

例. 使用浮点数系 $F(\beta, t, L, U)$ 可以表示计算机中所有的浮点数, 则个数为

$F(10, 8, -38, +38)$ 中, 能表示的最小的正数是 。

例. 下列各式均与 $\left(\frac{3-\sqrt{8}}{3+\sqrt{8}}\right)^3$ 等价, 在浮点数系 $F(10, 5, -10, 10)$ 中, 哪个公式能获得最准确的结果:

$$(17-6\sqrt{8})^3, \frac{1}{(17+6\sqrt{8})^3}, (3-\sqrt{8})^6, \frac{1}{(3+\sqrt{8})^6}, 19601-6930\sqrt{8}, \frac{1}{19601+6930\sqrt{8}}$$



第1章 绪论

例.为了使计算 $y = 10 + \frac{3}{x-1} + \frac{4}{(x-1)^2} - \frac{6}{(x-1)^3}$ 的乘除法次数尽可能少,应该式如何计算?
(利用秦九绍算法)

例.在浮点数系 $F(10, 4, -10, 10)$ 下,计算 $x^2 - 16x + 1 = 0$ 的两个根,应如何计算才能使精度较高?

例.已知 $\sqrt{896} \approx 29.93$,且方程 $x^2 - 30x + 1 = 0$ 有一个根为 $x_1 = 29.96$,则在 $F(10, 4, -10, 10)$

中计算得到的该方程的另一个根 $x_2 =$ _____。(利用韦达定理 $x_1 x_2 = \frac{c}{a}$)

例.对于函数 $f(x)$ 在某个区间上连续可微,则求 $f(x)$ 的近似条件数

例.从来源来分,误差分为四种,由于将问题简化而引起的误差为_____,由于计算机硬件的性能限制而引起的误差为_____。

例.在计算方法中,主要研究的是_____误差和_____误差。



第1章 绪论

例.准确解与近似解之差称为_____误差,而当把数据输入到计算机中时由于计算机硬件的性能限制而产生的误差称为_____误差。

例.在浮点数系当 $F(10, 5, -5, 5)$ 中, 共有_____个正数, 最小的正数是_____;

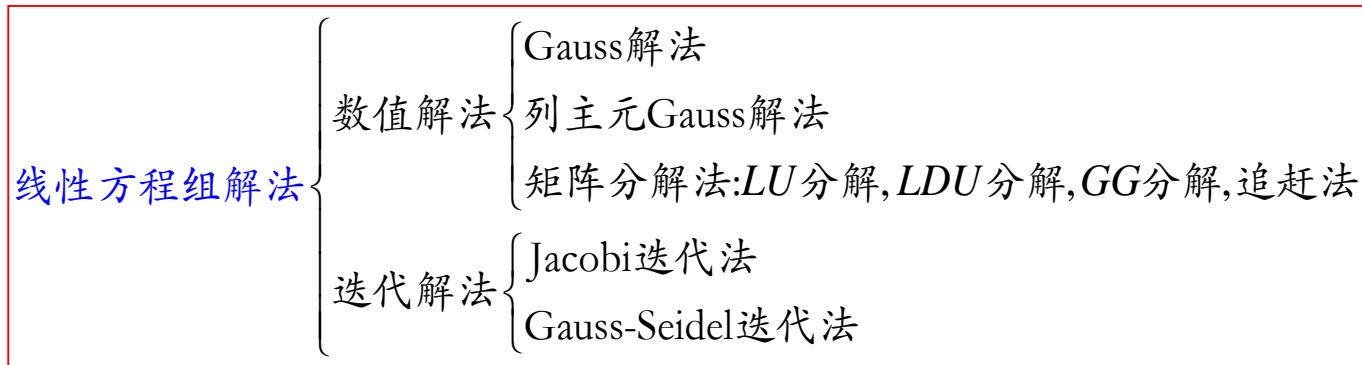
若 $\sqrt{3} \approx 1.73205080756\dots$ 则 $\text{fl}(\sqrt{3}) = ______$, 则其相对舍入误差 $|\delta(x)| = ______$

例.当 $x \gg 1$ 时, 为了使计算结果更加准确, 公式 $\sqrt{x+1} - \sqrt{x}$ 如何变形计算

例.改写下列算式使结果更加准确

$$\frac{1}{1 \times 3} + \frac{1}{2 \times 4} + \frac{1}{3 \times 5} + \cdots + \frac{1}{99 \times 101}$$

第2章 线性代数方程组



Gauss消去法: 消去的时间复杂度 $o(n^3)$, 回代: $o(n^2)$

列主元Gauss消去法: 消去的时间复杂度 $o(n^3)$, 回代: $o(n^2)$

LU 分解: L : 单位下三角阵, U : 上三角阵, 时间复杂度 $o(n^3)$

LDU 分解: L : 单位下三角阵, D : 对角阵, U : 单位上三角阵, 时间复杂度 $o(\frac{n^3}{3})$

GG 分解: 针对对称正定矩阵, $o(n^3 / 6)$, 加 n 个开方运算

带状矩阵分解: 三对角阵分解, 追赶法

第2章 线性代数方程组

范数:向量/矩阵范数的定义、性质、向量与矩阵范数的相容性、等价性、计算 (P53-55)

方程组的条件数: $m = \text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$ (P58)

(1) 当右端向量有扰动 Δb , 则有
$$\frac{\|x - x^*\|}{\|x^*\|} \leq (\|A\| \cdot \|A^{-1}\|) \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$$

