2015 年春季学期计算方法（B）复习提纲

使用说明：本复习提纲是基于本学期计算方法考试难度大大提高，复习时间又极端紧张的情况而打造的，是结合张韵华、张瑞两位老师上课内容以及讲稿，请勿外传。

第〇章　绪论

0.1 数值计算方法与算法

0.2 误差与有效数字

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

定义 如果精确值 x^* 与近似值 x 的误差的绝对值不超过某正数 ε，即

$|e| = |x^* - x| \le \varepsilon$　　称 ε 为绝对误差限或误差限。

例：若 $x^* = 0.0123456$，则它的误差限是：　$|e| = |x^* - x| < 10^{-8} \cdot 5 = \frac{1}{2}10^{-7}$

定义 设 x^* 为精确值，x 是 x^* 的一个近似值，称 $e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$ 为近似值 x 的相对误差。

在实际计算中，有时得不到精确值 x^*，当 e_r 较小时 x^* 可用近似值 x 代替，即

$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x^* - x}{x}$　　　**相对误差** $= \frac{\text{绝对误差}}{\text{精确值}}$ 或 相对误差 $= \frac{\text{绝对误差}}{\text{近似值}}$

定义 如果有正数 ε_r 使得　$e_r = |\frac{e}{x^*}| \le \varepsilon_r$，则称 ε_r 为 x^* 的相对误差限。

产生误差的因素很多，产生误差的原因主要有

原始误差　由客观存在的模型抽象到物理模型产生的误差。包括模型误差和原始数据误差。

截断误差　用有限项近似无限项时，由截取函数的部分项产生的误差，称为截断误差。

舍入误差　在数值计算中，通常都按有限位进行运算。

定义 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。

补充：误差的运算

$1.(x^* \pm y^*) - (x \pm y) = e_x \pm e_y$

2、　$2.(x^* \cdot y^*) - (x \cdot y) = x^*(y^* - y) + y(x^* - x) = ye_x + x^*e_y = \max\{|x^*|, |y|\}(|e_x| + |e_y|)$

$$3.\left|\frac{x^*}{y^*} - \frac{x}{y}\right| = \left|\frac{x^*y - y^*x}{yy^*}\right| = \left|\frac{-x^*(y^* - y) + y(x^* - x)}{yy^*}\right| = \left|\frac{-x^*e_y + ye_x}{yy^*}\right|$$

0.3 约束误差

0.4 范数

0.4.1 向量范数

范数是在广义长度意义下，对函数、向量和矩阵的一种度量定义。任何对象的范数值都是一个非负实数。范数有多种定义形式，只要满足三个条件即可定义为一个范数。

对任一向量 $X \in R^n$，按照一个规则确定一个实数与它对应，记该实数为 $\|X\|$，若 $\|X\|$ 满足下面三个性质：

(i) $\forall \ X \in R^n$，有 $\|X\| \geq 0$，当且仅当 $X = 0$ 时，$\|X\| = 0$　　（非负性）

[编者注：考试常有类似的判断题，判断是否可以构成范数，在判断的时候非负性尤其要注意，**当且仅当** $X = 0$ 时，$\|X\| = 0$，才可以构成范数]

(ii) $\forall \ X \in R^n, \alpha \in R$，有 $\|\alpha X\| = |\alpha| \|X\|$　　（齐次性）

（iii）$\forall \ X, Y \in R^n$，有 $\|X + Y\| \leq \|X\| + \|Y\|$　　(三角不等式)

那么称该实数 $\|X\|$ 为向量 X 的范数。

向量范数　向量 $X = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$ 的 L_p 范数定义为

$$\|X\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p \right)^{1/p}, \qquad 1 \leq p \leq +\infty$$

其中，经常使用三种向量范数是 $p = 1, 2, \infty$

$$\boxed{\|X\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n| = \sum_{i=1}^{n} |x_i|}$$

$$\boxed{\|X\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}}$$

或写成 $\|X\|_2 = \sqrt{(X, X)}$

$$\boxed{\|X\|_\infty = \max\{|x_1|, |x_2|, \cdots, |x_n|\} = \max_{1 \leq i \leq n}\{|x_i|\}}$$

[编者注：无穷范数的证明用微积分里面的夹逼准则考虑]

例：计算向量 $X = (1, 3, -5)^T$，$p = 1, 2, \infty$ 的三种向量范数。　9　　5.91608　　5

例：设 A 是一个正定矩阵，对任何向量 $X \in R^n$，定义函数 $\|X\|_A = \sqrt{X^T A X}$，是一种向量范数.

例：当 $0 < p < 1$，$\|X\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p \right)^{1/p}$ 不是向量范数.

[编者注：可以取 $\alpha = (0, 0, \cdots, 1)^T, \beta = (1, 0, \cdots, 0)^T$，则不满足三角不等式]

有限维线性空间 R^n 中任意向量范数的定义都是等价的，且对于向量的 1、2 和 ∞ 范数有下列等价关系 $\|X\|_\infty \le \|X\|_1 \le n\|X\|_\infty$，$\frac{1}{\sqrt{n}}\|X\|_1 \le \|X\|_2 \le \|X\|_1$，$\frac{1}{\sqrt{n}}\|X\|_2 \le \|X\|_\infty \le \|X\|_2$

向量的极限

设 $X^{(1)},\dots X^{(m)}\cdots$ 为 R^n 上向量序列，若存在向量α$\in R^n$ 使 $\lim\limits_{m\to\infty}\left\|X^{(m)}-\alpha\right\|=0$，则称向量列 $X^{(1)},X^{(2)},\cdots$ 是收敛的，α 称为该向量序列的极限。

向量序列 $X^{(m)}=(x_1^{(m)},x_2^{(m)},\cdots,x_n^{(m)})^T;m=1,2,\cdots$ 收敛的充分必要条件为其序列的每个分量收敛，即 $\lim\limits_{m->\infty}x_i^{(m)}$ 存在。若 $\lim\limits_{m->\infty}x_i^{(m)}=x_i$，则 $X=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$ 就是向量序列 $X^{(m)}=(x_1^{(m)},x_2^{(m)},\cdots,x_n^{(m)})^T$,$m=1,2,\cdots$ 的极限。

例：向量序列 $X^{(k)}=\begin{pmatrix}\frac{1}{k+1}\\(1+\frac{1}{k})^k\\\frac{2k-1}{k+11}\end{pmatrix},k=0,1,2,\cdots$ 的极限向量 $\lim\limits_{k->\infty}X^{(k)}=\lim\limits_{k->\infty}\begin{pmatrix}\frac{1}{k+1}\\(1+\frac{1}{k})^k\\\frac{2k-1}{k+11}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\e\\2\end{pmatrix}$

在计算方法中，计算的向量序列都是数据序列，当$\|X^{(k+1)}-X^{(k)}\|<\varepsilon$ 给定精度时，视 $X^{(k+1)}$ 为极限向量 X^*。

0.4.2 矩阵范数

矩阵范数

矩阵范数可用向量范数定义。设 $A\in R^{n\times n}$，记方阵 A 的范数为$\|A\|$ ，那么

$$\|A\|=\sup_{\substack{x\in R^n\\x\ne0}}\frac{\|AX\|}{\|X\|}$$，[编者注：上确界] 或 $$\|A\|=\sup_{\substack{x\in R^n\\\|x\|=1}}\|AX\|$$

[编者注：$X=t\widetilde{X}$，且 $\widetilde{X}$ 是单位向量，可将左边定化为右边]

矩阵范数性质

(1) $\|A\|>0$,当且仅当 $A=0$ 时，$\|A\|=0$　　　（非负性）

(2) $A\in R^{n\times n},\forall\lambda\in R$　$\|\lambda\ A\|=|\lambda|\|A\|$　　　（齐次性）

(3) 对于任意两个阶数相同的矩阵 A,B , 有 $\|A+B\|\le\|A\|+\|B\|$　　　（三角不等式）

(4) A,B 为同阶矩阵 $||AB||\le||A||||B||$

(5) A 为 n 阶阵, 对 $\forall x\in R^n$,恒有 $||AX||\le||A||\cdot||X||$ （相容性）

常用矩阵范数

对应于向量的三种范数，相对应的三种矩阵范数形式为：

$$\boxed{\|A\|_1=\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|=\max_{1\le j\le n}(|a_{1,j}|+|a_{2,j}|+\cdots+|a_{n,j}|)}$$ ［最大的行和］

$$\boxed{\|A\|_\infty=\max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|=\max_{1\le i\le n}(|a_{i,1}|+|a_{i,2}|+\cdots+|a_{i,n}|)}$$ ［最大的列和］

$$\boxed{\|A\|_2=\sqrt{\rho(A^TA)}=\sqrt{\lambda_1}}$$ ［A^TA 的绝对值最大的特征值的平方根］

符号 $\rho(A^TA)$ 称为 A^TA 的谱半径，A^TA 的特征值 $|\lambda_1|\ge|\lambda_2|\ge\cdots\ge|\lambda_n|$。

[编者注：这部分的证明应该是不会考的，不过为了保险起见，还是简单看下教材 P7 的证明]

还要介绍一种向量范数，称为 Euclid 或 Schur 范数，用 $||A||_E$ 表示

定义为 $$\boxed{||A||_E=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2}}$$

例：$A=\begin{pmatrix}-1 & 2\\ 3 & 7\end{pmatrix}$，分别求 $\|A\|_1$，$\|A\|_\infty$，$\|A\|_2$，$||A||_E$

解：$\|A\|_1=\max\{|-1|+3,2+7\}=9$ $\|A\|_\infty=\max\{|-1|+2\ ,3+7\}=10$

$$A^TA=\begin{pmatrix}-1 & 3\\ 2 & 7\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 2\\ 3 & 7\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}10 & 19\\ 19 & 53\end{pmatrix}$$

A^TA 的特征值 $\lambda_1=60.19$，$\lambda_2=2.81$

$\|A\|_2=\sqrt{60.19}=7.75822$ $||A||_E=\sqrt{63}$

矩阵特征值与范数

若λ是矩阵 A 的特征值，X 为其特征向量，AX =λX， 对任一对相容的矩阵与向量范数，矩阵特征值的模不大于矩阵的任一范数。

$$|\lambda|||X||=||\lambda X||=||AX||\le||A||||X||;\qquad ||\lambda||\le||A||\qquad \rho(A)\le||A||$$

第 1 章 插 值

1.1 插值

定义 $f(x)$ 为定义在区间 $[a,b]$ 上的函数，$x_0,x_1,\ldots,x_n$ 为 $[a,b]$ 上 n+1 个互不相同的点，Φ为给定的某一函数类。若Φ上有函数φ(x)，满足

$$\varphi(x_i)=f(x_i)\ ,\ i=0,1,\cdots,n$$

则称φ(x)为 $f(x)$ 关于节点 $x_0,x_1,\ldots,x_n$，在Φ上的**插值函数**。称点 $x_0,x_1,\ldots,x_n$ 为插值节点；称 $(x_i,f(x_i))$，$i=0,1,\cdots,n$ 为插值型值点，简称型值点或**插值点**；$f(x)$ 称为**被插函数**。

1.2 多项式插值的拉格朗日（Lagrange）型式

1.2.1 线性插值

给定两插值点 $(x_0,f(x_0)),(x_1,f(x_1))$，其中 $x_0\neq x_1$，怎样做通过这两点的一次插值函数？

设直线方程为 $L_1(x)=a+bx$，将 $(x_0,f(x_0)),(x_1,f(x_1))$ 分别代入直线方程 $L_1(x)$ 得：

$$\begin{cases} a+bx_0=f(x_0)\\ a+bx_1=f(x_1)\end{cases}$$

当 $x_0\neq x_1$ 时，因 $\begin{vmatrix}1 & x_0\\ 1 & x_1\end{vmatrix}\neq 0$，所以方程组有解，而且解是唯一的。

当 $x_0\neq x_1$ 时，若用两点式表示这条直线，则有：

$$\boxed{L_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1)}$$

称这种型式为拉格朗日（Lagrange）插值多项式。

记 $l_0(x)=\dfrac{x-x_1}{x_0-x_1}$， $l_1(x)=\dfrac{x-x_0}{x_1-x_0}$

称 $l_0(x),l_1(x)$ 为插值基函数，计算 $l_0(x),l_1(x)$ 的值，易见

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

插值误差 P12 定理 1.1 不再赘述

1.2.2 二次插值

给定三个插值点 $(x_i,f(x_i))$,i=0,1,2；其中 x_i 互不相等，构造函数 $f(x)$ 的二次插值多项式？

$$\boxed{L_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)}$$

$$\boxed{=\sum_{i=0}^{2} l_i(x) f(x_i)}$$

1.2.3 n 次拉格朗日插值多项式

给定平面上 n+1 个互不相同的插值点 $(x_i, f(x_i)), i = 0,1,2\ldots n$ ： x_i 互不相同，是否有而且仅有一条不高于（至多）n 次的插值多项式，如果曲线存在，如何做出这条 n 次插值多项式曲线？

分析 n 次多项式 $P_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$，它完全由 $n+1$ 个系数 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 决定。若曲线 $P_n(x)$ 通过给定平面上 n+1 个互不相同的插值点 $(x_i, f(x_i)), i = 0,1,2\ldots n$ ，，则 $P_n(x)$ 应满足 $P_n(x_i) = f(x_i)$，$i = 0,1,2,\cdots,n$，事实上一个插值点就是一个方程。

将 $(x_i, f(x_i)), i = 0,1,2,\cdots n$ 依次代入 $P_n(x)$ 中得到线性方程组：

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \cdots + a_n x_0^n = f(x_0) \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \cdots + a_n x_1^n = f(x_1) \\ \cdots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \cdots + a_n x_n^n = f(x_n) \end{cases}$$

方程组的系数行列式是**范德蒙**(Vandermonde)行列式

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

构造插值多项式： $L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i)$

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

由 $l_i(x_i) = 1$ ，将 $x = x_i$，代入 $l_i(x)$

得到

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

所以

$$\boxed{l_i(x) = \frac{(x - x_0)\cdots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\cdots(x - x_n)}{(x_i - x_0)\cdots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_n)} = \prod_{\substack{0 \le j \le n \\ j \ne i}} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}}$$

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

n 次插值多项式的误差

定理 2 设 $L_n(x)$ 是 $[a,b]$ 上过 $(x_i, f(x_i)), i = 0,1,\cdots n$ 的 n 次插值多项式， $x_i \in [a,b], x_i$ 互不相同，当 $f \in C^{n+1}[a,b]$ 时，则插值多项式的误差：

$$\boxed{R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \quad \text{其中} \xi \in [a,b]}$$

证明： 记 $R_n(x) = f(x) - L_n(x)$

$$L_n(x_i) = f(x_i), i = 0,1,\cdots,n,$$

因而 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 是 $R_n(x)$ 的根,

于是可设 $R_n(x) = k(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$

下面的目标是算出 $k(x)$，为此引入变量为 t 的函数 $\varphi(t)$

$$\varphi(t) = f(t) - L_n(t) - k(x)(t-x_0)(t-x_1)\cdots(t-x_n)$$

令 $t = x_i$，得 $\varphi(x_i) = 0, i = 0,1,\cdots n$ ；

令 $t = x$，由定义 $\varphi(x) = f(x) - L_n(x) - K(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$=0,

即 $\varphi(t)$ 至少有 n+2 个零点，由于 $f \in C^{n+1}[a,b]$，由 Rolle 定理，$\varphi'(t)$ 在相邻的两个零点之间至少有一个零点，即 $\varphi'(t)$ 至少有 n+1 个零点，同理再对 $\varphi''(t)$ 应用 Rolle 定理，即 $\varphi''(t)$ 至少有 n 个零点，反复应用 Rolle 定理得到 $\varphi^{(n+1)}(t)$ 至少有一个零点 ξ。

另一方面，对 $\varphi(t)$ 求 n+1 阶导数，有

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

令 $t = \xi$ ，有

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

得到 $k(x) = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \quad \xi \in [a,b] \quad *$$

由于$\varphi^{(n+1)}(t)$的零点ξ与$\varphi(t)$的零点$x, x_0, \cdots x_n$有关，因而ξ为x的函数。

$R_n(x)$是插值多项式$L_n(x)$的**截断误差**，也称**插值余项**。

若 $\left|f^{(n+1)}(x)\right| \le M,\ x \in [a,b],$ 则$R_n(x)$可表示为

$$\left|R_n(x)\right| \le \frac{M}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}|x - x_i|$$

由插值多项式的存在唯一性，对于函数 $f(x) = x^k, k = 0,1,\cdots,n$，关于节点$x_0, x_1, \cdots, x_n$的拉格朗日插值多项式就是其本身，故拉格朗日基函数$\{l_i(x)\}$满足

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x)x_i^k = x^k \quad , \quad k = 0,1,\cdots,n$$

令 k=0，得到 $\sum_{i=0}^{n} l_i(x) \equiv 1$ 。

[编者注：写差值误差的时候通常根据定理 2 来写，需要注意：

若给定$x_0, f(x_0), f'(x_0); x_1, f(x_1)$，则插值余项$R_2(x) = \dfrac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(x - x_0)^2(x - x_1)$

若给定$x_0, f(x_0), f'(x_0); x_1, f(x_1), f'(x_1)$，则余项$R_3(x) = \dfrac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x - x_0)^2(x - x_1)^2$]