(2) 当系数矩阵有扰动 ΔA , 则有
$$\frac{\|x^* - \tilde{x}\|}{\|x^*\|} \leq \left[\text{Cond}(A) \frac{\|\tilde{x}\|}{\|x^*\|} \right] \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}$$

(3) 当系数矩阵有扰动 ΔA , 右端向量有扰动 Δb , 则有

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \frac{k}{1 - k \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} \left(\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \right) \quad \text{其中 } k = \text{cond}(A) = \|A^{-1}\| \|A\|$$

第2章 线性代数方程组

迭代算法: 构造 $x^{(k+1)} = Gx^{(k)} + d$

$$\text{Jacobi: } \begin{cases} G = D^{-1}(E + F) = I - D^{-1}A \\ d = D^{-1}b \end{cases} \quad (\text{P67}) \qquad \text{Gauss-Seidel: } \begin{cases} G = (D - E)^{-1}F \\ d = (D - E)^{-1}b \end{cases} \quad (\text{P68})$$

收敛性判定定理

TH2.6 $\|G\| < 1$, 则迭代格式收敛 (P68)

TH2.7 A 为严格对角占优, *Jacobi* 格式收敛 (P69)

TH2.8 A 为严格对角占优, *Gauss - Seidel* 格式收敛 (P70)

TH2.9 A 对称正定, *Gauss - Seidel* 收敛; $2D - A$ 对称正定, *Jacobi* 收敛 (P71)

TH2.10 迭代格式 $x^{(k+1)} = Gx^{(k)} + d$ 收敛的充要条件为 $\rho(G) < 1$ 充要条件(P72)

TH2.11 迭代格式的误差估计 (P72)

第2章 线性代数方程组

例: 矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & & \\ \frac{1}{3} & 0 & 1 & \\ \frac{1}{4} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, 则 $A^{-1} = \underline{\hspace{2cm}}$, $\|A\|_1 = \underline{\hspace{2cm}}$, $\|A\|_\infty = \underline{\hspace{2cm}}$ P36, P37

例: 若矩阵 $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & \\ 1 & 2 & a \\ & a & 1 \end{pmatrix}$ 可以分解为 GG^T 的形式, 其中 G 为下三角阵, 且对角元均为正, 问 a 的取值范围,

并请按此要求将此 a 分解

例. 已知 $\vec{x} = (1 \ 2 \ 3 \ 4)^T$, 则 $\|\vec{x}\|_1 = \underline{\hspace{2cm}}$, $\|\vec{x}\|_2 = \underline{\hspace{2cm}}$, $\|\vec{x}\|_\infty = \underline{\hspace{2cm}}$ 。



第2章 线性代数方程组

例: 设 $x = (x_1, x_2, x_3)^T$, 则 $|x_1| + |2x_2| + |3x_3|$ 是否是范数, $|x_1 - 2x_2| + |3x_3|$ 是否是范数

要证明是否是范数, 应验证是否满足范数的三个条件. (P79, 14题)

要否定一个范数, 只需要举一个反例

例: 考查方程组
$$\begin{cases} 5x_1 - 2x_2 + x_3 = 10 \\ -2x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 25 \\ 2x_1 + 4x_2 + 6x_3 = -5 \end{cases}$$
 的 *Jacobi* 迭代格式, *Gauss-Seidel* 格式的收敛性.

例: 求解线性方程组 $Ax = b$ 的迭代格式 $x^{(k+1)} = Gx^{(k)} + d$, 对于任何初值 $x^{(0)}$ 都收敛的充要条件是 _____, 充分但不必要的条件是 _____; 若 A 为对称正定矩阵时, 则相应的 _____ 迭代格式对于任何初值 $x^{(0)}$ 都收敛; 该方程组在 1-范数下的条件数为 $\text{cond}_1(A) = \underline{\hspace{2cm}}$.



第2章 线性代数方程组

例:已知方程组 $\begin{cases} 3x_1 + 2x_2 = 5 \\ -2x_1 + x_2 = 1 \end{cases}$, 则对其系数矩阵 A , 有 $\|A\|_1 = \underline{\hspace{2cm}}$, 并且 A 的条件数 $cond_{\infty}(A) = \underline{\hspace{2cm}}$, 当此数较大时, 该方程组称为 $\underline{\hspace{2cm}}$ 。