例 要制做三角函数 sin x 的函数值表，已知表值有四位小数，要求用线性插值引起的截断误差不超过表值的舍入误差，试决定其最大允许步长。

解：设 $h = h_i = x_i - x_{i-1}$

$$|R(x)| = \left|\frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_{i-1})(x - x_i)\right| = \left|\frac{\sin(\xi)}{2!}(x - x_{i-1})(x - x_i)\right|$$

$$\le \frac{1}{2}|(x - x_{i-1})(x - x_i)| \le \frac{1}{2}\left|(\frac{x_{i-1} + x_i}{2} - x_{i-1})(\frac{x_{i-1} + x_i}{2} - x_i)\right|$$

$$= \frac{1}{8}|(x_{i-1} - x_i)(x_i - x_{i-1})| = \frac{h^2}{8} < \frac{1}{2}10^{-4} \qquad \therefore \text{最大允许步长 } h \le 0.02$$

1.3 多项式插值的牛顿(Newton)型式

1.3.1 差商及其计算

一阶差商 $f[x_0, x_1] = \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$

二阶差商 $f\left[x_0,x_1,x_2\right]=\dfrac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0}$

零阶差商 $f[x_0]=f(x_0)$。

k 阶差商 设 $x_0,x_1,\ldots,x_k$ 互不相同，$f(x)$ 关于 $x_0,x_1,\ldots,x_k$ 的 k 阶差商为

$$f\left[x_0,x_1,\ldots x_k\right]=\frac{f[x_1,x_2,\ldots,x_k]-f[x_0,x_1,\ldots,x_{k-1}]}{x_k-x_0}$$

性质 1 k 阶差商 $f\left[x_0,x_1,\ldots x_k\right]$ 是由函数值 $f(x_0),f(x_1)$, $\cdots,f(\ x_k\ )$ 的线性组合而成。

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

性质 2 若 $i_0,i_1,\ldots,i_k$ 为 $0,1,\ldots,k$ 的任一排列，则 $f\left[x_0,x_1,\ldots x_k\right]=f\left[x_{i_0},x_{i_1},\ldots x_{i_k}\right]$

此即插商的值只与节点有关而与节点顺序无关。

性质 3 若 $f(x)$ 为 m 次多项式，则 $f\left[x_0,x_1,\ldots x_{k-1},x\right]$ 为 $m-k$ 次多项式。

差商计算

差商表

i	x_i	$f(x_i)$	$f[x_{i-1},x_i]$	$f[x_{i-2},x_{i-1},x_i]$	三阶差商	n 阶差商
0	x_0	$f(x_0)$				
1	x_1	$f(x_1)$	$f[x_0,x_1]$			
2	x_2	$f(x_2)$	$f[x_1,x_2]$	$f[x_0,x_1,x_2]$		
3	x_3	$f(x_3)$	$f[x_2,x_3]$	$f[x_1,x_2,x_3]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3]$	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	
n	x_n	$f(x_n)$	$f[x_{n-1},x_n]$	$f[x_{n-2},x_{n-1},x_n]$	$f[x_{n-3},\ldots,x_n]$	$f\left[x_0,x_1,\ldots,x_n\right]$

例 计算 (−2,17), (0,1), (1,2), (2,19)的一至三阶差商。

i	x_i	$f(x_i)$	$f[x_{i-1},x_i]$	$f[x_{i-2},x_{i-1},x_i]$	$f[x_{i-3},x_{i-2},x_{i-1},x_i]$
0	−2	17			
1	0	1	−8		
2	1	2	1	3	
3	2	19	17	8	1.25

1.3.2 Newton 插值

线性插值，二次多项式插值，n 次 Newton 差值函数

问：给定两个插值点$\left(x_0, f(x_0)\right), \left(x_1, f(x_1)\right),\ x_0 \neq x_1$，怎样构造线性插值函数的 Newton 型式？

用点斜式构造线性插值函数，设$N_1(x) = a + b\left(x - x_0\right)$

$$\boxed{N_1(x) = f(x_0) + f\left[x_0, x_1\right](x - x_0)}$$

问：给定$(x_i, f(x_i)), i = 0,1,2,\quad x_i$ 互不相同，怎样构造二次 Newton 插值多项式？

$N_2(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1)$

$$\boxed{N_2(x) = f(x_0) + f\left[x_0, x_1\right](x - x_0) + f\left[x_0, x_1, x_2\right](x - x_0)(x - x_1)}$$

问：给定$(x_i, f(x_i)), i = 0,1,\ldots,n$；其中$x_i$互不相同，怎样构造 n 次 Newton 插值多项式？

$f[x, x_0] = \dfrac{f(x\ ) - f(x_0)}{x\ - x_0}$，得到$f(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x, x_0]$ ；

类似地，由二阶差商至 n 阶差商的定义得到下列方程：

$$\begin{cases}
f(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x, x_0] & (1) \\
f[x, x_0] = f[x_0, x_1] + (x - x_1) f[x, x_0, x_1] & (2) \\
f[x, x_0, x_1] = f[x_0, x_1, x_2] + (x - x_2) f[x, x_0, x_1, x_2] & (3) \\
\qquad \cdots\cdots & \\
f[x, x_0, x_1, \cdots, x_{n-1}] = f[x_0, x_1, \cdots, x_n] + (x - x_n) f[x, x_0, x_1, \cdots, x_n] & (n+1)
\end{cases}$$

用$(x - x_0)$乘(2)式，用$(x - x_0)(x - x_1)$乘(3)，… ，$(x - x_0)\cdots(x - x_{n-1})$乘$(n+1)$式，所有等式相加，得到

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

其中$N(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] + \cdots + (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1}) f[x_0, x_1, \cdots, x_n]$

[编者注：这里可以用数学归纳法证明，更为简单。关于牛顿插值的推导还是比较容易考到的！计算牛顿插值用的是对角线上面的插商。]

至多为n次多项式，可以验证$N(x_i) = f(x_i),\quad i = 1, 2, \ldots, n$,0；称$N(x)$是过$n + 1$个插值点的（至多）n阶 Newton 插值多项式。也有：

$$\boxed{N(x) = f[x_0] + \sum_{k=1}^{n} f[x_0, x_1, \ldots, x_k](x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1})}$$

其中 $\boxed{R(x)=f[x,x_0,x_1,\cdots,x_n]\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)}$ 为插值多项式的误差。

[编者注：该式计算不出差商的准确值]

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

至多为n次多项式，可以验证 $N(x_i)=f(x_i),\quad i=1,2,\ldots,n$；称 $N(x)$ 是过 $n+1$ 个插值点的（至多）n 阶 Newton 插值多项式。也有：$N(x)=f[x_0]+\sum_{k=1}^{n}f[x_0,x_1,\ldots,x_k](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})$

牛顿插值多项式的承袭性质表现在

$$N_k(x)=N_{k-1}(x)+t_k(x)f[x_0,x_1,\cdots,x_k] \qquad t_k(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})$$

$$t_0(x)\equiv 1$$

$$t_i(x)=(x-x_{i-1})t_{i-1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1}),\quad i=1,2,\cdots,n$$

$$N(x)=\sum_{i=0}^{n}t_i(x)f[x_0,x_1,\cdots,x_i]$$

也有 $\begin{cases}t_i(x_j)=0 & j<i\\ t_i(x_j)\neq 0 & j=i\end{cases}$

基函数：$\{t_0(x),t_1(x),\ldots,t_n(x)\}$;

$$\{1,x-x_0,(x-x_0)(x-x_1),\cdots,(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-1})\}$$

有关误差

$\boxed{R(x)=f[x,x_0,x_1,\cdots,x_n]\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)}$为插值多项式的误差。

当 $f\in C^{n+1}[a,b]$ 时，有 $R(x)=\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_1)=f[x,x_0,\cdots,x_n]\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$

故有 $$\boxed{\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}=f[x,x_0,x_1,\cdots,x_n]}$$

例 设 $f(x)=10x^3-100x+1$，计算 $f[x_0,x_1,x_2,x_3]$，$f[x_0,x_1,x_2,x_3,x_4]$。[必考题型]

$$f[x_0,x_1,x_2,x_3]=\frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}=\frac{60}{6}=10\,,\qquad f[x_0,x_1,x_2,x_3,x_4]=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}=\frac{0}{4!}=0$$

例 给定下列插值节点的值，构造牛顿型式插值函数，

计算 $N_2(0.9),N_3(0.9)$。

x_i	-2	0	1	2
$f(x_i)$	17	1	2	19

解 $N_2(x)=f(x_0)+(x-x_0)f[x_0,x_1]+(x-x_0)(x-x_1)f[x_0,x_1,x_2]$

取 $x_0=-2,x_1=0,x_2=1$；用上例中算出的差商代入上式，

得到二阶牛顿插值多项式

$$N_2(x)=17-8(x+2)+3(x+2)x$$

$$N_2(0.9)=17.0-8(0.9+2)+3(0.9+2)\cdot 0.9=1.63$$

$$N_3(x)=N_2(x)+f[x_0,x_1,x_2,x_3](x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$$

取 $x_0=-2,x_1=0,x_2=1,x_3=2$；得到三阶牛顿插值多项式：

$$N_3(x)=17-8(x+2)+3x(x+2)+1.25x(x+2)(x-1)$$

$$N_3(0.9)=N_2(0.9)+1.25\cdot 0.9\cdot(0.9+2)(0.9-1.0)=1.30375$$

补充习题：1.证明

若 $f\in \mathrm{P}^m, m>k,$则 $f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1},x]\in \mathrm{P}^{m-k}$

2.设 $P_{0,1}(x)$ 是由点 $(x_0,f(x_0)),(x_1,f(x_1))$ 构造出来的线性插值多项式，$P_{0,1}(x)$ 是由点 $(x_1,f(x_1))$，$(x_2,f(x_2))$ 构造出来的线性插值多项式，则证明 $P_{0,1,2}(x)=\dfrac{(x-x_0)P_{1,2}(x)-(x-x_2)P_{0,1}(x)}{x_2-x_0}$ 是由 x_0,x_1,x_2 构造出来的插值多项式。并写出 $P_{0,1,\cdots n}(x)$ 的表达式。

*1.4 Hermite 插值

常用 Hermite 插值描述如下：对于 $f(x)$ 具有一阶连续导数，以及插值点 x_i，i=0,1,.., n, x_i 互不相同，若有至多为 2n+1 次的多项式函数 $H_{2n+1}(x)$ 满足

$$\boxed{H_{2n+1}(x_i)=f(x_i) \qquad H'_{2n+1}(x_i)=f'(x_i),i=0,1,\cdots,n}$$

则称 $H_{2n+1}(x)$ 为 $f(x)$ 关于节点 $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 的 Hermite **的插值多项式**。

问：给定 $f(x_0)=y_0$,$f(x_1)=y_1,f'(x_0)=m_0$,$f(x_1)=m_1$,$x_0\neq x_1$；怎样构造给定两个节点的函数值和一阶导数值的 Hermite 插值多项式？

分析：**用 4 个条件，至多可确定 3 次多项式**。设满足插值条件的三次 Hermite 插值多项式为

$H_3(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3$，

将插值条件代入 $\mathrm{H}_3\left(x\right)$ 得到线性方程组

$$\begin{cases} a_0+a_1x_0+a_2x_0^2+a_3x_0^3=y_0 \\ a_0+a_1x_1+a_2x_1^2+a_3x_1^3=y_1 \\ a_1+2a_2x_0+3a_3x_0^2=m_0 \\ a_1+2a_2x_1+3a_3x_1^2=m_1 \end{cases}$$

方程组的系数行列式

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & x_0^3 \\ 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 0 & 1 & 2x_0 & 3x_0^2 \\ 0 & 1 & 2x_1 & 3x_1^2 \end{vmatrix}=-(x_0-x_1)^4\neq 0$$

方程组有解，可唯一解出 a_0,a_1,a_2,a_3，即关于节点 x_0,x_1 的 Hermite 插值多项式存在唯一。类似于构造拉格朗日插值多项式的方法，通过插值基函数作出 $\mathrm{H}_3\left(x\right)$。

设 $\quad \mathrm{H}_3\left(x\right)=h_0\left(x\right)y_0+h_1\left(x\right)y_1+g_0\left(x\right)m_0+g_1\left(x\right)m_1$

$$h_0(x)=\left(1-2(x-x_0)l_0'(x_0)\right)l_0^2(x)$$

解出

$$=\left(1-2\frac{x-x_0}{x_0-x_1}\right)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2=\left(1-2\frac{x-x_0}{x_0-x_1}\right)l_0^2(x)$$

同理可得

$$h_1(x)=\left(1-2\frac{x-x_1}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2=\left(1-2\frac{x-x_1}{x_1-x_0}\right)l_1^2(x)$$

解出 $\quad g_0(x)=(x-x_0){l_0}^2(x)$ $\qquad$ 同理 $\quad g_1(x)=(x-x_1){l_1}^2(x)$

$$R(x)=f(x)-H_3(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_0)^2(x-x_1)^2,\xi\in\left[a,b\right]$$

如果构造 $f(x)$ 关于节点 $x_i,i=0,1,\cdots,n$ 的 n+1 个节点的 2n+1 次 Hermite 插值多项式，设，

$$H_{2n+1}(x)=\sum_{i=0}^{n}h_i(x)f(x_i)+\sum_{i=0}^{n}g_i(x)f'(x_i)$$

这里 $h_i(x),g_i(x),i=0,1,\cdots,n$ 分别为不高于 2n+1 次插值多项式，

分别满足 $\begin{cases} h_i(x_j)=\delta_{ij} \\ h_i'(x_j)=0 \end{cases}$ 及 $\begin{cases} g_i(x_j)=0 \\ g_i'(x_j)=\delta_{ij} \end{cases}$

由此可得到

$$h_i(x)=(1-2(x-x_i)l_i'(x_i))\,l_i^2(x)\,,h_i(x)=(1-2(x-x_i)\sum_{j\neq i}\frac{1}{x_i-x_j})l_i^2(x)\,,g_i(x)=(x-x_i)l_i^{\,2}(x)$$

[编者注：此时插值基函数 $l_i'(x_i)=\sum_{j\neq i}\frac{1}{x_i-x_j}$]

这里 $\{l_i(x)\}$ 为关于节点 $x_i,i=0,1,\cdots,n$，的拉格朗日基函数 。

容易证明，当 $f\in C^{2n+2}[a,b]$ 时，误差为：

$$\boxed{R(x)=f(x)-H_{2n+1}(x)=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}(x-x_0)^2(x-x_1)^2\cdots(x-x_n)^2,\xi\in[a,b]}$$

例 给定 $f(x_0)=y_0,f'(x_0)=m_0,f(x_1)=y_1$，构造二次插值多项式函数。

解 设 $P_2(x)=t_0(x)y_0+t_1(x)y_1+t_2(x)m_0$ 这里 $t_0(x),t_1(x),t_2(x)$ 为不高于二次多项式，

由 $\mathrm{P}_2(x_0)=y_0,P_2'(x_0)=m_0,P_2(x_1)=y_1$ 得到：

$$\begin{cases} t_0(x_0)=1 \\ t'_0(x_0)=0 \\ t_0(x_1)=0 \end{cases},\quad \begin{cases} t_1(x_0)=0 \\ t_1'(x_0)=0 \\ t_1(x_1)=1 \end{cases},\quad \begin{cases} t_2(x_0)=0 \\ t_2'(x_0)=1 \\ t_2(x_1)=0 \end{cases}$$

$$t_0(x)=(a_0x+b_0)\frac{x-x_1}{x_0-x_1},\quad t_1(x)=a_1\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2,\quad t_2(x)=a_2(x-x_0)(x-x_1)m_0$$

由 $t_0(x_0)=1,$ 得 $a_0x_0+b_0=1$

由 $t_0'(x_0)=0,$ 得 $a_0\frac{x_0-x_1}{x_0-x_1}+(a_0x_0+b_0)\frac{1}{x_0-x_1}=0$

于是有 $a_0=-\frac{1}{x_0-x_1}$， $b_0=\frac{2x_0-x_1}{x_0-x_1}$ $t_0(x)=\frac{(2x_0-x_1-x)}{x_0-x_1}\cdot\frac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)}$

同理 $t_1(x)=\frac{(x-x_0)^2}{(x_1-x_0)^2}$

由 $P_2'(x_0)=m_0,a_2(x_0-x_1)=1$， 得到 $a_2=\frac{1}{x_0-x_1}$ $t_2(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{x_0-x_1}$

$$P_2(x)=\frac{2x_0-x_1-x}{x_0-x_1}\cdot\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2 y_1+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{x_0-x_1}m_0$$

用牛顿插值构造 Hemite 插值

[编者注：考试时求 Hemite 插值建议用这种方法！]

给定 $(x_i,f(x_i),f'(x_i)),i=0,1,\ldots,n$，定义序列 $z_0=z_1=x_0,z_2=z_3=x_1$，即

$z_{2i}=z_{2i+1}=x_i,i=0,1,\ldots,n$

计算一阶差商时： $f[z_{2i-1},z_{2i}]=\dfrac{f(z_{2i})-f(z_{2i-1})}{z_{2i}-z_{2i-1}}$

由 $f[x_0,x_1]=f'(\zeta)$， $\zeta\in[x_0,x_1]$

$$f[x_0,x_0]=\lim_{x_0->x_1}f[x_0,x_1]=\lim_{x_0->x_1}\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}=\lim_{h-0}\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}=f'(x_0).$$

取 $f[z_{2i},z_{2i+1}]=f'(x_i),i=0,1,\ldots,n$

在差商表中用 $f'(x_0),f'(x_1),\ldots,f'(x_n)$ 代替 $f[z_0,z_1],f[z_2,z_3],\ldots,f[z_{2n},z_{2n+1}]$