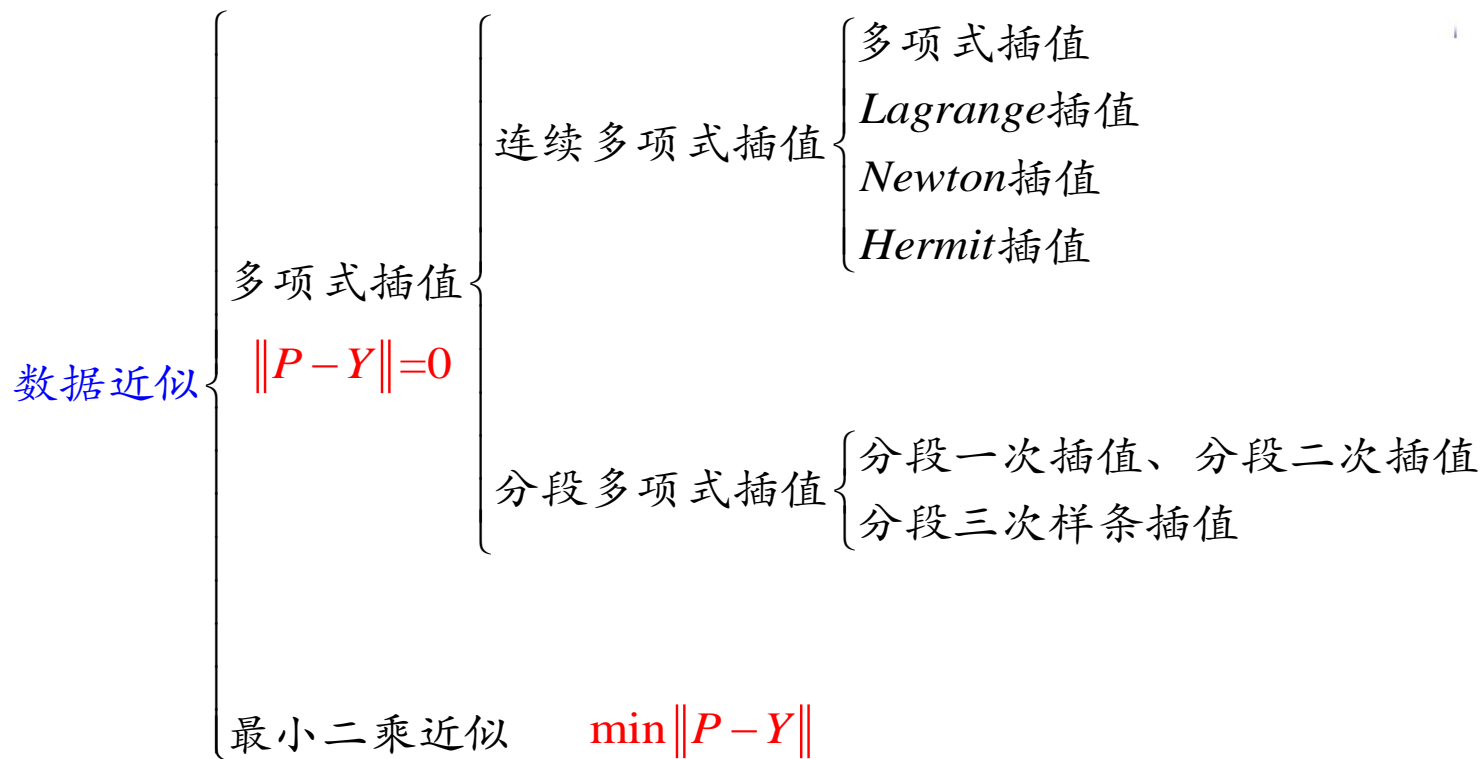
例: 矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$, 则有 $\|A\|_1 = \underline{\hspace{2cm}}$, $cond_{\infty}(A) = \underline{\hspace{2cm}}$ 。

例. 针对方程组 $\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 3 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 2 \\ x_1 + x_2 - 2x_3 = -1 \end{cases}$, 给出雅可比迭代格式和高斯-赛德尔迭代格式,

并讨论针对任意初始向量它们是否收敛。(6分)



第3章 数据近似



第3章 数据近似

TH 3.1 经过给定插值点的插值多项式唯一

多项式插值 $P_n(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$

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

$$l_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

$$= \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)} \quad \omega(x) = \prod_{i=0}^n (x-x_i)$$

性质: $l_i(x_i) = 1$ $l_i(x_j) = 0$ $\sum_{i=0}^n l_i(x) = 1$



第3章 数据近似

*Newton*插值
$$N_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i Q_i(x) \quad c_i = y[x_0, x_1, \dots, x_i] \quad Q_i(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_i)$$

$$\begin{aligned} N_n(x) &= y[x_0] + y[x_0, x_1](x-x_0) + y[x_0, x_1, x_2](x-x_0)(x-x_1) + \cdots + y[x_0, x_1, x_2, \dots, x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \\ &= N_{n-1}(x) + c_n Q_n(x) \\ &= N_{n-1}(x) + y[x_0, x_1, x_2, \dots, x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \end{aligned}$$

差商计算公式
$$y[x_0, x_1, x_2, \dots, x_n] = \frac{y[x_0, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}] - y[x_1, x_2, \dots, x_n]}{x_0 - x_n}$$

性质1 对称性

性质2
$$y[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] = \frac{y^{(k)}(\xi)}{k!}, \xi \in [x_i, x_{i+k}]$$

第3章 数据近似

Hermit插值 带导数条件的插值多项式

利用差商性质2,使用Newton插值多项式的思想进行构造重节点, 将高阶导数转化为高阶差商, 然后利用差商表计算

$$y[\underbrace{x_i, x_i, \dots, x_i}_{k+1\text{个}}] = \frac{y^{(k)}(x_i)}{k!}$$

插值多项式的误差 (P97)

$$\begin{aligned} TH \ 3.2 \quad R_n(x) &= y(x) - P_n(x) = \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega(x) \quad \xi \in [x_0, x_n] \\ &= y[x_0, x_1, \dots, x_n, x] \omega(x) \end{aligned}$$

插值多项式 $f(x) = p_n(x) + R_n(x)$

第3章 数据近似

分段插值多项式

分段一次多项式的误差

$$TH3.3 \quad E(g_1) \leq \frac{1}{8} M_2 \Delta^2 \quad M_2 = \max_{a \leq x \leq b} |y''(x)| \quad \Delta = \max_i |x_i - x_{i-1}|$$

分段二次多项式的误差

$$TH3.4 \quad E(g_2) \leq \frac{1}{12} M_3 \Delta^3 \quad M_3 = \max_{a \leq x \leq b} |y'''(x)| \quad \Delta = \max_i |x_i - x_{i-1}|$$

优点：计算简单，误差较小
缺点：中间节点处不光滑

分段三次样条插值多项式的误差

$$TH3.5 \quad |y(x) - s(x)| \leq \frac{1}{2} M_2 \Delta^2 \quad M_2 = \max_{a \leq x \leq b} |y''(x)| \quad \Delta = \max_i |x_i - x_{i-1}|$$

优点：曲线光滑 缺点：求解计算量大

第3章 数据近似

最小二乘法

给定数据点 $\{(x_i, y_i)\} (i=1, 2, \dots, m)$ 和一组函数 $g_k(x) (k=1, 2, \dots, n)$, 求系数 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$, (假定 $m > n$), 使函数

$$p(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \dots + \alpha_n g_n(x)$$

满足 $E_2 = \left(\sum_{i=1}^m (p(x_i) - y_i)^2 \right)^{1/2}$ 达到最小

构造 $G = \begin{pmatrix} g_1(x_1) & g_2(x_1) & \cdots & g_n(x_1) \\ g_1(x_2) & g_2(x_2) & \cdots & g_n(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ g_1(x_m) & g_2(x_m) & \cdots & g_n(x_m) \end{pmatrix}$ 形成法方程 $G^T G a = G^T y$

由于法方程一般为病态方程组，一般使用QR分解来求其解得到比较准确的解

QR分解 $QG = \begin{pmatrix} R \\ O \end{pmatrix} \Rightarrow G = Q^T \begin{pmatrix} R \\ O \end{pmatrix}$ 法方程变为 $Rx = h_1$ $E_2^2 = \|h_2\|_2^2$



第3章 数据近似

例.已知有以下互异的点 x_1, x_2, \dots, x_n , 则 $l_i(x) = \underline{\hspace{2cm}}$, $l_i(x)l_j(x) = \underline{\hspace{2cm}}$

例.已知 $f(x) = 2015x^5 + x^2 + 9$, 则其5阶差商 $f[5^0, 5^1, 5^2, 5^3, 5^4, 5^5] = \underline{\hspace{2cm}}$.

例.已知 $f(x) = x^3 + 3x^2 + 5$, 则差商 $f[0, -2] = \underline{\hspace{2cm}}$; 若差商 $f[0, m, n] = 2.5$, 则 $f[-2, m, n] = \underline{\hspace{2cm}}$,
 $f[0, m, n, -2] = \underline{\hspace{2cm}}$ (m, n 为任意常数)

例.已知 $f(x) = x^4 - 2017x^3 + 2018x^2 + 2019x + m$, 则差商 $f[0, 1, 2, 3, 4] = \underline{\hspace{2cm}}$, $f[0, 1, 2, 3, 4, 5] = \underline{\hspace{2cm}}$;
 若差商 $f[0, 1, 2, 3] = 2017$, 则 $f[1, 2, 3, 4] = \underline{\hspace{2cm}}$.

例.设 $f(x) = 2009x^5 + 2007x^3 + 2006x + 2005$, 则以 $-2, -1, 0, 1, 2$ 为插值节点的不超过四次的插值多项式 $L_4(x) = \underline{\hspace{2cm}}$

第3章 数据近似

例.求不超过三次的多项式 $p(x)$,满足条件 $p(x_i) = f(x_i), p'(x_i) = f'(x_i)$,若 $|f^{(4)}(x)| \leq 1, \forall x \in [1, 2]$,求 $p(x)$ 的误差界

x	1	2
$f(x)$	1	3
$f'(x)$	1	-1

例.已知下列函数信息,试估算 $f(0.5)$ 的值,并估计其误差

x	-1	0	1
$f(x)$	0.5	0	-1
$f'(x)$	1		

(假定对于 $x \in [-1, 1], |f'(x)| \leq 4, |f''(x)| \leq 3, |f'''(x)| \leq 2, |f^{(4)}(x)| \leq 1$)

例.设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 区间上有三阶连续导数, $x_0, x_1 \in [a, b]$,有相应的插值多项式

$$p(x) = -\frac{(x-x_1)(x-2x_0+x_1)}{(x_0-x_1)^2} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{x_0-x_1} f'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{(x_0-x_1)^2} f(x_1)$$

试求此插值多项式的余项 $R(x) = f(x) - p(x)$ 的表达式

第3章 数据近似

例. 已知有以下在 $[0,2]$ 上的三次样条插值函数, 试确定其中的系数 a, b, c

$$S(x) = \begin{cases} x^3 & 0 \leq x \leq 1 \\ ax^3 + b(x-1)^2 + c(x-1) + 2 & 1 \leq x \leq 2 \end{cases}$$

7. 已知函数 $f(x)$ 在节点 $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ 上有 n 次插值多项式 $L_n(x)$, 证明: 对于

$$\forall x \in (x_0, x_n) \text{ 有 } R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \sum_{i=0}^n [f(x) - f(x_i)] \cdot l_i(x) \quad (4 \text{ 分})$$