其余差商公式不变，得到差商型 Hermite 插值公式：

$$\boxed{H_{2n+1}(x)=f[z_0]+\sum_{k=1}^{2n+1}f[z_0,z_1,\ldots,z_k](x-z_0)(x-z_1)\cdots(x-z_{k-1})}$$

其中 $z_{2k}=z_{2k+1}=x_i$，$f[z_{2k},z_{2k+1}]=f'(x_k),k=0,1,\ldots,n$

[编者注：1.在给定题目条件时，若给定了 $f^{(n)}(x_i)$，那么 $f^{(n-1)}(x_i),f^{(n-2)}(x_i),\cdots f(x_i)$ 也必须给定；2.最后的插值表达式要按照 Z 的多项式来写]

例 用下列数据构造 Hermite 插值多项式，并计算 $f(1.36)$

x	1.2	1.4	1.6
$f(x)$	0.6	0.9	1.1
$f'(x)$	0.5	0.7	0.6

解 计算差商，如下表所示

	$f(x_i)$	$f[x_{i-1},x_i]$	$f[x_{i-2},x_{i-1},x_i]$	$f[x_{i-3},x_{i-2},x_{i-1},x_i]$	$\cdots$
1.2	0.6				
1.2	0.6	$\underline{0.5}$			
1.4	0.9	1.5	5.0		

1.4	0.9	0.7	-4.0	-45		
1.6	1.1	1.0	1.5	13.75	145	
1.6	1.1	0.6	-2.0	-17.5	-76.25	-553.125

$$H_5(x)=0.6+0.5(x-1.2)+5(x-1.2)^2-45(x-1.2)^2(x-1.4)$$
$$+145(x-1.2)^2(x-1.4)^2-553.125(x-1.2)^2(x-1.4)^2(x-1.6)$$

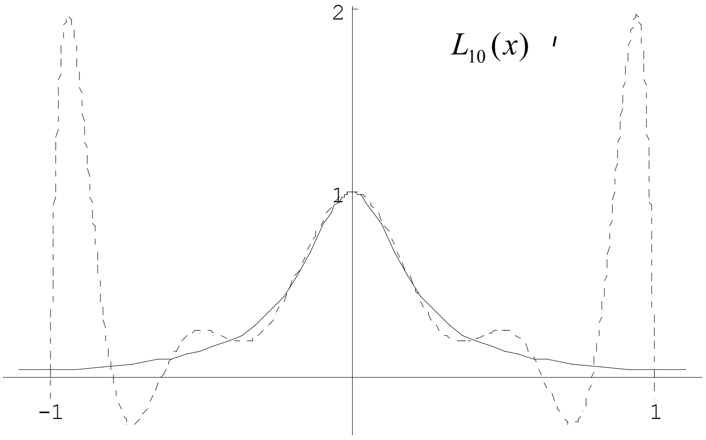
$$H_3(1.36)=0.8655$$

1.5 分段插值函数

1.5.1 龙格(Runge)现象

在构造插值多项式时，根据误差表达式，你是否认为多取插值点总比少取插值点的效果好呢？答案是不一定。对有些函数来说，有时点取的越多，效果越不近人意。请看下面的例子。

例 给定函数 $f(x)=\dfrac{1}{1+25x^2}$，$x\in[-1,1]$，构造 10 次插值多项式 $L_{10}(x)$。对 $[-1,1]$ 做等距分割，取 $h=\dfrac{2}{10}=0.2$，$x_i=-1+0.2i$，取插值点为 $\left(x_i,\dfrac{1}{1+25x_i^2}\right)$，$i=0,1,\cdots 10$



插值多项式在插值区间内发生剧烈振荡的现象成为 Runge 现象。Runge 现象解释了插值多项式的缺陷，它说明高次多项式的插值效果并不一定优于低次多项式插值的效果，同时表明等距插值不能保证较好的插值效果。

1.5.2 分段线性插值

$$\boxed{p_i(x)=\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}f(x_i)+\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}f(x_{i+1}),x_i\le x\le x_{i+1}}$$

1.6 三次样条函数

定义 给定区间 $[a,\ b]$ 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,…,n。若 $S(x)$ 满足 $S(x_i)=y_i$，i = 0,1,…,n，$S(x)$ 在每个小区间 $[x_i,\ x_{i+1}]$ 上**至多是一个三次多项式**；$S(x)$ 在 $[a,\ b]$ 上有**连续的二阶导数**，则称 $S(x)$ 为 $f(x)$ 关于剖分 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ 的三次样条插值函数，称 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 为样条结点。

要在每个子区间$[x_i, x_{i+1}]$上构造三次多项式$S(x)=S_i(x)=a_ix^3+b_ix^2+c_ix+d_i$，

x∈$[x_i, x_{i+1}]$, i =0,1,…, n–1 共需要 4n 个条件，

由插值条件$S(x_i)=y_i$， i = 0,1, …,n 只提供了 n+1 个条件； 再用每个内点的关系建立条件

$$S(x_i+0)=S(x_i-0)\,,\quad S_{i-1}(x_i)=S_i(x_i)$$

$$S'(x_i+0)=S'(x_i-0)\,,\quad S'_{i-1}(x_i)=S'_i(x_i)\,,$$

$$S''(x_i+0)=S''(x_i-0)\,,\quad S''_{i-1}(x_i)=S''_i(x_i)$$

i = 1,…,n–1，

又得到 3n–3 个条件；附加两个边界条件，即可唯一确定样条函数了

1.6.1 三次样条插值的 M 关系式

引入记号 M$_i$= $S''(x_i)$， m$_i$= $S'(x_i)$， i = 0, 1,…,n。

用节点处二阶导数表示样条插值函数时称为大 M 关系式，用一阶导数表示样条插值函数时称为小 m 关系式。

问：给定插值点（x$_i$,y$_i$）， i = 0, 1, …, n；怎样构造用二阶导数表示的样条插值函数，即怎样构造 M 关系式？

假设 $S''(x_i)=M_i$， i = 0, 1,…,n。由于$S''(x)$在$[x_i, x_{i+1}]$上为线性函数，故在$[x_i, x_{i+1}]$上做 M 的分线段线性插值函数

$$S''(x)=S_i''(x)=\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}M_i+\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}M_{i+1},\quad i=0,1,\cdots n-1$$

令 $h_i=x_{i+1}-x_i$ 得到 $S_i''(x)=\frac{x_{i+1}-x}{h_i}M_i+\frac{x-x_i}{h_i}M_{i+1},\quad i=0,1,2,\cdots n-1$

对$S''(x)$ 积分两次有 $S(x)=S_i(x)=\frac{(x_{i+1}-x)^3}{6h_i}M_i+\frac{(x-x_i)^3}{6h_i}M_{i+1}+cx+d$

$$=\frac{(x_{i+1}-x)^3}{6h_i}M_i+\frac{(x-x_i)^3}{6h_i}M_{i+1}+C(x_{i+1}-x)+D(x-x_i)$$

将$S(x_i)=y_i, S(x_{i+1})=y_{i+1}$ 代入可解出 $C=\frac{y_i}{h_i}-\frac{h_iM_i}{6}, D=\frac{y_{i+1}}{h_i}-\frac{h_iM_{i+1}}{6},$

故在$[x_i, x_{i+1}]$上有$\therefore S(x)=S_i(x)=\frac{(x_{i+1}-x)^3M_i+(x-x_i)^3M_{i+1}}{6h_i}+\frac{(x_{i+1}-x)y_i+(x-x_i)y_{i+1}}{h_i}$

$$-\frac{h_i}{6}\left[(x_{i+1}-x)M_i+(x-x_i)M_{i+1}\right],x\in\left[x_i,x_{i+1}\right]\quad i=1,2,\cdots,n$$

$S(x)$ 在每个小区间上具有不同的表达式，但由于 $S(x)$ 在整个区间 $[a,b]$ 上是二阶光滑的，故有

$$S'(x_{i+1}+0)=S'(x_{i+1}-0)\,,\quad S_i'(x_{i+1})=S_{i+1}'(x_{i+1})\qquad i=1,2,\cdots,n-1$$

列出每一个关系式再经计算得: $\mu_i M_{i-1}+2M_i+\lambda_i M_{i+1}=d_i \qquad i=1,2,\cdots,n-1$

其中： $\lambda_i=\dfrac{h_i}{h_i+h_{i-1}},\mu_i=1-\lambda_i,$

$$d_i=\frac{6}{h_i+h_{i-1}}\left(\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i}-\frac{y_i-y_{i-1}}{h_{i-1}}\right)=6y\left[x_{i-1},x_i,x_{i+1}\right]$$

得到 n +1 个未知数的 n–1 个方程组。现补充两个边界条件，使方程组只有唯一解。下面分三种情况讨论边界条件。

(1) 给定 M_0,M_n 的值($M_0=0,M_n=0$ 时，称为自然边界条件)，此时 n–1 阶方程组有 n–1 个未知量 M_i，$i=1,2,\cdots,n-1$

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_1 & & & \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \boxed{\lambda_{n-2}} & 2 & \lambda_{n-2} \\ & & & \mu_{n-1} & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} d_1-\mu_1 M_0 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1}-\lambda_{n-1}M_n \end{bmatrix}$$

(2)给定 $S'(x_0)=m_{0,}S'(x_n)=m_n$ 的值，将 $S'(x_0)=m_{0,}S'(x_n)=m_n$ 的值分别代入 $S'(x)$ 在 $\left[x_0,x_1\right],\left[x_{n-1},x_n\right]$ 中的表达式，得到另外两个方程。

$$2M_0+M_1=\frac{6}{h_0}[f[x_0,x_1]-m_0]=d_0 \text{ 及 } M_{n-1}+2M_n=\frac{6}{h_{n-1}}[m_n-f[x_{n-1},x_n]]=d_n$$

得到 n+1 阶的方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & & \\ u_1 & 2 & \lambda_1 & & & \\ & u_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-2} & 2 & \lambda_{n-1} \\ & & & & 1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix}$$

(3) 被插函数以 $x_n - x_0$ 为基本周期时，即 $f(x_0) = f(x_n)$,

即 $S(x_0) = S(x_n), S'(x_0) = S'(x_n), S''(x_0) = S''(x_n)$; 即 $m_0 = m_n$, $M_0 = M_n$

此时化为 n 个变量，n 个方程的方程组。

样条插值构造的 M 关系式是对角占优的三对角带状矩阵，可用第 5 章中追赶法求解。

例 给出离散数值表

x_i	1.1	1.2	1.4	1.5
y_i	0.4000	0.8000	1.6500	1.8000

取 $M_0 = M_n = 0$，构造三次样条插值的 M 关系式，并计算 $f(1.25)$。

解 由题中 (x_i, y_i) 的数值，计算得 $h_0 = 0.1$，$h_1 = 0.2$，$h_2 = 0.1$；

$$\begin{cases} \lambda_1 = 0.6667, \\ \mu_1 = 0.3333, \end{cases} \quad \begin{cases} \lambda_2 = 0.3333, \\ \mu_2 = 0.6667, \end{cases} d_1 = 5\text{，} \ d_2 = -55\text{。}$$

由 $M_0 = M_n = 0$ 的边界条件，得

$$\begin{bmatrix} 2 & 0.6667 \\ 0.6667 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ -55 \end{bmatrix},$$

解得 $M_1 = 13.125$，$M_2 = -31.875$。

因此，三次样条插值的分段表达为

$$S(x) = \begin{cases} 21.875x^3 - 72.1875x^2 + 83.1875x - 32.875, & x \in [1.1, 1.2], \\ -37.5x^3 + 141.5625x^2 - 173.75x + 59.725, & x \in [1.2, 1.4], \\ 53.125x^3 - 239.0625x^2 + 358.0625x - 179.05, & x \in [1.4, 1.5]. \end{cases}$$

特别地，$f(1.25) \approx S(1.25) = 1.0436$。

1.6.2 三次样条插值的 m 关系式

问：给定插值点（x_i， y_i）， i = 0, 1, …, n；怎样构造用节点处一阶导数表示的样条插值函数，即怎样构造 m 关系式？

对给定的插值点 $(x_i, y(x_i)), i = 0, \ldots n,$ 先假定已知 $S'(x_i) = m_i$，在每个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上做 Hermite 插值，那么在整个 $[x_0, x_n]$ 上是分段的 Hermite 插值，在 $[x_i, x_{i+1}]$ 上 $S(x)$ 的表达为

$$S(x)=\left(1-2\frac{x-x_i}{x_i-x_{i+1}}\right)\left(\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\right)^2 y_i+(x-x_i)\left(\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\right)^2 m_i$$

$$+\left(1-2\frac{x-x_{i+1}}{x_{i+1}-x_i}\right)\left(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\right)^2 y_{i+1}+(x-x_{i+1})\left(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\right)^2 m_{i+1}$$

由于 $S''(x_i+0)=S''(x_i-0)$ 得到方程组　　$S''_{i-1}(x_i)=S''_i(x_i)$

$$\lambda_i m_{i-1}+2m_i+\mu_i m_{i+1}=c_i \qquad i=1,2,\cdots,n-1$$

$$\lambda_i=\frac{h_i}{h_i+h_{i-1}},\mu_i=1-\lambda_i, \qquad c_i=3\left[\lambda_i y[x_{i-1},x_i]+\mu_i y[x_i,x_{i+1}]\right]$$

再附加两个边界条件，即可解出 m_i 的值。附加的边界条件情况同 M 关系式中类似，不再详说。

[这里的 m 方法的推导以及第三种追赶法的推导回去要自己推导一下啊]

第 2 章　数值微分和数值积分

2.1 数值微分

2.1.1 差商与数值微分

在微积分中，用差商的极限定义导数，$f'(x)$ 导数的三种定义形式：

$$f'(x)=\lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x)}{h}=\lim_{h\to 0}\frac{f(x)-f(x-h)}{h}=\lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$

当函数 $f(x)$ 是以离散点列给出时，当函数的表达式过于复杂时，数值导数用差商(平均变化率)作为近似值。

向前差商

用向前差商（平均变化率）近似导数有：

$$\boxed{f'(x_0)\approx\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}}$$

x_0+h 的位置在 x_0 的前面，因此称为**向前差商**。同理可有向后、中心差商的定义。

由泰勒展开

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(\xi), \qquad x_0\le\xi\le x_0+h$$

得向前差商的截断误差阶

$$R(x)=f'(x_0)-\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}=-\frac{h}{2}f''(\xi)=O(h)$$

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

向后差商

用向后差商近似导数有：

$$\boxed{f'(x_0)\approx\frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}}$$

与计算向前差商的方法类似，由泰勒展开得到向后差商的截断误差阶

$$R(x)=f'(x_0)-\frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}=O(h)$$

中心差商

用差商近似导数有：

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

由泰勒展开

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(x_0)+\frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1)\qquad（1）$$

$$f(x_0-h)=f(x_0)-hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(x_0)-\frac{h^3}{3!}f'''(\xi_2)\qquad（2）$$

得

$$R(x)=f'(x_0)-\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}=-\frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2)]$$ [编者注：设 $f'''(x)$ 连续]

$$=-\frac{h^2}{6}f'''(\xi)=O(h^2)\qquad x_0-h\le\xi\le x_0+h$$

差商的几何意义

微积分中的极限定义 $f(x_0)=\lim\limits_{h->0}\dfrac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$ ，表示 $f(x)$ 在 $x=x_0$ 处切线的斜率。表示图 2.1 中直线 P 的斜率，差商 $\dfrac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$ 表示过 $(x_0,f(x_0))$ 和 $(x_0+h,f(x_0+h))$ 两点直线 Q 的斜率，是一条过 x_0 的割线，用近似值内接弦的斜率代替准确值切线的斜率。

截断误差与舍入误差

设定最佳步长

在差商计算中，从误差的逼近阶的角度看，$|h|$ 越小，则误差也越小；但是太小的 $|h|$ 会带来较大的舍入误差。怎样选择最佳步长，使截断误差与舍入误差之和最小？

一般对计算导数的近似公式进行分析可得到截断误差的表示式，以中心差商为例，截断误差不超$\frac{h^2}{6}M_3=\frac{h^2}{6}\max|f'''(x)|$，而舍入误差可用量（证明略）$\frac{e}{h}$估计，其中$e$是函数$y_i$的原始值的绝对误差限，总误差为$\frac{h^2}{6}M_3+\frac{e}{h}$。当 $(\frac{h^2}{6}M_3+\frac{e}{h})'=\frac{h}{3}M_3-\frac{e}{h^2}=0$ 时，达到最小值，即$h=\sqrt[3]{\frac{3e}{M_3}}$。

可以看到用误差的表达式确定步长，难度较大，可行性差。通常用事后估计方法选取步长h，例如，记$D(h,x),D(\frac{h}{2},x)$ 为步长为h，$\frac{h}{2}$的差商计算公式$f'(x)$，给定误差界ε，当$|D(h,x)-D(\frac{h}{2},x)|<\varepsilon$ 时，步长$\frac{h}{2}$就是合适的步长。

2.1.2 插值型数值微分 [编者注：多用 Lagrange 插值多项式]

对于给定的$f(x)$的函数表，建立插值函数$L(x)$，用插值函数$L(x)$的导数近似函数$f(x)$的导数。

设x_i，$i=0,1,\cdots,n$为$\left[a,b\right]$上的节点，给定$(x_i,f(x_i))$ $i=0,1,\cdots,n$；以$(x_i,f(x_i))$为插值点构造插值多项式$L_n(x)$，以$L_n(x)$的各阶导数近似$f(x)$的相应阶的导数。例如，

$$f(x)\approx L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}\ell_i(x)f(x_i),\quad f'(x)\approx L_n'(x)=\sum_{i=0}^{n}\ell_i'(x)f(x_i)$$

当$x=x_j$时，$f'(x_j)=\sum_{i=0}^{n}\ell_i'(x_j)f(x_i)$ $\qquad j=0,1,\cdots,n$

误差项

$$R(x)=\frac{d}{dx}(\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)) \qquad R(x_j)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{\substack{i=0\\i\neq j}}^{n}(x_j-x_i)$$

例 给定$(x_i,f(x_i))$ $i=0,1,2$，并有$x_2-x_1=x_1-x_0=h$，计算$f'(x_0),f'(x_1),f'(x_2)$

解 做过$(x_i,f(x_i))$ $i=0,1,2$ 的插值多项式 [编者注：写成几项的和，不要试图合并！]

$$L_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{-h^2}f(x_1)$$
$$+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2h^2}f(x_2)$$

$$f'(x) = L_2'(x)$$
$$= \frac{f(x_0)}{2h^2}(x - x_1 + x - x_2) - \frac{f(x_1)}{h^2}(x - x_0 + x - x_2) + \frac{f(x_2)}{2h^2}(x - x_0 + x - x_1)$$

将 $x = x_i$ 代入 $f^{'}(x)$ 得三点公式:

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

利用泰勒展开进行比较和分析，可得三点公式的截断误差是 $O(h^2)$ 。[Prove it!]