例. 设 $f(x) = \frac{x}{x+1}$, 取 $x_k = 0, 1, 2, \dots, n$, 以 $\{(x_k, f(x_k))\}$ 为插值数据点做插值多项式 $p_n(x)$,

则 $p_n(x)$ 满足 $p_n(x_k) = f(x_k) = \frac{x_k}{x_k + 1}$, 试求 $p_n(n+1)$

例证明: 当 x_0, x_1, \dots, x_n 互异时, 下式成立

$$\frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\cdots(x_0-x_n)} = 1 + \frac{x-x_0}{x_0-x_1} + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + \cdots + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\cdots(x_0-x_n)}$$

第3章 数据近似

例. 设节点 x_0, x_1, \dots, x_n 互异, 试证明 $f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \sum_{i=0}^n \frac{f(x_i)}{\omega'(x_i)}$ (TH3.1的应用)

解: 由节点 x_0, x_1, \dots, x_n 互异, 则 *Lagrange* 插值多项式为

$$L(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x) f(x_i) = \sum_{i=0}^n \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)} f(x_i) = \sum_{i=0}^n \frac{\omega(x)}{(x-x_i)} \frac{f(x_i)}{\omega'(x_i)}$$

因此, 该多项式最高项的系数为: $\sum_{i=0}^n \frac{f(x_i)}{\omega'(x_i)}$

另一方面, 由节点 x_0, x_1, \dots, x_n , 形成的 *Newton* 插值多项式为

$$\begin{aligned} N(x) = & y_0 + y[x_0, x_1](x-x_0) + y[x_0, x_1, x_2](x-x_0)(x-x_1) + \dots \\ & + y[x_0, x_1, \dots, x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \end{aligned}$$

该多项式最高项的系数为: $y[x_0, x_1, \dots, x_n]$

因此得证

第3章 数据近似

例. 设 x_i ($i = 0, 1, \dots, n$) 为互异实数, 试证明 $\sum_{i=0}^n l_i(0) x_i^{n+1} = (-1)^n x_0 x_1 \cdots x_n$

其中 $l_i(x)$ 为 Lagrange 插值多项式

证明: 构造 lagrange 插值多项式, 有 $f(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x) f(x_i) + R_n(x)$

$$\text{取 } f(x) = x^{n+1}, f(0) = 0 = \sum_{i=0}^n l_i(0) x_i^{n+1} + R_n(0)$$

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

$$R_n(0) = (-1)^{n+1} x_0 x_1 \cdots x_n \quad \text{得证}$$

例. 给定以下的数据点, 利用插值多项式, 计算 $f(x)$ 在 2 到 3 之间的根的最接近的近似值

x	1	2	3	4
$f(x)$	-1.5	-0.2	0.3	0.7

第3章 数据近似

例. 针对以下已知函数 $f(x)$ 的测试数据, 求形如 $p(x) = A \sin x + B \cos x$ 最小二乘近似

x	$-\frac{\pi}{4}$	$-\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$
$f(x)$	-1.06	-0.567	1.43	1.77

解: 令 $g_1(x) = \sin x$, $g_2(x) = \cos x$

$$G = \begin{pmatrix} -0.707 & 0.707 \\ -0.5 & 0.866 \\ 0.5 & 0.866 \\ 0.707 & 0.707 \end{pmatrix} \quad y = \begin{pmatrix} -1.06 \\ -0.567 \\ 1.43 \\ 1.77 \end{pmatrix}, \text{得法方程}$$

$$\begin{pmatrix} -0.707 & -0.500 & .500 & .707 \\ .707 & .866 & .866 & .707 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.707 & 0.707 \\ -0.5 & 0.866 \\ 0.5 & 0.866 \\ 0.707 & 0.707 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.707 & -0.500 & .500 & .707 \\ .707 & .866 & .866 & .707 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1.06 \\ -0.567 \\ 1.43 \\ 1.77 \end{pmatrix}$$

第3章 数据近似

即 $\begin{pmatrix} 1.50 & 0 \\ 0 & 2.50 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1.25 \end{pmatrix}$ 解得 $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.00 \\ .500 \end{pmatrix}$ 因此 $f(x) = 2 \sin x + 0.5 \cos x$

例.已知函数 $f(x)$ 有以下测试数据

x	0	1.445	2.890	4.335	5.780
y	1.8419	2.9633	18.236	98.7410	529.2178

求形如 $p(x) = \alpha e^{\beta x}$ 的最小二乘近似函数

解:对 $p(x)$ 两边求对数,有 $\ln p(x) = \ln \alpha + \beta x$

令 $f(x) = \ln p(x)$, $A = \ln \alpha$, $B = \beta$,则最小二乘函数变为 $f(x) = A + Bx$

相应的数据

x	0	1.445	2.890	4.335	5.780
$\ln y$	0.6107	1.0863	2.9034	4.5925	6.2714

第4章 数值微积分

数值积分	等距结点	Newton - Cotes公式	梯形公式 ($m = 1$)	P135.4-7 Th4.1
			Simpson公式($m = 3$)	P136.4-8 Th4.2
			Cotes公式 ($m = 5$)	P136.4-9 Th4.3
		复化求积公式	复化梯形公式 (二阶)	P140.4-13 Th4.4
			复化Simpson公式(四阶)	P140.4-14 Th4.5
			复化Cotes公式 (六阶)	P140.4-15 Th4.6
	不等距结点:Gauss型求积公式,利用正交多项式进行构造			
	Th 4.9(构造方法) TH 4.11 TH4.12			
	4-39计算系数 4-40计算误差			
	Romberg积分:利用低精度的求积公式,构造高精度的公式			
待定系数法:利用代数精度的定义求得最高代数精度的求积公式				