类似地，可得到五点中点公式和五点端点公式：

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{12h}[f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)]$$
$$+ \frac{h^4}{39} f^{(5)}(\xi), \quad \xi \in [x_0 - 2h, x_0 + 2h]$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}[-25f(x_0) + 48f(x_0 + h) - 36f(x_0 + 2h) + 16f(x_0 + 3h)$$
$$-3f(x_0 + 4h)] + \frac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi), \quad \xi \in [x_0, x_0 + 4h]$$

样条插值数值微分

把离散点按大小排列成 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$，用 m 关系式构造插值点

$(x_i, f(x_i)), i = 0,1,2,\cdots,n$ 的样条函数 $S(x)$，

$$S(x) = \left(1 - 2\frac{x - x_i}{x_{i1} - x_{i+1}}\right)\left(\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}\right)^2 y_i + (x - x_i)\left(\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}\right)^2 m_i$$
$$+ \left(1 - 2\frac{x - x_{i+1}}{x_{i+1} - x_i}\right)\left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right)^2 y_{i+1} + (x - x_{i+1})\left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right)^2 m_{i+1}$$

若 $x = x_i$，则 $f\ '(x_i) = m_i$ ； 当 $x \in (x_i, x_{i+1})$ 时，可用 $S\ (x) \approx f\ (x)$ 计算导数。

2.2 数值积分

在微积分中，定积分是黎曼(Riemann)和的极限，它是分割小区间趋于零时的极限，即

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\Delta x_i \to 0}(\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)\Delta x_i)$$

记 $I(f)=\int_a^b f(x)dx$ ，$\boxed{I_n(f)=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i f(x_i)}$

在本章中，用 $I(f)$ 表示精确积分值，用 $I_n(f)$ 表示近似积分值，$\{x_i\}$ 称为求积节点，α_i 称为求积系数，**确定 $I_n(f)$ 中积分系数 α_i 的过程就是构造数值积分公式的过程**。

怎样判断数值积分公式的效果？代数精度是衡量数值积分公式优劣的重要标准之一。

代数精度

记 $[a,b]$ 上以 $x_i,\ i=0,1,\cdots,n$ 为积分节点的数值积分公式为 $I_n(f)=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i f(x_i)$

若 $I_n(f)$ 满足 $\boxed{E_n(x^k)=I(x^k)-I_n(x^k)=0,\quad k=0,1,\cdots,m \text{ 而 } E_n(x^{m+1})\neq 0\text{，}}$ 则称 $I_n(f)$ 具有 **m 阶代数精度**。由此可知当 $I_n(f)$ 具有 m 阶代数精度时，对任意的不高于 m 次多项式 $f(x)$ 都有 $I(f)=I_n(f)$。

[编者注：在求数值积分的余项时，要先计算其代数精度，常用方法是：分别带入 $1,x,x^2$，对比等式两边，看是否精确相等。进而确定泰勒展开的阶数：泰勒展开阶数=代数精度数]

2.2.1 插值型数值积分

对给定的被积函数在 $[a,b]$ 上的点列 $(x_i,f(x_i))\quad i=0,1,\cdots,n$，作拉格朗日插值多项式 $L_n(x)$，以 $\int_a^b L_n(x)dx$ 近似 $\int_a^b f(x)dx$ ，即

$$\int_a^b f(x)dx\approx\int_a^b L_n(x)dx=\int_a^b\sum_{i=0}^{n}\ell_i(x)f(x_i)dx=\sum_{i=0}^{n}\left[\int_a^b\ell_i(x)dx\right]f(x_i)$$

$\boxed{\text{记 }\alpha_i=\int_a^b\ell_i(x)dx\ \text{，则有 } I_n(f)=\int_a^b L_n(x)dx=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i f(x_i)}$ [积分系数是对基函数的积分]

数值积分误差，也就是对插值误差的积分值

$$\boxed{E_n(f)=\int_a^b R_n(x)dx=\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)dx}$$

或 $E_n(f)=\int_a^b f(x_0,x_1,\cdots,x_n,x)\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)dx$

对一般的函数 $E_n(f)\neq 0$，但若 $f(x)$ 是一个不高于 n 次的多项式，由于 $f^{(n+1)}(x)=0$，而有 $E_n(f)=0$。因此，n 阶插值多项式型式的数值积分公式至少有 n 阶代数精度。

例 建立 $[0,2]$ 上以节点 $x_0=0,x_1=0.5,x_2=2$ 的 $\int_a^b f(x)dx$ 数值积分公式

解　由 $\alpha_i = \int_a^b \ell_i(x)dx$　得　$\alpha_0 = \int_0^2 \ell_0(x)dx = \int_0^2 \frac{(x-0.5)(x-2)}{(0-0.5)(0-2)}dx = -\frac{1}{3}$

$$\alpha_1 = \int_0^2 \ell_1(x)dx = \int_0^2 \frac{(x-0)(x-2)}{(0.5-0)(0.5-2)}dx = \frac{16}{9} \quad \alpha_2 = \int_0^2 \ell_2(x)dx = \int_0^2 \frac{(x-0)(x-0.5)}{(2-0)(2-0.5)}dx = \frac{5}{9}$$

得到　$I_2(f) = \frac{1}{9}\left[-3f(0) + 16f(0.5) + 5f(2)\right]$

2.2.2 牛顿-柯特斯（Newton-Cote's）积分　[等距积分]

对积分区间$[a,b]$n 等分，记步长为$h = \frac{b-a}{n}$，取等分点$x_i = a + ih \quad (i = 0,1,\cdots,n)$，作为数值积分节点，构造拉格朗日插值多项式$L_n(x)$，取$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b L_n(x)dx$。由此得到的数值积分称为**牛顿-柯特斯积分**。**（牛顿-柯特斯积分系数和积分节点以及积分区间无直接关系，系数固定而易于计算。）**

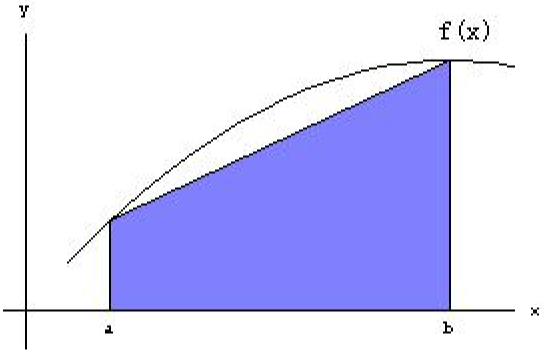
梯形积分　[n=1 的等距分布]

以$(a,f(a))$和$(b,f(b))$为插值节点构造的线性函数$L_1(x)$，有$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b L_1(x)dx$

则，$\int_a^b L_1(x)dx = \int_a^b (l_0(x)f(x_0) + l_1(x)f(x_1))dx = \int_a^b l_0(x)dxf(x_0) + \int_a^b l_1(x)dxf(x_1)$

$$\alpha_0 = \int_a^b l_0(x)dx = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}dx = \frac{1}{2}(b-a) = (b-a)C_0^{(1)}$$
$$\alpha_1 = \int_a^b l_1(x)dx = \int_a^b \frac{x-a}{b-a}dx = \frac{1}{2}(b-a) = (b-a)C_1^{(1)}$$

提取公因子$(b-a)$后，得到 Newton-Cote's 的积分组合系数 $C_0^{(1)} = \frac{1}{2}$，$C_1^{(1)} = \frac{1}{2}$，它们已与积分区间没有任何关系了。$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right]$，记$T(f) = \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right]$，称$T(f)$为**梯型积分公式**。它的几何意义是用梯形面积近似代替积分值。



取$f(x) = x$时，$I(f) = \int_a^b x\ dx = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)) = \frac{b^2 - a^2}{2} = T(f)$

取$f(x) = x^2$时，$I(f) = \int_a^b x^2 dx \neq \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)) = T(f)$

得梯形求积公式具有一阶代数精度。

由 $f(x)=L_1(x)+\frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b),\qquad a\le\xi\le b$ 得 $E_1(x)=\int_a^b\frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)dx$

∵ $(x-a)(x-b)$ 在 $\left[a,b\right]$ 上不变号，

∵ 由**第二积分中值定理**得到梯形求积公式的截断误差：

$$E_1(x)=\frac{f''(\eta)}{2!}\int_a^b(x-a)(x-b)dx=-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3,\quad a\le\eta\le b$$

辛普森（Simpson）积分　　[n=2 的等距分布]

对区间 $[a,b]$ 作二等分，记 $x_0=a,x_1=(a+b)/2,x_2=b$

以 $(a,f(a)),((a+b)/2,f((a+b)/2))$ 和 $(b,f(b))$ 为插值节点构造的二次插值函数 $L_2(x)$ 。

$$\int_a^b L_2(x)dx=\int_a^b(l_0(x)f(x_0)+l_1(x)f(x_1)+l_2(x)f(x_2))dx$$

$$\alpha_0=\int_a^b l_0(x)dx=\int_a^b\frac{(x-\frac{a+b}{2})(x-b)}{(a-\frac{a+b}{2})(a-b)}dx=\frac{1}{6}(b-a)\ =(b-a)c_0^{(2)}$$

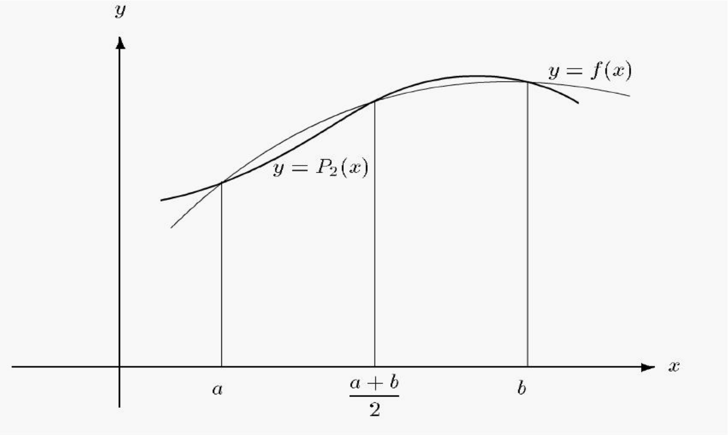
$$\alpha_1=\int_a^b l_1(x)dx=\frac{4}{6}(b-a)=(b-a)c_1^{(2)},\qquad \alpha_2=\int_a^b l_2(x)dx=\frac{1}{6}(b-a)\ =(b-a)c_2^{(2)}$$

计算得到积分组合系数： $c_0^{(2)}=\frac{1}{6},c_1^{(2)}=\frac{4}{6},c_2^{(2)}=\frac{1}{6},$

$$\int_a^b f(x)dx\approx I_2(f)=S(f)=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$$

称 $S(f)$ 为**辛普森**（Simpson）**或抛物线积分公式**。

它的几何意义是用过 3 点的抛物线面积近似代替积分的曲边面。



分别将 $f(x)=1,x,x^2,x^3$ 代入到 $I(f)$ 和 $S(f)$ 中，可以得到 $I(f)$ 和 $S(f)$ 相等，表明 Simpson 公式对于次数不超过三次的多项式准确成立， $S(f)$ 具有**三阶代数精度** 。

关于牛顿-柯特斯积分误差，这里不加证明给出如下结果：

(1).若 n 为奇数，$f\in C^{n+1}[a,b]$，则有

$$E_n(f)=\frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)dx$$

即积分公式有 n 阶代数精度。

(2).若 n 为偶数，$f\in C^{n+2}[a,b]$，则有

$$E_n(f)=\frac{f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\int_a^b x(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)dx$$

即积分公式具有 n+1 阶代数精度。

例如：梯形公式：$T(f)=\frac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right]$

误差: $E_1(x)=\frac{f''(\eta)}{2!}\int_a^b (x-a)(x-b)dx=-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$， $a\le\eta\le b$,具有一阶代数精度

Simpson 公式：$S(f)=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$ 若 $f\in C^4[a,b]$，

则误差 $E_2(f)=\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b x(x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)dx=-\frac{f^{(4)}(\eta)}{2880}(b-a)^5$， $a\le\eta\le b$

证明：

$$f(a),f\left(\frac{a+b}{2}\right),f'\left(\frac{a+b}{2}\right),f(b)\Rightarrow P_3(x)$$

$$I(P_3(x))=S(P_3(x))$$

$$\int_a^b (S(x)-P_3(x))dx=0$$

$$\begin{aligned}E(f)&=\int_a^b (f(x)-S(x))dx=\int_a^b (f(x)-P_3(x)+P_3(x)-S(x))dx\\&=\int_a^b (f(x)-P_3(x))dx+\int_a^b (P_3(x)-S(x))dx\\&=\int_a^b (f(x)-P_3(x))dx=\int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)dx=-\frac{f^{(4)}(\eta)}{2880!}(b-a)^5\end{aligned}$$

$$\int_a^b (x-a)^2(x-\frac{a+b}{2})(x-b)dx=\int_a^b (x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)dx$$

$$=\int_a^b (x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)^2dx=\int_a^b x(x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)dx$$

$$\int_a^b (x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)dx=0$$

Newton-Cotes 系数表

n	$c_0^{(n)}$	$c_1^{(n)}$	$c_2^{(n)}$	$c_3^{(n)}$	$c_4^{(n)}$	$c_5^{(n)}$	$c_6^{(n)}$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$					
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$				
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$			
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$		
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$	
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$

$$\sum_{i=0}^{n} C_i = 1$$

Newton-Cote’s 积分系数

n 等分$[a,b]$区间，取等分点为积分节点， $x_i = a+ih, i=0,1,\cdots,n.$ 其中 $h=\frac{b-a}{n}$，

以$(x_i, f(x_i)), i=0,1,2,\cdots,n$ 为插值节点构造的插值函数 $L_n(x)$ 。

$$\int_a^b L_n(x)dx = \int_a^b \left(\sum_{i=0}^{n} l_i(x)f(x_i)\right)dx = \sum_{i=0}^{n}\left(\int_a^b l_i(x)dx\right)f(x_i) = \sum_{i=0}^{n}\alpha_i f(x_i)$$

其中 $\alpha_i = \int_a^b \ell_i(x)dx = \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}dx$

令 $x=a+th, x_i=a+ih$ 代入 α_i 得

$$\alpha_i = \int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)}{i!(n-i)!(-1)^{n-i}}hdt$$

$$= \frac{(b-a)}{n}\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-1)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)dt = (b-a)C_i^{(n)}$$

称 $c_i^{(n)} = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)dt$ 为 Newton-Cote’s 系数。可以得知它与 x 无关而与 n 有关。

补充习题：1.证明当 N-C 积分系数 $C_i^{(n)} > 0, (i=0,1,2...n, n\le 7)$，数值积分公式是稳定的。

2. 3 复化数值积分

2.3.1 复化梯形积分

计算公式

对$[a,b]$作等距分割，有 $h=\frac{b-a}{n}$， $x_i = a+ih$,$i=0,1,\cdots,n$ ，

于是 $I(f)=\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$

在$[x_i,x_{i+1}]$上，$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)=\frac{h}{2}[f(x_i)+f(x_{i+1})]-f''(\xi_i)\frac{h^3}{12}$，则有

$$\begin{aligned}I(f)&=\sum_{i=0}^{n-1}\left\{\frac{h}{2}[f(x_i)+f(x_{i+1})]-f''(\xi_i)\frac{h^3}{12}\right\}\\&=h\left[\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+\frac{1}{2}f(b)\right]-\sum_{i=0}^{n-1}f''(\xi_i)\frac{h^3}{12}\end{aligned}$$

记 n 等分的复化梯形公式为$T_n(f)$或$T(h)$，有

$$\boxed{T(h)=T_n(f)=h\left[\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)+\frac{1}{2}f(b)\right]}$$

截断误差

由 $E_n(f)=I(f)-T_n(f)=-\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\xi_i)$ ，

根据均值定理，当 $f\in C^2[a,b]$ 时，存在 $\xi\in[a,b]$,有 $\sum_{i=0}^{n-1}f''(\xi_i)=nf''(\xi)$

nh=(b-a)

于是 $E_n(f)=-\frac{nh^3}{12}f''(\xi)=\boxed{-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi)}=-\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi),\quad a\le\xi\le b$