第4章 数值微积分

数值微分	两点公式	$\begin{cases} f'(x_0) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] + \frac{1}{2}f''(\xi)(x_0 - x_1) \\ f'(x_1) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] - \frac{1}{2}f''(\xi)(x_1 - x_0) \end{cases} \quad (\text{P178})$		
	三点公式	一阶导数公式	$\begin{cases} f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi) \\ f'(x_1) = \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi) \\ f'(x_2) = \frac{1}{2h}[f(x_0) + 4f(x_1) + 3f(x_2)] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi) \end{cases} \quad (\text{P179})$	
		二阶导数公式	$\begin{cases} f''(x_0) = \frac{1}{h^2}[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)] - hf'''(\xi_1) + \frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_2) \\ f''(x_1) = \frac{1}{h^2}[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi) \\ f''(x_2) = \frac{1}{h^2}[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)] + hf'''(\xi_1) + \frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_2) \end{cases} \quad (\text{P180})$	

待定系数法:利用Taylor公式可求得最高计算精度的微分公式

第4章 数值微积分

例.试导出中矩形公式,并给出其误差公式 $\int_a^b f(x)dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$

例.确定以下公式中的系数,使其具有尽可能高的代数精度

$$(1) \int_0^{2h} f(x)dx \approx A_0 f(0) + A_1 f(h) + A_2 f(2h)$$

$$(2) \int_{-1}^1 f(x)dx \approx A_1 f\left(-\frac{1}{2}\right) + A_2 f(0) + A_3 f\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$(3) \int_{-1}^1 f(x)dx \approx A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$$

例.按照复化Simpson公式计算 $\int_0^1 f(x)dx$ 的数值微分值为 $S_1 = 0.45675, S_2 = 0.47117, S_4 = 0.47446, S_8 = 0.47612$,则 S_8 的误差近似为_____

例.确定如下的数值微分公式的系数,使其对尽可能高次的多项式精确成立

$$f''(x_0) \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_0 + h) + A_2 f(x_0 + 2h)$$

并给出误差表达式

第4章 数值微积分

例. 设 $\{\varphi_k(x)\}$ 是定义在区间 $[a, b]$ 上的关于权函数 $\rho(x)$ 的正交多项式族,

并且 $x_i (i = 0, 1, 2, \dots, n)$ 是 $\varphi_{n+1}(x)$ 的零点,

$l_i(x)$ 是以 $\{x_i\}$ 为插值点的 *Lagrange* 插值基函数.

$\int_a^b \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ 是高斯型求积公式.

证明:

$$(1) \quad \text{当 } 0 \leq k, j \leq n, k \neq j \text{ 时, } \sum_{i=0}^n A_i \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i) = 0$$

$$(2) \quad \int_a^b \rho(x) l_k(x) l_j(x) dx = 0, k \neq j$$

$$(3) \quad \sum_{k=0}^n \int_a^b \rho(x) l_k^2(x) dx = \int_a^b \rho(x) dx$$



第4章 数值微积分

例. 在区间 $[0,1]$ 上, 以权函数 $\rho(x) = x$, 并且最高次项系数为1的正交多项式族 $\{\varphi_k(x)\}$,

若 $\varphi_{-1}(x) = 0, \varphi_0(x) = 1$, 则 $\varphi_1(x) = \underline{\hspace{2cm}}$, $\int_0^1 x \varphi_5(x) dx = \underline{\hspace{2cm}}$

例. 已知数值积分公式 $\int_0^h f(x) dx \approx \frac{h}{2} [f(0) + f(h)] + \lambda h^2 [f'(0) - f'(h)]$, 试确定积分

公式中的参数 λ , 使其具有尽可能高的代数精度, 并求出该公式的代数精度, 以及相应的误差公式

第5章 非线性方程求解

$$\text{非线性方程求解} \left\{ \begin{array}{l} \text{迭代法} \left\{ \begin{array}{l} \text{简单迭代法 } x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}) \\ \text{Newton迭代法 } x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})} \\ \text{割线法 } x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{x^{(k)} - x^{(k-1)}}{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})} f(x^{(k)}) \end{array} \right. \\ \text{区间法:二分法} \end{array} \right.$$

简单迭代法的收敛性

$$\text{TH 5.1} \quad (1) \forall x \in [a, b], \varphi(x) \in [a, b] \quad (2) \quad |\varphi(x) - \varphi(y)| \leq q|x - y| \quad 0 < q < 1$$

$$\text{TH 5.2} \quad |\varphi'(x)| \leq s < 1$$

收敛性的改善

$$\text{取 } \lambda \approx \varphi'(x^*), \text{ 构造 } \psi(x) = \frac{1}{1 - \lambda} [\varphi(x) - \lambda x]$$

第5章 非线性方程求解

Newton迭代格式的收敛性

TH 5.4 (1) $f(a)f(b) < 0$

(2) $f'(x)$ 不变号, 且 $f'(x) \neq 0$

(3) $f''(x)$ 不变号

(4) $f(x_0)f''(x_0) > 0$

区间法 使用区间套的方法求解方程的根

收敛速度

若 $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|x^{(k+1)} - x^*|}{|x^{(k)} - x^*|^p} = \lambda \neq 0$, 则称收敛速度为 p 阶收敛

简单迭代格式的收敛速度为线性收敛, Newton迭代格式一般为二阶收敛

区间方法的收敛速度一般为线性收敛

第5章 非线性方程求解

例. 方程 $x^3 - x^2 - 1 = 0$ 在 1.5 附近有根 x^* , 讨论迭代格式 $x^{(k+1)} = 1 + 1/(x^{(k)})^2$ 的收敛性

解: (1) $\varphi(x) = 1 + 1/x^2$, $\varphi'(x) = -2x^{-3}$

取区间 $[1.4, 1.58]$ $\varphi(1.4) = 1.51, \varphi(1.58) = 1.41$

在此区间上 $\varphi'(x) < 0$ 则 $\varphi(x)$ 单调减

$$\varphi''(x) = \frac{6}{x^4} > 0 \quad \varphi'(1.4) = -0.7288, \varphi'(1.58) = -0.5071$$

可知 $|\varphi'(x)| < 1$ 迭代格式收敛

(2) 改善迭代格式取 $\lambda = \varphi'(1.5) = -0.59259$

$$\text{构造 } \psi(x) = \frac{1}{1-\lambda} [\varphi(x) - \lambda x] = \frac{1}{1+0.59259} \left[1 + \frac{1}{x^2} + 0.59259x \right]$$

迭代格式收敛

第6章 常微分方程数值解法

$$\text{初值问题} \quad \begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) \\ y(a) = y_0 \end{cases} \quad t \in [a, b]$$

1. 数值微分法 思想：使用数值微公式将一阶导数进行数值化处理

$$\text{Euler公式} \quad y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i) \quad E(t_i, h) = \frac{h^2}{2} y''(\xi_i) = o(h^2)$$

$$\text{后退Euler公式} \quad y_{i+1} = y_i + hf(t_{i+1}, y_{i+1}) \quad E(t_i, h) = \frac{h^2}{2} y''(\xi_i) = o(h^2)$$

2. 数值积分法 思想：使用数值积分公式求得原函数

$$y'(t) = f(t, y(t)) \Rightarrow \int_{t_i}^{t_{i+1}} y'(t) dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt \Rightarrow y(t_i) - y(t_{i+1}) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt \Rightarrow y_{i+1} = y_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt$$

$$\text{梯形公式} \quad y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1})] \quad E(t_i, h) = -\frac{h^3}{12} y'''(\xi_i) = o(h^3)$$

$$\text{Simpson公式} \quad y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} [f(t_{i-1}, y_{i-1}) + 4f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1})] \quad E(t_i, h) = -\frac{h^5}{90} y^{(5)}(\xi_i) = o(h^5)$$

第6章 常微分方程数值解法

3. Adams公式 思想：使用高精度的插值公式试图得到单步法公式

显式公式 $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{A} [b_0 f_i + b_1 f_{i-1} + \cdots + b_k f_{i-k}] \quad E(t_i, h) = rh^{k+2} y^{(k+2)}(\xi_i)$

k+1个点形成的k+1阶精度的公式

隐式公式 $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{A} [b_0^* f_{i+1} + b_1^* f_i + \cdots + b_k^* f_{i-k+1}] \quad E(t_i, h) = r^* h^{k+2} y^{(k+2)}(\xi_i)$

k个点形成的k+1阶精度的公式

4. 待定系数法 统一公式 $y_{i+1} = \sum_{j=1}^k \alpha_j y_{i+1-j} + h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{i+1-j}$

当 $k=1$ 时为单步法

当 $k>1$ 时为多步法

当 $\beta_0=0$ 时为显式公式

当 $\beta_0 \neq 0$ 时为隐式公式

两步三阶公式 $k=2 \quad y_{i+1} = a_1 y_i + a_2 y_{i-1} + h(\beta_0 f_{i+1} + \beta_1 f_i + \beta_2 f_{i-1})$

第6章 常微分方程数值解法

5. 稳定性、稳定域

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{i-j} + h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{i+1-j} = 0$$

$$\text{特征方程 } \sum_{j=0}^k \alpha_j \xi^{k-j} + h \sum_{j=0}^k \beta_j \xi^{k-j} = 0$$

各种算法的特征多项式

*Euler*方法

$$\pi(\xi, \bar{h}) = \xi - 1 - \bar{h}$$

后退*Euler*方法

$$\pi(\xi, \bar{h}) = \xi - 1 - \bar{h} \xi$$

中点方法

$$\pi(\xi, \bar{h}) = \xi^2 - 1 - 2\bar{h} \xi$$

梯形方法

$$\pi(\xi, \bar{h}) = \xi - 1 - \frac{\bar{h}}{2}(\xi + 1)$$

Simpson方法

$$\pi(\xi, \bar{h}) = \xi^2 - 1 - \frac{\bar{h}}{3}(\xi^2 + 4\xi + 1)$$

稳定域

使特征方程的全部根满足 $|\xi_i| < 1$ 的 \bar{h} 的全体的集合

第6章 常微分方程数值解法

6. 预估—校正方法

思想: 结合显式公式和隐式公式的优点, 利用显式公式作预估公式, 隐式公式作校正公式, 使计算更方便, 精度更高

(1) 利用两个同阶公式, 相同步长

$$y(t_{i+1}) - y_{i+1} = \alpha h^{p+1} y^{(p+1)}(\xi_1) \quad y(t_{i+1}) - \bar{y}_{i+1} = \beta h^{p+1} y^{(p+1)}(\xi_2)$$

$$\therefore y(t_{i+1}) - y_{i+1} \approx \frac{\alpha}{\alpha - \beta} (\bar{y}_{i+1} - y_{i+1})$$