2.3.2 复化 Simpson 积分

把积分区间分成偶数$2m$等分，记$n=2m$，其中$n+1$是节点总数，m是积分子区间的总数。

记$\boxed{h=\frac{b-a}{n}}$, $x_i=a+ih$,$i=0,1,\cdots,n$，在每个子区间$[x_{2i},x_{2i+2}]$上用 Simpson 数值积分公式计算，则得到**复化 Simpson 公式**，记为$S_n(f)$。

注意区间的分割方法！区间端点、区间长度应与公式匹配。例如对于这里给出的分割方法，积分区间长度就是 2h

计算公式

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=0}^{m-1}\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx$$

而 $\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx=\frac{2h}{6}[f(x_{2i})+4f(x_{2i+1})+f(x_{2i+2})]-\frac{(2h)^5}{2880}f^{(4)}(\zeta_i)$

$$\boxed{S_n(f)=\sum_{i=0}^{m-1}\frac{2h}{6}[f(x_{2i})+4f(x_{2i+1})+f(x_{2i+2})]=\frac{h}{3}\left[f(a)+4\sum_{i=0}^{m-1}f(x_{2i+1})+2\sum_{i=1}^{m-1}f(x_{2i})+f(b)\right]}$$

截断误差

设 $f \in C^4[a,b]$, 在$[x_{2i}, x_{2i+1}]$上的误差为$-\dfrac{(2h)^5}{2880} f^{(4)}(\xi_i),\ x_{2i} \le \zeta_i \le x_{2i+2}$

因此$I(f) - S_n(f) = -\dfrac{(2h)^5}{2880} \sum\limits_{i=0}^{m-1} f^{(4)}(\xi_i) = -\dfrac{(2h)^5 m}{2880} f^{(4)}(\xi)$

$$\begin{aligned} &= \frac{-(b-a)^5}{2880m^4} f^{(4)}(\xi) = \frac{-(b-a)^5}{180n^4} f^{(4)}(\xi) \\ &= -\frac{(b-a) f^{(4)}(\xi)}{180} h^4 = O(h^4) \end{aligned} \quad ,\ a \le \xi \le b$$

与复化梯形公式类似，**误差的截断误差按照h^4或说$\dfrac{1}{n^4}$的下降速度下降**，可以证明，只要$f(x)$在(a,b)上有界并黎曼可积，当分点无限增多时，复化 Simpson 公式收敛到积分$I(f) = \int_a^b f(x)dx$ 。

记 $M_4 = \max\limits_{a \le x \le b} \left| f^{(4)}(x) \right|$，则有$\left| E_n(f) \right| \le \dfrac{(b-a)^5}{2880m^4} M_4 = O(\dfrac{1}{m^4})$

对任给误差控制小量 ε>0，只要$\dfrac{(b-a)^5}{2880m^4} M_4 <$ ε或$m \ge \left[\sqrt[4]{\dfrac{(b-a)^5 M_4}{2880\varepsilon}} \right] + 1$就有 $\left| E_n(f) \right| <$ ε.

例 $I(f) = \int\limits_0^1 e^x dx$，计算中要求有保留 4 位小数。用复化梯形和复化 Simpson 求积公式的分点应取多少？

解 $f(x) = e^x$ ， $f''(x) = f^{(4)}(x) = e^x$， $\left| f'(x) \right| = \left| f^{(4)}(x) \right| \le e$ ， $0 \le x \le 1$

由复化梯形误差公式得到：

$$\left| I(f) - T_n(f) \right| \le \frac{(b-a)^3}{12n^2} M_2 = \frac{1}{12n^2} e \le \frac{1}{2} 10^{-4}$$

计算出 n = 67.3，复化梯形公式至少要在[0, 1]等份 n=68。

由复化 Simpson 误差公式，有 $\left| I(f) - S_n(f) \right| \le \dfrac{1}{2880m^4} e \le \dfrac{1}{2} 10^{-4}$

在复化 Simpson 中取 $m = \left[\dfrac{3}{2} \right] + 1 = 2$ 或 $n = 4$。

2.3.3 复化积分的自动控制误差算法

$T_{2n}(f)$ 的计算公式

一般地，每次总对前一次的小区间分半，分点加密一倍，并可充分利用老分点上的函数值，只需计算新增分点的和。

对$[a,b]$上 n 等分，$h_n=\frac{b-a}{n}$。 $T_n(f)=h_n[\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_n)+\frac{1}{2}f(b)]$

记$[x_i,x_{i+1}]$上的中点为$x_{i+\frac{1}{2}}$，则

$$T_{2n}(f)=\frac{h_n}{2}\left[\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+\frac{1}{2}})+\frac{1}{2}f(b)\right]$$

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

$$T_{2n}(f)=\frac{1}{2}[T_n(f)+H_n(f)],\qquad 其中\ \ H_n(f)=h_n\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+\frac{1}{2}})$$

这里的 n 相当于前面的 m

或 $T_{2n}=\frac{T_n}{2}+h_{2n}\sum_{i=1}^{n}f(a+(2i-1)h_{2n})$ 其中 $h_{2n}=\frac{b-a}{2n}$

这里的 n 相当于前面的 n

类似地，可得积分节点为 n，2n 的 Simpson 求积公式的关系 ［自己推导一下咯！］

$$\boxed{S_{2n}(f)=\frac{1}{2}S_n(f)+\frac{1}{6}(4H_{2n}(f)-H_n(f))}$$

$\boxed{|T_{2n}(f)-T_n(f)|\text{与}|I(f)-T_{2n}(f)|}$

由误差公式

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

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

由于 $f''(\xi)=\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\xi_i)$, $f''(\eta)=\frac{1}{2n}\sum_{i=0}^{2n-1}f''(\eta_i)$, 分别为 n 及 2n 个点的均值，如果假定

$f''(\xi)\approx f''(\eta)$，则有 $I(f)-T_n(f)\approx 4[I(f)-T_{2n}(f)]$ 或 $I(f)-T_{2n}(f)\approx\frac{1}{3}[T_{2n}(f)-T_n(f)]$

由此得到启发，对任给的误差控制量 $\varepsilon>0$，要 $|I(f)-T_{2n}(f)|<\varepsilon$，只需

$|T_{2n}(f)-T_n(f)|<3\varepsilon$ 即可，而用 $|T_{2n}(f)-T_n(f)|$ 作为精度控制方法简单直接。

[可以推导下复化 Simpson 公式]

2.3.4 龙贝格 (Romberg)积分

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

其结果是将梯型求积公式组合成 Simpson 求积公式了。截断误差由 $O(h^2)$ 提高到 $O(h^4)$

了。这种手段称为**外推算法**。外推算法可以在不增加计算量的前题下提高了误差的精度。

对 $S_{2n}(f)$，$S_n(f)$ 再做一次线性组合。

$$I(f)-S_n(f)=-\frac{f^{(4)}(\xi)}{180}(b-a)h^4\approx dh^4$$

$$I(f)-S_{2n}(f)=-\frac{f^{(4)}(\eta)}{180}(b-a)\left(\frac{h}{2}\right)^4\approx d\left(\frac{h}{2}\right)^4$$

得到

$$I(f)-S_{2n}(f)\approx\frac{1}{15}(S_{2n}(f)-S_n(f))$$

$$I(f)\approx\frac{16}{15}S_{2n}(f)-\frac{1}{15}S_n(f)=C_n(f)$$

复化 Simpson 公式组成复化柯特斯公式，其截断误差是 $O\left(h^6\right)$，同理对柯特斯公式进行线性组合：

$$I(f)=C_n(f)=eh^6 \qquad I(f)-C_{2n}(f)=e(\frac{h}{2})^6$$

得到具有 7 次代数精度和截断误差是 $O(h^8)$ 的龙贝格公式：

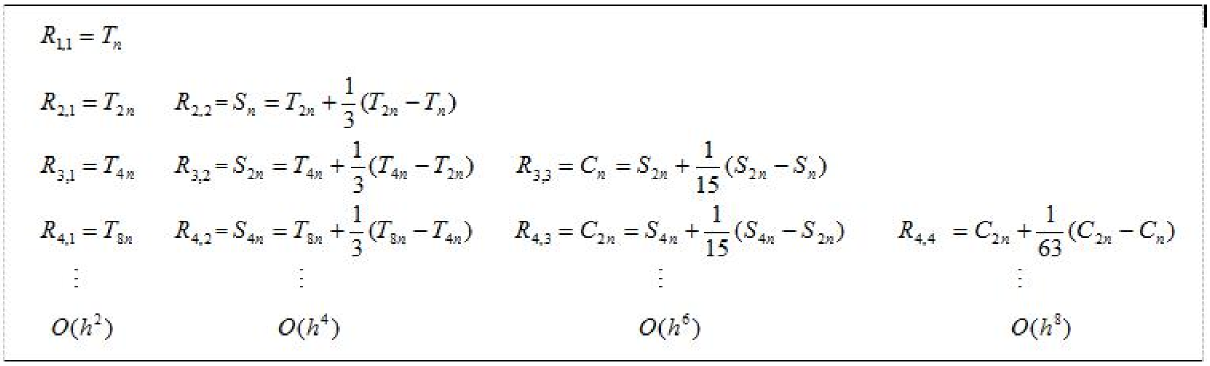
$$R_n(f)=\frac{64}{63}C_{2n}(f)-\frac{1}{63}C_n(f)$$

还可以继续对 $R_n(f)$ 做下去。

为了便于在计算机上实现龙贝格(Rombesg)算法，将 T_n, S_n, C_n, R_n …统一用 $R_{k,j}$ 表示，列标 $j=1,2,\cdots$ 分别表示梯形、辛普森、柯特斯积分，行标 k 表示分点数 $n2^{k-1}$ 或步长 $h_k={}^{h}\!/_{2^{k-j}}$。

龙贝格计算公式：$\boxed{R_{k,j}=R_{k,j-1}+\frac{R_{k,j-1}-R_{k-1,j-1}}{4^{j-1}-1},k=2,3,\cdots}$

对每一个 k,j 从 2 做到 k，一直做到 $\left|R_{k,k}-R_{k-1,k-1}\right|$ 小于给定控制精度时停止计算。



$$\begin{array}{llll}
R_{1,1}=T_n & & & \\
R_{2,1}=T_{2n} & R_{2,2}=S_n=T_{2n}+\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n) & & \\
R_{3,1}=T_{4n} & R_{3,2}=S_{2n}=T_{4n}+\frac{1}{3}(T_{4n}-T_{2n}) & R_{3,3}=C_n=S_{2n}+\frac{1}{15}(S_{2n}-S_n) & \\
R_{4,1}=T_{8n} & R_{4,2}=S_{4n}=T_{8n}+\frac{1}{3}(T_{8n}-T_{4n}) & R_{4,3}=C_{2n}=S_{4n}+\frac{1}{15}(S_{4n}-S_{2n}) & R_{4,4}=C_{2n}+\frac{1}{63}(C_{2n}-C_n) \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
O(h^2) & O(h^4) & O(h^6) & O(h^8)
\end{array}$$

2.4 重积分计算

为了简化问题，我们仅讨论矩形域上的二重积分 $\int_a^b\int_c^d f(x,y)dxdy$.

其中：a,b,c,d 是常数，$f(x,y)$ 在 D 上连续。

象在微积分中一样，将二重积分化为累次积分

$$\int_a^b\int_c^d f(x,y)dxdy=\int_a^b\left(\int_c^d f(x,y)dy\right)dx \quad 或 \quad \int_a^b\int_c^d f(x,y)dxdy=\int_c^d\left(\int_a^b f(x,y)dx\right)dy$$

二重积分的复化梯形公式

对区间$[a,b]$和$[c,d]$分别选取正整数 m 和 n，在 X 轴和 Y 轴上分别有步长

$$\boxed{h=\frac{b-a}{m},\quad k=\frac{d-c}{n}}$$

用复化梯形公式计算 $\int_c^d f(x,y)dy$，计算中将 x 当作常数，有

$$\int_c^d f(x,y)dy\approx k\left[\frac{1}{2}f(x,y_0)+\frac{1}{2}f(x,y_n)+\sum_{j=1}^{n-1}f(x,y_j)\right]$$

再将 y 当作常数，在 x 方向上计算上式中每一项的的积分，有

$$\frac{1}{2}\int_a^b f(x,y_0)dx\approx\frac{h}{2}\left[\frac{1}{2}f(x_0,y_0)+\frac{1}{2}f(x_m,y_0)+\sum_{i=1}^{m-1}f(x_i,y_0)\right]$$

$$\frac{1}{2}\int_a^b f(x,y_n)dx\approx\frac{h}{2}\left[\frac{1}{2}f(x_0,y_n)+\frac{1}{2}f(x_m,y_n)+\sum_{i=1}^{m-1}f(x_i,y_n)\right]$$

$$\int_a^b\sum_{j=1}^{n-1}f(x,y_j)dx=\sum_{j=1}^{n-1}\int_a^b f(x,y_j)dx\approx h\sum_{j=1}^{n-1}\left[\frac{1}{2}f(x_0,y_j)+\frac{1}{2}f(x_m,y_j)+\sum_{i=1}^{m-1}f(x_i,y_j)\right]$$

$$=h\sum_{j=1}^{n-1}\left[\frac{1}{2}f(x_0,y_j)+\frac{1}{2}f(x_m,y_j)\right]+h\sum_{j=1}^{n-1}\sum_{i=1}^{m-1}f(x_i,y_j)$$

则 $$\int_a^b\int_c^d f(x,y)dxdy\approx hk\{\frac{1}{4}[f(x_0,y_0)+f(x_m,y_0)+f(x_0,y_n)+f(x_m,y_n)]$$

$$+\frac{1}{2}[\sum_{i=1}^{m-1}f(x_i,y_0)+\sum_{i=1}^{m-1}f(x_i,y_n)+\sum_{j=1}^{n-1}f(x_0,y_j)+\sum_{j=1}^{n-1}f(x_m,y_j)]$$

$$+\sum_{i=1}^{m-1}\sum_{j=1}^{n-1}f(x_i,y_j)\}\boxed{=hk\sum_{i=0}^{m}\sum_{j=0}^{n}c_{i,j}f(x_i,y_j)}$$

$$E(f)=-\frac{(d-c)(b-a)}{12}\left(h^2\frac{\partial^2 f(\eta,\mu)}{\partial x^2}+k^2\frac{\partial^2 f(\bar{\eta},\bar{\mu})}{\partial y^2}\right)$$

积分区域的 4 个角点的系数是 1/4，4 个边界的系数是 1/2，内部节点的系数是 1。

例　用复化梯形计算二重积分 $\int_0^1\int_1^2\sin(x^2+y)dxdy$，取 $h=k=0.25$ 。

解　$f(x,y)$ 如下表所示：

y x	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00
0.00	0.841471	0.948985	0.997495	0.983986	0.909297
0.25	0.873575	0.966827	0.999966	0.970932	0.88153
0.50	0.948985	0.997495	0.983986	0.909297	0.778073
0.75	0.999966	0.970932	0.88153	0.737319	0.547265
1.00	0.909297	0.778073	0.598472	0.381661	0.14112

系数 c_{ij} 列表如下：

I J	0	1	2	3	4
0	1/4	1/2	1/2	1/2	1/4
1	1/2	1	1	1	1/2
2	1/2	1	1	1	1/2
3	1/2	1	1	1	1/2
4	1/4	1/2	1/2	1/2	1/4

$$\int_0^1\int_1^2 \sin(x^2+y)dxdy = 0.25 * 0.25[\frac{1}{4}(0.841471+0.909297+0.909297+0.14112)+\frac{1}{2}(0.948985+$$

$$0.997495+0.983986\text{）}+\frac{1}{2}(0.778073+0.598472+0.381661)+\frac{1}{2}(0.873575+0.948985+0.999966)$$

$$+\frac{1}{2}(0.88153+0.778073+0.547265)+(0.966827+0.999966+0.970932+0.997495+0.983986+$$

$0.909297 + 0.970932 + 0.88153 + 0.737319)] = 1.84375$　　准确值是 1.833333.