(2) 利用两个不同阶公式, 相同步长

$$y(t_{i+1}) - y_{i+1} \approx \bar{y}_{i+1} - y_{i+1}$$

(3) 利用同一个公式, 不同的步长 h 和 \bar{h} 计算

$$y(t_{i+1}) - y_{i+1} \approx (\bar{y}_{i+1} - y_{i+1}) / \left[1 - (\bar{h} / h)^{p+1} \right]$$



第6章 常微分方程数值解法

$$\text{Heun 方法} \begin{cases} \text{预估: } p_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i) \\ \text{校正: } y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, p_{i+1})] \end{cases}$$

$$(A-B-M4) \begin{cases} p_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (-9f_{i-3} + 37f_{i-2} - 59f_{i-1} + 55f_i) \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (f_{i-2} - 5f_{i-1} + 19f_i + 9f(t_{i+1}, p_{i+1})) \end{cases}$$

$$\text{Milne-Simpson} \begin{cases} p_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4h}{3} (2f_{i-2} - f_{i-1} + 2f_i) \\ y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} (f_{i-1} + 4f_i + f(t_{i+1}, p_{i+1})) \end{cases}$$

第6章 常微分方程数值解法

Milne-Simpson预估修正校正

$$\begin{cases} p_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4h}{3}(2f_{i-2} - f_{i-1} + 2f_i) \\ m_{i+1} = p_{i+1} + \frac{28}{29}(y_i - p_i) \\ y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3}[f_{i-1} + 4f_i + f(t_{i+1}, m_{i+1})] \end{cases}$$

修正Hamming预估-校正公式：

$$\begin{cases} p_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4h}{3}(2f_{i-2} - f_{i-1} + 2f_i) \\ m_{i+1} = p_{i+1} + \frac{112}{121}(y_i - p_i) \\ c_{i+1} = \frac{1}{8}(9y_i - y_{i-2}) + \frac{3}{8}h[-f_{i-1} + 2f_i + f(t_{i+1}, m_{i+1})] \\ y_{i+1} = c_{i+1} - \frac{9}{121}(c_{i+1} - p_{i+1}) \end{cases}$$

第6章 常微分方程数值解法

7. Runge—Kutta 方法

思想: 在 $[t_i, t_{i+1}]$ 之间选取一些点处的函数值, 经过适当组合, 得到 $y(t_{i+1})$ 某种精度的近似, 得到高精度的单步法公式, 计算出适合于多步法的表头元素

m 级 Runge—Kutta 方法公式

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2 + \cdots + \lambda_m K_m \\ K_1 = hf(t_i, y_i) \\ K_2 = hf(t_i + \alpha_2 h, y_i + \beta_{21} K_1) \\ \dots \\ K_m = hf(t_i + \alpha_m h, y_i + \beta_{m1} K_1 + \cdots + \beta_{m, m-1} K_{m-1}) \end{cases}$$

变形 Euler 公式

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + K_2 \\ K_1 = hf(t_i, y_i) \\ K_2 = hf(t_i + h/2, y_i + K_1/2) \end{cases}$$

四阶四级 Runge—Kutta 公式

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = hf(t_i, y_i) \\ K_2 = hf(t_i + h/2, y_i + K_1/2) \\ K_3 = hf(t_i + h/2, y_i + K_2/2) \\ K_4 = hf(t_i + h, y_i + K_3) \end{cases}$$



第6章 常微分方程数值解法

例.对于常微分方程的初值问题, $y'(t) = f(t, y(t)), a \leq t \leq b, y(a) = y_0$, 则辛普生公式为_____, 局部截断误差是_____。

例.通过典型方程 $y'(t) = \lambda y(t), y(a) = y_0, a \leq t \leq b$, 判断梯形方法的绝对稳定域时的特征多项式是_____, 使用Simpson方法时的特征多项式为_____, 其绝对稳定域为满足的条件为_____。

例.对常微分方程
$$\begin{cases} y' = t + y^2 \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad t \in [0, 1],$$
 使用改进Euler方法形式预估-校正算法, 结出其总体截断误差。

若取 $h=0.1$, 计算 $y(0.2)$ 的值, 保留3位小数。



第6章 常微分方程数值解法

例.对于一阶常微分方程的初值问题 $y'(t) = f(t, y(t))$, $y(0) = y_0, t \in [0, 2]$, 若采用Simpson公式进行求解时的公式为_____,其特征多项式可以写为_____;
当 $h = 0.1$ 时, 在使用中点法公式时, 若利用Euler公式得到的 y_1 作为表头元素计算 y_{20} 时发现与预期值相差比较大, 主要原因是_____

例.针对常微分方程的初值问题 $y'(t) = -5y$, $y(0) = 1, t \in [0, 1]$, 当选择步长为 h 时

- (1) 写出Euler公式和梯形公式, 并给出其局部截断误差(4分)
- (2) 给出由这两种公式构成的预估-校正公式, 它是几阶公式并请说明理由.(6分)