补充：复化 Simpson 计算二重积分的积分系数列表如下

$w_{i,j}$	**0**	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**
0	**1**	**4**	**2**	**4**	**2**	**4**	**2**	**4**	**1**
1	**4**	16	8	16	8	16	8	16	**4**
2	**2**	8	4	8	4	8	4	8	**2**
3	**4**	16	8	16	8	16	8	16	**4**
4	**2**	8	4	8	4	8	4	8	**2**
5	**4**	16	8	16	8	16	8	16	**4**
6	**1**	**4**	**2**	**4**	**2**	**4**	**2**	**4**	**1**

[注：Simpson 积分系数为边界点乘积]

$$\int_a^b\int_c^d f(x)dxdy = \frac{hk}{9}\sum_{i=0}^{m}\sum_{j=0}^{n} w_{i,j} f(x_i,y_j) \qquad E(f) = -\frac{(d-c)(b-a)}{180}\left(h^4\frac{\partial^4 f(\eta,\mu)}{\partial x^4}+k^4\frac{\partial^4 f(\overline{\eta},\overline{\mu})}{\partial y^4}\right)$$

*2.5 高斯(Gauss)型积分

$I(f)=\int_a^b f(x)dx$ 关于积分节点 $x_0,x_1,\ldots,x_n$ 的数值积分公式为 $I_n(f)=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i f(x_i)$，它至少有 n 阶代数精度，精度的具体阶数决定于积分节点的选取，而数值积分的误差为：

$$E_n(f)=I(f)-I_n(f)=\int_a^b f[x_0,x_1,\dots,x_n,x](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)dx$$

本节积分节点数采用 n 个，即 $x_1,x_2,\dots,x_n$，则 $I(f)$ 关于 $x_1,x_2,\dots,x_n$ 的数值积分公式 $I_n(f)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i f(x_i)$ 至少有 n-1 阶代数精度。我们要提出的第一个问题是：具有 n 个积分节点 $x_1,x_2,\dots,x_n$ 的数值积分公式最高能达到多少阶代数精度。

定理 2.1 $I(f)=\int_a^b f(x)dx$ 关于积分节点 $x_1,x_2,\dots,x_n$ 的数值积分公式 $I_n(f)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i f(x_i)$ 的代数精度不超过 2n-1 阶。[起始积分节点与精度表达式要匹配！]

证明 取 2n 次多项式 $f(x)=(x-x_1)^2(x-x_2)^2\cdots(x-x_n)^2$，则有

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx>0$$

而 $$I_n(f)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i f(x_i)=0$$

故数值积分公式 $I_n(f)$ 的代数精度不可能达到 2n 阶。

定理 2.2 对 $I(f)=\int_{-1}^{1} f(x)dx$，若选取正交多项式 $L_n(x)$ 的 n 个零点 $x_1^{(n)},x_2^{(n)},\dots,x_n^{(n)}$ 为数值积分节点，则其数值积分公式 $I_n(f)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^{(n)} f(x_i^{(n)})$ 具有 2n-1 阶代数精度。

2.5.1 勒让德(Legendre)多项式

n 次多项式 $\boxed{L_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n}$ 称为 Legendre 多项式，$\{L_n(x)\}$ 为[-1，1]上的正交多项式系，即 $\boxed{(L_n(x),L_m(x))=\int_{-1}^{1}L_n(x)L_m(x)dx=0,m\neq n}$

关于 $L_n(x)$，它具有如下性质：

(1) $L_n(x)$ 在（-1，1）上有 n 个相异的实根 $x_1^{(n)},x_2^{(n)},\dots,x_n^{(n)}$。

(2) $L_n(x)$ 在[-1，1]上正交于任何一个不高于 n-1 次的多项式，即若 $P(x)$ 为一个不高于 n-1 次的多项式，则

$$(L_n(x),P(x))=\int_{-1}^{1}L_n(x)P(x)dx=0$$

2.5.2 Gauss-Legendre 积分

对于$I(f)=\int_a^b f(x)dx$，由定理 2.1，具有 n 个节点的数值积分公式的代数精度不超过 2n-1 阶，若其数值积分节点$x_1,x_2,...,x_n$可自由选取，那么其数值积分公式的代数精度是否能达到 2n-1 阶，回答是肯定的。

定理 2.2 对$I(f)=\int_{-1}^{1}f(x)dx$，若选取勒让德多项式$L_n(x)$的 n 个零点$x_1^{(n)},x_2^{(n)},...,x_n^{(n)}$为数值积分节点，则其数值积分公式 $I_n(f)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^{(n)}f(x_i^{(n)})$ 具有 2n-1 阶代数精度。

证明 计算数值积分误差

$$E_n(f)=\int_{-1}^{1}f[x_1^{(n)},x_2^{(n)},...,x_n^{(n)},x](x-x_1^{(n)})(x-x_2^{(n)})\cdots(x-x_n^{(n)})dx$$

若$f(x)$为一个不高于 2n-1 阶的多项式，由差商性质 3，n 阶差商函数$f[x_1^{(n)},x_2^{(n)},...,x_n^{(n)},x]$为一个不高于 n-1 次的多项式，注意到$(x-x_1^{(n)})(x-x_2^{(n)})\cdots(x-x_n^{(n)})$与$L_n(x)$仅差一个常数，于是由$L_n(x)$的性质 2， $E_n(f)=0$ 。即对于任何不高于 2n-1 次多项式$f(x)$,数值积分公式都是精确的。

具有 n 个积分节点，代数精度为 2n-1 阶的数值积分，称为 Gauss 积分，记为$G_n(f)$，即$[-1,1]$上的 Gauss 积分公式为：$\boxed{G_n(f)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^{(n)}f(x_i^{(n)})}$ 其中，$x_1^{(n)},x_2^{(n)},...,x_n^{(n)}$为$L_n(x)$的 n 个零点，

而 $\alpha_i^{(n)}=\int_{-1}^{1}\frac{(x-x_1^{(n)})\cdots(x-x_{i-1}^{(n)})(x-x_{i+1}^{(n)})\cdots(x-x_n^{(n)})}{(x_i^{(n)}-x_1^{(n)})\cdots(x_i^{(n)}-x_{i-1}^{(n)})(x_i^{(n)}-x_{i+1}^{(n)})\cdots(x_i^{(n)}-x_n^{(n)})}dx$

例 $G_2(f)=\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx\alpha_1f(x_1)+\alpha_2f(x_2)$

法 1：
$$\begin{cases}I(1)=\int_{-1}^{1}1dx=2,\quad G_2(1)=\alpha_1 1+\alpha_2 1=2\\ I(x)=\int_{-1}^{1}xdx=0,G_2(x)=\alpha_1x_1+\alpha_2x_2=0\\ I(x^2)=\int_{-1}^{1}x^2dx=\frac{2}{3},G_2(x^2)=\alpha_1x_1{}^2+\alpha_2x_2{}^2=\frac{2}{3}\\ I(x^3)=\int_{-1}^{1}x^3dx=0,G_2(x^3)=\alpha_1x_1{}^3+\alpha_2x_2{}^3=0\end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \alpha_1 = \alpha_2 = 1,\, x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} = -0.5773503,\, x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} = 0.5773503$$

法 2：

$t_0(x) = 1$

$$t_1(x) = x - \frac{(x, t_0(x))}{(t_0(x), t_0(x))} t_0(x) = x - \frac{\int_{-1}^{1} 1 \cdot x dx}{\int_{-1}^{1} 1^2 dx} \cdot 1 = x$$

$$t_2(x) = x^2 - \frac{(x^2, t_0(x))}{(t_0(x), t_0(x))} t_0(x) - \frac{(x^2, t_1(x))}{(t_1(x), t_1(x))} t_1(x)$$

$$= x^2 - \frac{\int_{-1}^{1} 1 \cdot x^2 dx}{\int_{-1}^{1} 1^2 dx} \cdot 1 - \frac{\int_{-1}^{1} x^3 dx}{\int_{-1}^{1} x^4 dx} = x^2 - \frac{1}{3}$$

$$\Rightarrow \quad x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} = -0.5773503, x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} = 0.577350$$

$$\alpha_1 = \int_{-1}^{1} l_0(x) dx = \int_{-1}^{1} \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} dx = 1$$

$$\alpha_2 = \int_{-1}^{1} l_1(x) dx = \int_{-1}^{1} \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} dx = 1$$

Gauss 积分是高效数值积分公式，同时它具有良好的性质，例如其积分系数均大于 $0\,(\alpha_i^{(n)} > 0)$，故其高阶公式有很好的稳定性质。又如对于连续函数 $f(x)$，Gauss 积分序列 $G_1(f), G_2(f), \ldots, G_n(f), \ldots$ 收敛于 $I(f)$，这是一般数值积分序列所不具备的。

对于一般区间的积分 $I(f) = \int_a^b f(x) dx$，只需作线性变量代换，即可得到 Gauss 积分公式：

$$\boxed{G_n(f) = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^{(n)} f\left(\frac{(a+b) + (b-a) x_i^{(n)}}{2}\right)}$$

Gauss 积分的积分节点 $\{x_i^{(n)}\}$ 及积分系数 $\{\alpha_i^{(n)}\}$ 由下表列出：

n	$x_i^{(n)}$	$\alpha_i^{(n)}$	n	$x_i^{(n)}$	$\alpha_i^{(n)}$
1	0	2		±0.6612093865	0.3607615730
2	±0.5773502692	1		±0.2386191861	0.4679139346
3	±0.7745966692	0.5555555556	7	±0.9491079123	0.1294849662
	0	0.8888888889		±0.7415311856	0.2797053915
4	±0.8611363116	0.3478548451		±0.4058451514	0.3818300505
	±0.3399810436	0.6521451549		0	0.4179591837
5	±0.9061798459	0.2369268851	8	±0.9602898565	0.1012285363
	±0.5384693101	0.4786286705		±0.7966664774	0.2223810345
	0	0.5688888889		±0.5255324099	0.3137066459
6	±0.9324695142	0.1713244924		±0.1834346425	0.3626837834

例　应用两点 Guass-Legendre 积分公式计算

$$I = \int_{-1}^{1} x^2 \cos x dx$$

解　查表有 $x_1^{(2)}=-0.5773503$，$x_2^{(2)}=0.5773503$，$\alpha_1^{(2)}=\alpha_2^{(2)}=1$。

$$G_2(x^2\cos x)=(-0.5773503)^2\cos(-0.5773503)+(0.5773503)^2\cos(0.5773503)$$
$$=0.558608$$

例　应用三点 Gauss-Legendre 积分公式计算 $I(f)=\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos xdx$

解　查表有 $x_1^{(3)}=-0.774597, x_2^{(3)}=0, x_3^{(3)}=0.774597$

$$\alpha_1^{(3)}=0.555556, \alpha_2^{(3)}=0.888889, \alpha_3^{(3)}=0.555556$$

于是，$x_1=\dfrac{(-\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{2})+(\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{2})x_1^{(3)}}{2}=\dfrac{\pi}{2}x_1^{(3)}$，　$x_2=0,$　$x_3=\dfrac{\pi}{2}x_3^{(3)}$，

$$G_3(\cos x)=\frac{\pi}{2}[\alpha_1^{(3)}\cos(\frac{\pi}{2}x_1^{(3)})+\alpha_2^{(3)}\cos 0+\alpha_3^{(3)}\cos(\frac{\pi}{2}x_3^{(3)})]=2.001389$$

第 3 章　曲线拟合的最小二乘法

3.1 拟合曲线

插值 N(x)：认为给定的值都是准确的，必须过给定点。即给定 $(x_i,y_i), i=1,2,\dots,m$，有 $\| N(x_i)-Y\|=0$.

拟合 $\Phi(x)$：认为给定的点并不准确，只是尽可能靠近。

拟合函数 $\Phi(x)=\begin{pmatrix}\varphi(x_1)\\ \varphi(x_2)\\ \vdots\\ \varphi(x_n)\end{pmatrix}$，$Y=\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\\ \vdots\\ y_n\end{pmatrix}$，则 $\|\Phi(x)-Y\|=\left\|\begin{pmatrix}\varphi(x_1)-y_1\\ \varphi(x_2)-y_2\\ \vdots\\ \varphi(x_n)-y_n\end{pmatrix}\right\|$

$R_1=\sum_{i=1}^{m}|\varphi(x_i)-y_i|$　　$\boxed{\text{均方误差 } R_2^2=\sum_{i=1}^{m}|\varphi(x_i)-y_i|^2}$　　$R_\infty=\max_{1\le i\le m}|\varphi(x_i)-y_i|$

3.2 线性拟合和二次函数拟合

线性拟合

给定一组数据 $(x_i,y_i), i=1,2,\dots,m$ 做拟合直线 $p(x)=a+b(x)$,根据均方误差最小可以

求得拟合曲线法方程为 $\boxed{\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^{m}x_i\\ \sum_{i=1}^{m}x_i & \sum_{i=1}^{m}x_i^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sum_{i=1}^{m}y_i\\ \sum_{i=1}^{m}x_iy_i\end{pmatrix}}$，求出 a,b 即可。

二次函数拟合

给定一组数据$(x_i,y_i),i=1,2,...,m$做拟合直线$p(x)=a_0+a_1x+a_2x^2$,根据均方误差最小可求得拟合曲线法方程

$$\boxed{\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^{m}x_i & \sum_{i=1}^{m}{x_i}^2 \\ \sum_{i=1}^{m}x_i & \sum_{i=1}^{m}{x_i}^2 & \sum_{i=1}^{m}{x_i}^3 \\ \sum_{i=1}^{m}{x_i}^2 & \sum_{i=1}^{m}{x_i}^3 & \sum_{i=1}^{m}{x_i}^4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m}y_i \\ \sum_{i=1}^{m}x_iy_i \\ \sum_{i=1}^{m}{x_i}^2y_i \end{pmatrix}}$$

，求出a_0,a_1,a_2即可。

形如$y=ae^{bx}$的曲线拟合

法 1：进行线性变换后再进行线性拟合。其他类似的函数也可以通过线性变换后进行拟合。

法 2：解矛盾方程组方法求解。$\boxed{A^TA\alpha=A^TY}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ln a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

3.3 解矛盾方程组

具体描述见教材。

定理 3.1 (1)A 为 m 行 n 列的矩阵，b 为列向量。$\boxed{A^TA\alpha=A^TY}$称为矛盾方程组 AX=b 的法方程，法方程恒有解。

(2)X 是$\min\|AX-b\|_2^2$的解，当且仅当 X 满足$A^TA\alpha=A^TY$，即 X 是法方程的解。

具体证明与例题见教材。

第 4 章　非线性方程求根

4.1 实根的对分法

使用对分法的条件

设函数$f(x)$在$[a,b]$上连续，且$f(a)f(b)<0$，则$f(x)$在$[a,b]$上至少有一零点，这是微积分中的介值定理，也是使用对分法的前题条件。

特点：算法简单、收敛慢、有局限（只能求实根）

4.2 迭代法

对给定的方程$f(x)=0$，将它转换成等价形式：$x=\varphi(x)$。给定初值x_0，由此来构造迭代序列$x_{k+1}=\varphi(x_k),k=1,2,\ldots$；如果迭代收敛，$\lim\limits_{k->\infty}x_{k+1}=\lim\limits_{k->\infty}\varphi(x_k)=\alpha$，$\varphi(x)$连续，则有$\alpha=\varphi(\alpha)$，而$\alpha$就是方程$f(x)=0$的根。

例，代数方程$x^3-2x-5=0$的三种等价形式及其迭代格式

1) $x^3=2x+5$， $x=\sqrt[3]{2x+5}$；迭代格式： $x_{k+1}=\varphi_1(x_k)=\sqrt[3]{2x_k+5}$

2) $2x=x^3-5$ ，迭代格式：$x_{k+1}=\varphi_2(x_k)=\dfrac{x_k^3-5}{2}$

3) $x^3=2x+5$， $x=\dfrac{2x+5}{x^2}$ ，迭代格式： $x_{k+1}=\varphi_3(x_k)=\dfrac{2x_k+5}{x_k^2}$

对于方程$f(x)=0$构造的各种迭代格式$x_{k+1}=\varphi\ (x_k)$，

怎样判断构造的迭代格式是否收敛？收敛速度与那个量有关？收敛是否与迭代的初值有关？

定理 1：若 $\varphi(x)$定义在$[a,b]$上，如果$\varphi\ (x)$满足 1) 当$x\in[a,b]$时有 $\boxed{a\le\varphi\ (x)\le b}$；

2) $\varphi(x)$在$[a,b]$上可导，并且存在$\boxed{\text{正数}\,L<1}$，使对任意的$x\in[a,b]$，有$\left|\varphi'(x)\right|\le L$；则在$[a,b]$上有唯一的点$x^*$满足$x^*=\varphi(x^*)$，称$x^*$为$\varphi\ (x)$的**不动点**。而且迭代格式$x_{k+1}=\varphi\ (x_k)$ 对任意的初值$x_0\in[a,b]$均收敛于$\varphi(x)$的不动点x^*，并有误差估计式$\left|\ x^*-x_k\ \right|\le\dfrac{L^k}{1-L}\left|x_1-x_0\ \right|$

[编者注：如果$|\varphi'(x)|>1$，不能保证不收敛]

证明 （1） 令 $\psi(x)=x-\varphi(x)$，则有 $\psi(a)=a-\varphi(a)\le 0$，$\psi(b)=b-\varphi(b)\ge 0$

故有 $a\le x^*\le b$，使得 $\psi(x^*)=x^*-\varphi(x^*)=0$ 或 $x^*=\varphi(x^*)$

另一方面，若另有x^{**}满足$x^{**}=\varphi(x^{**})$，则由

$$|x^*-x^{**}|=|\varphi(x^*)-\varphi(x^{**})|=|\varphi'(\xi)(x^*-x^{**})|\le L\,|x^*-x^{**}|\qquad \xi\in[a,b]$$

以及 $L<1$，得到 $x^*=x^{**}$。 [不动点存在且唯一]

（2） 当$x_0\in[a,b]$时可用归纳法证明，迭代序列$\{x_k\}\subset[a,b]$，

由中值定理$x_{k+1}-x^*=\varphi(x_k)-\varphi(x^*)=\varphi'(\xi)(x_k-x^*)$， $\xi\in[a,b]$和$\left|\varphi'(x)\right|\le L$，得

$$\left|x_{k+1}-x^*\right|\le L\left|x_k-x^*\right|=L\left|\varphi(x_{k-1})-\varphi(x^*)\right|\le L^2\left|x_{k-1}-x^*\right|\le\cdots\le L^{k+1}\left|x_0-x^*\right|$$

因为 L<1，所以当 $k\to\infty$ 时，$L^{k+1}\to 0$ ，$x_{k+1}\to x^*$,即迭代格式 $x_{k+1}=\varphi\ (x_k)$收敛。

（3）误差估计：设k固定，对于任意的正整数p有，

$$|x_{k+p}-x_k| \le |x_{k+p}-x_{k+p-1}|+|x_{k+p-1}-x_{k+p-2}|+\cdots+|x_{k+1}-x_k|$$

$$\le (L^{k+p-1}+L^{k+p-2}+\cdots+L^k)|x_1-x_0| = \frac{L^k(1-L^P)}{1-L}|x_1-x_0|$$

$$|x_{k+1}-x_k| = |\varphi(x_k)-\varphi(x_{k-1})| \le L|x_k-x_{k-1}| \le \cdots \le L^k|x_1-x_0|$$

很机智地构造过渡项，并结合(2)中结论求和

由于 p 的任意性及 $\lim\limits_{p->\infty} x_{k+p} = x^*$，故有 $|x^*-x_k| \le \dfrac{L^k}{1-L}|x_1-x_0|$

其一，等价形式 $x=\varphi(x)$ 应满足 $\boxed{|\varphi'(x^*)|<1}$；其二，初始必须取自 x^* 的充分小邻域，这个邻域大小决定于函数 $f(x)$，以及做出的等价形式 $x=\varphi(x)$。

例　求代数方程 $x^3-2x-5=0$，在 $x_0=2$ 附近的实根。

解　1)　$x^3=2x+5$　　$x_{k+1}=\sqrt[3]{2x_k+5}$

$\because\ \varphi'(x)=\dfrac{1}{3}\dfrac{1}{(2x+5)^{\frac{2}{3}}}$，　$|\varphi'(x)|<1$，　当 $x\in[1.5,2.5]$

$\therefore$ 构造的迭代序列收敛。　　取 $x_0=2$，则

$x_1=2.08008, x_2=2.09235$，　$x_3=2.094217$，

$x_4=2.094494$，　$x_5=2.094543$，　$x_6=2.094550$.

准确的解是 $x=2.09455148150$。

2) 将迭代格式写为　$x_{n+1}=\dfrac{x_n^3-5}{2}$，　$\varphi_2(x)=\dfrac{x^3-5}{2}$，　$|\varphi'_2(x)|=\left|\dfrac{3x^2}{2}\right|>1$,

当 $x\in[1.5,2.5]$　迭代格式 $x_{n+1}=\varphi_2(x_n)$　不能保证收敛。

$x_1=0.5$,　$x_2=2.9375$，　$x_3=-7.23621$,　$x_4=184.717$，　$x_5=3.15114\cdot10^{-6}$.

4.3 牛顿迭代法

迭代格式

做 $f(x)$ 在 x_0 的泰勒展开：　$f(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\dfrac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2+\cdots=0$

取展开式的线性部分作为 $f(x)\approx0$ 的近似值，则有：$f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)\approx0$

归纳得到牛顿迭代格式：$\boxed{x_{k+1}=x_k-\dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)},\quad k=1,2,\cdots。}$

牛顿迭代格式对应于 $f(x)=0$ 的等价方程是 $\phi(x)=x-\dfrac{f(x)}{f'(x)}$，　$\varphi'(x)=\dfrac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}$

若 α 是 $f(x)$ 的单根时，$f(\alpha)=0, f'(\alpha)\neq 0$，则有 $|\varphi'(\alpha)|=0$，

2. 收敛的阶

若存在 $M>0$，　$\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{|e_{k+1}|}{|e_k|^n}=\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{|x_{k+1}-\alpha|}{|x_k-\alpha|^n}=M$，**称收敛的阶为 n**

$$\boxed{\varphi'(\alpha)=0}$$

牛顿迭代法: $x_{k+1}-\alpha=\varphi(x_k)-\varphi(\alpha)=\varphi(\alpha)+(x_k-\alpha)\varphi'(\alpha)+\dfrac{(x_k-\alpha)^2}{2!}\varphi''(\xi)-\varphi(\alpha)$

$=\dfrac{(x_k-\alpha)^2}{2!}\varphi''(\xi)$ 只要初值 x_0 充分接近 α，牛顿迭代则收敛，且对充分大的 k，

$|x_{k+1}-\alpha|\approx|x_k-\alpha|^2\dfrac{|\varphi''(\alpha)|}{2}$，因此牛顿迭代是**二阶迭代方法**。

可以证明，α 为 $f(x)$ 的 p 重根时，迭代也收敛，但这已是一阶迭代方法，若这时取下面迭代格式，它仍是二阶方法：$x_{k+1}=x_k-p\dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)}$　，$k=1,2,\cdots$

3. 牛顿法的几何意义

以 $f'(x_0)$ 为斜率作过 $(x_0,f(x_0))$ 点的直线，即作 $f(x)$ 在 x_0 点的切线方程

$$Y-f(x_0)=f'(x_0)(X-x_0)$$

令 $Y=0$, 则得此切线与 x 轴的交点 x_1，即 $x_1=X=x_0-f(x_0)/f'(x_0)$

再做 $f(x)$ 的 x_1 处的切线，得交点 x_2，逐步逼近方程的根 α。

例　用牛顿迭代法求方程 $x^3-7.7x^2+19.2x-15.3=0$，在 $x_0=1$ 附近的根。

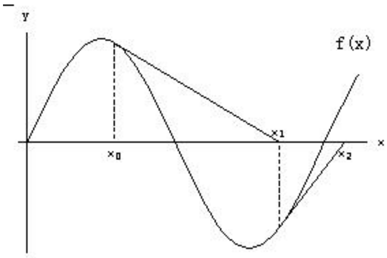
解　$f(x)=x^3-7.7x^2+19.2x-15.3$，

$$x_{k+1}=x_k-\frac{x_k{}^3-7.7x_k{}^2+19.2x_k-15.3}{3x_k{}^2-15.4x_k+19.2}=x_k-\frac{((x_k-7.7)x_k+19.2)x_k-15.3}{(3x_k-15.4)x_k+19.2}$$

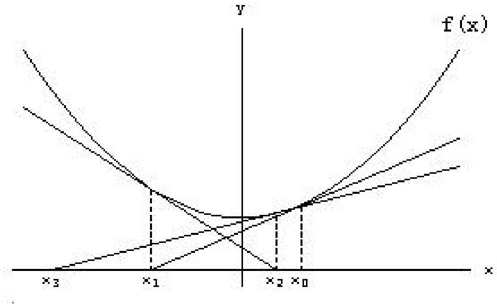
k	x_k	$f(x)$
0	1.00	–2.8
1	1.41176	– 0.727071
2	1.62424	– 0.145493
3	1.6923	–0.0131682

4	1.69991	–0.0001515
5	1.7	0

在牛顿迭代法中收敛与否与迭代初始值 x_0 密切相关，当迭代的初始值 x_0 在某根的附近时迭代才能收敛到这个根，有时会发生从一个根附近跳向另一个根附近的情况，尤其在导数 $f'(x_0)$ 数值很小时，如图所示。



如果 $f(x)=0$ 没有实根，初始值 x_0 是实数，则迭代序列不收敛。下图给出迭代函数 $f(x)=2+x^2$，初始值 $x_0=2$ 的发散的迭代序列。



4.4 弦截法

1. 弦截法迭代格式

在牛顿迭代格式中：$x_{k+1}=x_k-\dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ ，$k=1,2,\cdots$。

用差商 $f[x_{k-1},x_k]=\dfrac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}$ 代替导数 $f'(x_k)$，并给定两个初始值 x_0 和 x_1，那么迭代格式为：

$$\boxed{x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)(x_k-x_{k-1})}{f(x_k)-f(x_{k-1})}\quad ,\quad k=1,2,\cdots。}$$

称为**弦截法**。

用弦截法迭代求根，每次只需计算一次函数值，而用牛顿迭代法每次要计算一次函数值和一次导数值；但弦截法收敛速度稍慢于牛顿迭代法。

（$L_1(x)=0$ ，推导公式；　$L_2(x)=0$，可求出复根 ）

弦截法收敛的阶　　　弦截法为 1.618 阶迭代方法。

例　用弦截法求方程 $x^3-7.7x^2+19.2x-15.3=0$ 的根，取 x_0=1.5，$x_1=4.0$。

解　$f(x)=x^3-7.7x^2+19.2x-15.3$，$x_{k+1}=x_k-\dfrac{f(x_k)(x_k-x_{k-1})}{f(x_k)-f(x_{k-1})}$

计算结果列于表中。

k	x_k	$f(x)$
0	1.5	–0.45
1	4	2.3
2	1.90909	0.248835
3	1.65543	–0.0805692
4	1.71748	0.0287456
5	1.70116	0.00195902
6	1.69997	–0.0000539246
7	1.7	$9.459\ 10^{-8}$

4.5 非线性方程组的牛顿方法

为了叙述简单，我们以解二阶非线性方程组为例，演示牛顿迭代求解的方法和步骤，类似地可以得到解高阶非线性方程组的方法和步骤。

设二阶方程组$\begin{cases} f_1(x,y)=0 \\ f_2(x,y)=0 \end{cases}$；$x,y$ 为自变量。为了方便起见，将方程组写成向量形式：$F(w)=0$

其中：$F(w)=\begin{pmatrix} f_1(x,y) \\ f_2(x,y) \end{pmatrix}$ ，$w=\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ 令 $x-x_0=\Delta x, y-y_0=\Delta y$, 则有

$$\begin{cases} \Delta x\dfrac{\partial f_1(x_0,y_0)}{\partial x}+\Delta y\dfrac{\partial f_1(x_0,y_0)}{\partial y}=-f_1(x_0,y_0) \\ \Delta x\dfrac{\partial f_2(x_0,y_0)}{\partial x}+\Delta y\dfrac{\partial f_2(x_0,y_0)}{\partial y}=-f_2(x_0,y_0) \end{cases} \quad \text{假定}\det(J(x_0,y_0))=\left.\begin{vmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial x} & \dfrac{\partial f_1}{\partial y} \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial x} & \dfrac{\partial f_2}{\partial y} \end{vmatrix}\right|_{(x_0,y_0)} \neq 0,$$

解出Δx，Δy，得$w_1=w_0+\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} x_0+\Delta x \\ y_0+\Delta y \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$,

再列出方程组

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f_1(x_1,\ y_1)}{\partial x}(x-x_1)+\dfrac{\partial f_1(x_1,y_1)}{\partial y}(y-y_1)=-f_1(x_1,y_1) \\ \dfrac{\partial f_2(x_1,y_1)}{\partial x}(x-x_1)+\dfrac{\partial f_2(x_1,y_1)}{\partial y}(y-y_1)=-f_2(x_1,y_1) \end{cases}$$

解出 $\Delta x=x-x_1,\Delta y=y-y_1$， $w_2=\begin{pmatrix} x_1+\Delta x \\ y_1+\Delta x \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix}$，继续做下去 ，

每一次迭代都是解一个方程组 $\boxed{J(x_k,y_k)\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -f_1(x_k,y_k) \\ -f_2(x_k,y_k) \end{pmatrix}}$

$x_{k+1}=x_k+\Delta x,\ y_{k+1}=y_k+\Delta y$ 直到$\max(|\Delta x|,|\Delta y|)<\varepsilon$ 为止。

例 求解非线性方程组$\begin{cases} f_1(x,y)=4-x^2-y^2=0 \\ f_2(x\ ,y)=1-e^x-y=0 \end{cases}$ 取初始值 $\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ -1.7 \end{pmatrix}$

解 $J(x,y)=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f_1}{\partial x} & \dfrac{\partial f_1}{\partial y}\\ \dfrac{\partial f_2}{\partial x} & \dfrac{\partial f_2}{\partial y}\end{bmatrix}=\begin{pmatrix}-2x & -2y\\ -e^x & -1\end{pmatrix}$ $\qquad J(x_0,y_0)=\begin{pmatrix}-2 & 3.4\\ -2.71828 & -1\end{pmatrix}$,

$$\begin{pmatrix}f_1(x_0,y_0)\\ f_2(x_0,y_0)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0.11\\ -0.01828\end{pmatrix} \qquad \begin{cases}-2\Delta x+3.4\Delta y=-0.11\\ -2.71828\Delta x-\Delta y=0.01828\end{cases}$$

解方程得 $\begin{pmatrix}\Delta x\\ \Delta y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0.004256\\ -0.029849\end{pmatrix}$

$$\therefore w_1=\begin{pmatrix}x_0\\ y_0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\Delta x\\ \Delta y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ -1.7\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0.004256\\ -0.029849\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1.004256\\ -1.729849\end{pmatrix}$$

继续做下去，直到 $\max(|\Delta x| \quad ,|\Delta y|)<10^{-5}$ 时停止。

将两个变量的非线性方程组推广到 n 个变量的非线性方程组：

$$\begin{cases}f_1(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0\\ f_2(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0\\ \qquad\cdots\\ f_n(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0\end{cases} \qquad \text{记 } X=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$$

$F(X)=(f_1(x_1,x_2,\cdots,x_n),f_2(x_1,x_2,\cdots,x_n),\cdots,f_n(x_1,x_2,\cdots,x_n))^T$ 的向量形式：

$$F(X)=0 \qquad F(X)=F(X^{(0)})+F'(X^{(0)})(X-X^{(0)})\approx 0$$

用牛顿迭代法求方程组的解为：

$$\boxed{X^{(k+1)}=X^{(k)}-J^{-1}(X^{(k)})F(X^{(k)}) \text{ 或 } J(X^{(k)})(X^{(k+1)}-X^{(k)})=-F(X^{(k)})}$$

其中： $\boxed{J(X)=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial f_1(X)}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_1(X)}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_1(X)}{\partial x_n}\\ \dfrac{\partial f_2(X)}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_2(X)}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_2(X)}{\partial x_n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial f_n(X)}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_n(X)}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_n(X)}{\partial x_n}\end{pmatrix}}$

迭代计算公式： $J(X^{(k)})\Delta X^{(k)}=-F(X^{(k)}) \qquad X^{(k+1)}=X^{(k)}+\Delta X^{(k)}$

一直做到 $\|\Delta X^{(k)}\|_\infty$ 小于给定精度为止。在 X 的邻域中若 $\|J(X)\|_\infty\le L<1$，而初始值充分接近于解，则迭代收敛。

第 5 章 解线性方程组的直接法

5. 1 消元法

5.1.1 三角形方程组的解

$$\begin{cases}\text{空间复杂度} \to \text{占用的存储空间}\\ \text{时间复杂度} \to \text{进行的运算次数}\end{cases}$$

对角形方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 & & & = b_1 \\ & a_{22}x_2 & & = b_2 \\ & & \cdots & \\ & & a_{nn}x_n & = b_n \end{cases}$$

设 $a_{ii} \neq 0$，对每一个方程， $x_i = {}^{b_i}\!/_{a_{ii}}$,$i = 1,2,\cdots n$ 。

求解 n 阶对角方程的运算量（时间复杂度） $\boxed{T(n) = O(n)}$。

下三角方程组

$$\begin{cases} \ell_{11}x_1 & = b_1 \\ \ell_{21}x_1 + \ell_{22}x_2 & = b_2 \\ \cdots & \\ \ell_{n1}x_1 + \ell_{n2}x_2 + \cdots + \ell_{nn}x_n & = b_n \end{cases}$$

按照方程组的顺序，从第一个方程至第 n 个方程，逐个解出 x_i， $i = 1,2,\cdots,n$ 。

由方程 $\ell_{11}x_1 = b_1$，得 $x_1 = b_1 / \ell_{11}$

将 x_1 的值代入到第二个方程 $\ell_{21}x_1 + l_{22}x_2 = b_2$，得 $x_2 = (b_2 - l_{21}x_1) / \ell_{22}$

将 $x_1, x_2, \cdots, x_{i-1}$ 的值代入到第 i 个方程 $\ell_{i1}x_1 + \cdots + l_{i,i-1}x_{i-1} + \ell_{ii}x_i = b_i$ ，

得 $\boxed{x_i = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \ell_{ij}x_j) \Big/ \ell_{ii} \quad ,i = 1,2,\cdots,n}$

计算 x_i 需要 i 次乘法或除法运算， $i = 1,2,\cdots,n$ 。

求解 n 阶下三角方程的运算量（时间复杂度） $\boxed{T(n) = \sum_{i=1}^{n} i = \frac{n(n+1)}{2} = O(n^2)}$

上三角方程组

$$\begin{cases} u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n & = b_1 \\ u_{22}x_2 + \cdots + u_{2n}x_n & = b_2 \\ \cdots & \\ u_{nn}x_n & = b_n \end{cases}$$

与求解下三角方程组的次序相反，从第 n 个方程至第一个方程，逐个解出 x_i， $i = n, n-1, \cdots, 2, 1$ 。

由第 n 个方程 $u_{nn}x_n = b_n$ ， 得 $x_n = b_n / u_{nn}$ ，

将 x_n 的值代入到第 n−1 方程 $u_{n-1,n-1}x_{n-1}+u_{n-1,n}x_n=b_{n-1}$，得 $x_{n-1}=(b_{n-1}-u_{n-1,n}x_n)\big/u_{n-1,n-1}$

将 $x_n,x_{n-1},\cdots,x_{i+1}$ 的值代入到第 i 个方程 $u_{ii}x_i+u_{i,i+1}x_{i+1}+\cdots+u_{in}x_n=b_i$

得解的通式 $\boxed{x_i=(b_i-\sum_{j=i+1}^{n}u_{ij}x_j)\Big/u_{ii}\quad ,i=n,n-1,\cdots,2,1}$

计算 x_i 需要 $n-i+1$ 次乘法或除法运算，$i=n,n-1,\cdots,2,1$。

时间复杂度：$\boxed{T(n)=\sum_{i=n}^{1}(n-i+1)=\sum_{j=1}^{n}j=\frac{n(n+1)}{2}=O(n^2)}$

5.1.2 高斯（Gauss）消元法与列主元消元法

理论基础：对方程组做一系列初等变换 $\Rightarrow$ **等价的、同解的、三角形式的方程组**

1） 对换某两个方程的次序；

2） 对其中某个方程的两边同乘一个不为零的数；

3） 把某一个方程两边同乘一个常数后加到另一个方程的两边。

具体算法过程见教材 P103-106

高斯（Gauss）消元法的运算量

常数运算量

整个消元过程的乘法和除法的运算量为 $\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+1)+\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)$，

系数运算量

回代过程的乘除运算量为 $\frac{n(n+1)}{2}$，

故 Gauss 消元法的运算量为 $\boxed{\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{1}{3}n=O(n^3)}$

高斯（Gauss）消元法的可行性

在上面的消元法中，未知量是按照在方程组中的自然顺序消去的，也叫顺序消元法。

在消元过程中假定对角元素 $a_{kk}^{(k-1)}\neq 0$，消元步骤才能顺利进行，由于顺序消元不改变 A 的主子式值，故高斯消元法可行的充分必要条件为 A 的各阶顺序主子式不为零。但是，实际上只要 $\det A\neq 0$，方程组 $Ax=b$ 就有解。故高斯消元法本身具有局限性。

另一方面，即使高斯消元法可行，如果 $|a_{kk}^{(k-1)}|$ 很小，在运算中用它作为除法的分母.$(a_{ij}\leftarrow a_{ij}-a_{ik}\cdot a_{kj}/a_{kk})$，会导致其它元素数量级的严重增长和舍入误差扩散。这是高斯消元法的另一缺陷。例如：

例 方程组 $\begin{cases}0.0003x_1+3.0000x_2=2.0001 & (1)\\ 1.0000x_1+1.0000x_2=1.0000 & (2)\end{cases}$ 的精确解为：$x_1=\frac{1}{3},x_2=\frac{2}{3}$. 在高斯消元法计算中保留 4 位小数。

解　　方程$(1)\times(-1)/0.0003+$方程(2)得:

$$\begin{cases}0.0003x_1+3.0000x_2=2.0001\\9999.0x_2=6666.0\end{cases}$$

$\therefore x_2=0.6667$,代入方程(1)得:　$x_1=0$

由此得到的解完全失真，如果交换两个方程的顺序，得到等价方程组

$$\begin{cases}1.0000x_1+1.0000x_2=1.0000\\0.0003x_1+3.0000x_2=2.0001\end{cases}$$

经高斯消元后有

$$\begin{cases}1.0000x_1+1.0000x_2=1.0000\\2.9997x_2=1.9998\end{cases}$$

$\therefore x_2=0.6667,\ x_1=0.3333$

由此可看到，在有些情况下，调换方程组的次序，对方程组的解是有影响的，在消元法中抑制舍入误差的增长是十分重要的。

如果不调换方程组的次序，

取 6 位有效数字计算方程组的解，得到$x_2=0.666667,\ x_1=0.33$；

取 9 位有效数字计算方程组的解，得到$x_2=0.666667,\ x_1=0.333333$；

由此可见有效数字的作用。

调换方程组的次序是依照在运算中做分母量的绝对值尽量的大，以减少舍入误差的影响。如果在一列中选取按模最大的元素，将其调到主干方程位置再做消元，则称为**列主元消元法**。

5.1.3 Guass-Jordan 消元法

高斯消元法将系数矩阵化为上三角阵，再进行回代求解；Guass-Jordan 消元法是将系数矩阵化为对角阵，再进行求解。用初等变换化系数矩阵为对角矩阵的方法称为 Gauss-Jordan 消元法。　　[具体过程见教材]

5.2 直接分解法　　[必考！左行右列]

5.2.1 Dolittle 分解

Dolittle 分解步骤

若 A 各阶主子式不为零，可分解为 A=LU，其中 L 为单位下三角阵，U 为上三角阵，即

$$\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}&\cdots&a_{1n}\\a_{21}&a_{22}&\cdots&a_{2n}\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\\a_{n1}&a_{n2}&a_{n3}&a_{n4}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&&&\\l_{21}&1&&\\\cdots&\cdots&\cdots&\\l_{n1}&l_{n2}&\cdots&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_{11}&u_{12}&\cdots&u_{1n}\\&u_{22}&\cdots&u_{2n}\\&&\cdots&\cdots\\&&&u_{nn}\end{pmatrix}$$

矩阵 L 和 U 共有n^2个未知元素，按照一定的顺序，对每个a_{ij}列出两边对应的元素关系式，一个关系式解出一个 L 或 U 的元素。按下列步骤计算 L 和 U 的元素

计算 U 的第一行元素$u_{11},u_{12},\cdots,u_{1n}$

要计算 u_{11}，则列出等号两边的第 1 行第 1 列元素的关系式

$$a_{11}=\sum_{r=1}^{n}l_{1r}u_{r1}=\begin{pmatrix}1 & 0 & \cdots & \cdots & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_{11}\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}=u_{11}，故 u_{11}=a_{11}，$$

一般地，由 U 的第一行元素的关系式

$$a_{1j}=\sum_{r=1}^{n}l_{1r}u_{rj}=\begin{pmatrix}1 & 0 & \cdots & \cdots & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_{1j}\\u_{2j}\\\vdots\\0\end{pmatrix}= u_{1j} \qquad 得到\boxed{\therefore u_{1j}=a_{1j}, j=1,2,\cdots n}$$

计算 L 的第一列元素 $l_{21},l_{31},\cdots,l_{n1}$

要计算 l_{21}，则列出等号两边的第 2 行第 1 列的元素

$$a_{21}=\sum_{r=1}^{n}l_{2r}u_{r1}=\begin{pmatrix}l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_{11}\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}=l_{21}u_{11}$$

故 $l_{21}=a_{21}/u_{11}$

一般地，由 L 的第一列元素的关系式

$$a_{i1}=\sum_{r=1}^{n}l_{ir}u_{r1}=\begin{pmatrix}l_{i1}\cdots l_{i,i-1} & 1 & 0 & \cdots & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_{11}\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}=l_{i1}u_{11}$$

得到 $\boxed{\therefore l_{i1}=a_{i1}/u_{11} \quad ,i=2,3,\cdots n}$,

计算 U 的第二行元素

计算 L 的第二列元素

……

若已算出 U 的前 k–1 行，L 的 k–1 列元素

计算 U 的第 k 行元素 $u_{kk},u_{k,k+1},\cdots,u_{k,n}$

由 U 的第 k 行元素的关系式

$$a_{kj}=\sum_{r=1}^{n}l_{kr}u_{rj}=\begin{pmatrix}l_{k1} & l_{k2} & \dots & l_{k,k-1} & 1 & 0\dots0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_{1j}\\ \vdots\\ u_{jj}\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}$$

$\because u$ 是上三角阵　　$\therefore$ 列标　$j\ge$ 行标 k

$$a_{kj}=\sum_{r=1}^{n}l_{kr}u_{rj}=\sum_{r=1}^{k}l_{kr}u_{rj}=\sum_{r=1}^{k-1}l_{kr}u_{rj}+u_{kj}$$

得到　　$$\boxed{\therefore u_{kj}=a_{kj}-\sum_{r=1}^{k-1}l_{kr}u_{rj},j=k,k+1,\cdots,n}$$

计算 L 的第 k 列元素 $l_{k+1,k},l_{k+2,k},\cdots,l_{n,k}$

由 L 的第 k 列元素的关系式

$$a_{ik}=\sum_{r=1}^{n}l_{ir}u_{rk}=(l_{i1},\cdots,l_{i,i-1},1,0,\cdots,0)\begin{pmatrix}u_{1k}\\ \vdots\\ u_{kk}\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}$$

$\because$ L 是下三角阵　　$\therefore$　行标 $i\ge$ 列标 k

$$a_{ik}=\sum_{r=1}^{n}l_{ir}u_{rk}=\sum_{r=1}^{k}l_{ir}u_{rk}=\sum_{r=1}^{k-1}l_{ir}u_{rk}+l_{ik}u_{kk}$$

得到　$$\boxed{\therefore l_{ik}=(a_{ik}-\sum_{r=1}^{k-1}l_{ir}u_{rk})\Big/u_{kk},\quad \text{i=k+1,k+2,}\cdots,n}$$

一直做到 L 的第 n–1 列，U 的第 n 行为止。

用 LU 直接分解方法求解方程组所需要的计算量仍为 $\boxed{\frac{1}{3}n^3+0(n^2),}$ 与用 Gauss 消元法的计算量基本相同。

用直接分解法解方程 $Ax=b$。**首先作出分解 A = LU，令 UX=Y，解方程组** $LY=b$，由于 L 是单位下三角阵，容易得到

$$\boxed{y_i=b_i-\sum_{j=1}^{i-1}l_{ij}x_j\ ,\quad i=1,2,\cdots,n}$$

再解方程组 UX=Y，其中

$$\boxed{x_i = (y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j) \Big/ u_{ii} \quad ,i = n, n-1, \cdots, 2, 1} \tag{5.20}$$

对 A 进行 LU 分解时，并不涉及常数项 b。因此，若需要解具有相同系数的一系列线性方程组时，使用直接分解法可以达到事半功倍的效果。

例 用 Doolittle 分解求解方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 \\ x_1 + 3x_2 + 2x_3 = 6 \\ x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 5 \end{cases}$$

解 $$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix}$$

对 $k = 1,$ $u_{11} = 2, u_{12} = 1, u_{13} = 1 \; l_{21} = 1/2 = 0.5, l_{31} = 1/2 = 0.5$

对 k=2， $u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = 3 - 0.5 = 2.5$ $u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = 2 - 0.5 = 1.5$

$$l_{32} = \frac{1}{u_{22}}(a_{32} - \; l_{31}u_{12}) = \frac{1}{2.5}(2 - 0.5) = 0.6$$

对 k=3 $u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} = 0.6$

$$\therefore \quad \text{LU} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ 0.5 & 0.6 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & 2.5 & 1.5 \\ 0 & 0 & 0.6 \end{pmatrix}$$

解 $LY = b$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ 0.5 & 0.6 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ 5 \end{pmatrix} \qquad y_1 = 4, y_2 = 4, y_3 = 0.6$$

解 UX = Y

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & 2.5 & 1.5 \\ 0 & 0 & 0.6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \\ 0.6 \end{pmatrix} \qquad \therefore x_3 = 1, x_2 = 1, x_1 = 1$$

5.2.2 Courant 分解

Courant 分解步骤

在矩阵 A = LU 的 Courant 分解形式中，L 是下三角矩阵，U 是单位上三角矩阵，

$$记 \quad L = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & \cdots & u_{2n} \\ & & \cdots & \cdots \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

矩阵 Courant 分解的次序与 Doolittle 分解的次序不同，设 A 的各阶主子式不为零，**按计算 L 的第一列，U 的第一行，⋯, L 的第 k 列，U 的第 k 行的顺序进行计算**，类似于 Doolittle 分解的手法，作出 A=LU 两边矩阵元素的关系式 $a_{ij} = \sum_{r-1}^{n} l_{ir}u_{rk}$，可导出计算公式

分块推导：

$$\left(\widetilde{A}_1 \quad \widetilde{A}_2 \quad \cdots \quad \widetilde{A}_n\right) = \left(L_1 \quad L_2 \quad \cdots \quad L_n\right)\begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & \cdots & u_{2n} \\ & & \cdots & \cdots \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$\widetilde{A}_k = L_1u_{1k} + L_2u_{2k} + \cdots + L_{k-1}u_{k-1,k} + L_k$$

$$L_k = \widetilde{A}_k - \sum_{r=1}^{k-1} L_r u_{rk}$$

$$\boxed{l_{ik} = a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}u_{rk}, \quad i = k, k+1, \cdots n}$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_n \end{pmatrix}$$

$$A_k = (l_{k1}\, l_{k2} \cdots l_{k,k-1}\; l_{k,k}\;\; 0 \cdots 0)\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_n \end{pmatrix} = l_{k1}U_1 + l_{k2}U_2 + \cdots + l_{k,k-1}U_{k-1} + l_{k,k}U_k$$

$$U_k = (A_k - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}U_r) / l_{k,k}$$

$$\boxed{u_{kj} = (a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}u_{rj}) / l_{k,k}, \quad j = k+1, \cdots, n}$$

对 k =1,2,⋯, n

$$\boxed{l_{ik} = a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}u_{rk}, \quad i = k, k+1, \cdots, n}$$

$$\boxed{u_{kj} = (a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}u_{rj}) \Big/ l_{kk}, \quad j = k+1, k+2, \cdots, n}$$

如果 A 的各阶顺序主子式不为零，$l_{kk} \neq 0$，Courant 分解才能顺利进行。在线性代中我们已知，系数矩阵 A 的行列式不为零，方程组的解存在而且唯一，并没有对主子式有任何要求。

在直接分解中也能采用与列主元消元法类似的方法进行处理，避免 A 的某阶主子式为零或$|l_{kk}|$很小。即每求一列 L 的元素后，求出该列中按模最大的元素l_{uk}，然后将矩阵 A 和 L 的第 k 行和第 u 行元素逐个交换，并交换常数项b_k与b_u。

对于方程组$AX=b$，作 Courant 分解后，方程组可写成$LUX=b$，仍记$UX=y$

由$Ly=b$,得到
$$\boxed{y_i=(b_i-\sum_{j=1}^{i-1}l_{i\,j}y_j)\Big/\,l_{i\,i},\quad i=1,2,\cdots,n}$$

由$UX=y$,得到
$$\boxed{x_i=y_i-\sum_{j=i+1}^{n}u_{ij}x_j,\qquad j=n,n-1,\cdots,2,1}$$

[例题见教材]

5.2.3 追赶法

形如

$$A=\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ c_2 & a_2 & b_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & c_n & a_n \end{pmatrix}$$

的矩阵称为**三对角矩阵**。其特征是非零元素仅分布在对角线及其对角线两侧的位置。在样条插值函数的 M 关系式中就出现过这类矩阵。事实上，许多连续问题经离散化后得到的线性方程组，其系数矩阵就是三对角或五对角形式等对角阵。

利用矩阵直接分解法，求解具有三对角线系数矩阵的线性方程组十分简单而有效。采用 Courant 分解法，分解矩阵$A=L\cdot U$，容易验证L,U具有形式

$$A=\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ c_2 & a_2 & b_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & c_n & a_n \end{pmatrix}\quad L=\begin{pmatrix} u_1 & & & \\ w_2 & u_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & w_n & u_n \end{pmatrix}\ ,\quad U=\begin{pmatrix} 1 & v_1 & & \\ & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & v_{n-1} \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$L=\begin{pmatrix} u_1 & & & \\ c_2 & u_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & c_n & u_n \end{pmatrix}\ ,\quad U=\begin{pmatrix} 1 & v_1 & & \\ & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & v_{n-1} \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

若规定 $c_1=0$ 比较$A=L\cdot U$两边元素，可得到一般计算公式

$$\boxed{\begin{cases} w_i=c_i(i\neq 1) \\ u_i=a_i-c_iv_{i-1},\quad i=1,2,\cdots,n \\ v_i=b_i/u_i \end{cases}}$$

三式分别由 L 第 i 行与 U 第 i-1 列相乘、L 第 i 行与 U 第 i 列相乘、L 第 i-1 行与 U 第 i 列相乘得到

考虑三对角线系数矩阵的线性方程组 $Ax = f$

这里　$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$，　$f = (f_1, f_2, \cdots, f_n)^T$

令 $Ux = y$，则有　　　　　　　$Ly = f$

于是有　$\boxed{y_i = (f_i - c_i y_{i-1}) / u_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n}$

规定 $v_n = 0$，由 $Ux = y$ 可得到　　$x_i = y_i - v_i x_{i+1}, \quad i = n, n-1, \cdots, 2, 1$

```
$u_1 = a_1, \quad v_1 = b_1 / u_1, \quad y_1 = f_1$

for  $k = 2$  to  $n$
    $u_k = a_k - c_k v_{k-1}$
    $v_k = b_k / u_k$
    $y_k = (f_k - c_k y_{k-1}) / u_k$

$x_n = y_n$
for  $k = n-1$  to  $1$
    $x_k = y_k - v_k x_{k+1}$
```

时间复杂度 O(n)

5.2.4 对称正定矩阵的 LDL^T 分解

对称正定矩阵也是很多物理问题产生的一类矩阵，正定矩阵的各阶主子式大于零。由线性代数中的定理，若 A 正定，则存在下三角矩阵 U，使 $A = UU^T$，直接分解 $A = UU^T$ 的分解方法，称为**平方根法**。由于在平方根法中含有计算平方根的步骤，因此很少采用平方根法的分解形式。对于对称正定矩阵，常用的是 LDL^T 分解。

对 A 作 Doolittle 分解 A=LU

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \cdots & \cdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix} \qquad \text{// 提出 U 矩阵的对角元素 //}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & & & \\ \ell_{21} & 1 & & \\ & \cdots & & \\ \ell_{n1} & \ell_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \bar{u}_{12} & \cdots & \bar{u}_{1n} \\ & 1 & \cdots & \bar{u}_{2n} \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

由 A 对称正定，可得 $u_{ii} > 0$，令 $D = \begin{pmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{pmatrix}$

可证 $\begin{pmatrix} 1 & \bar{u}_{12} & \cdots & \bar{u}_{1n} \\ & 1 & \cdots & \bar{u}_{2n} \\ & & \cdots & \\ & & & 1 \end{pmatrix} = L^T$ ， 即 $A = LDL^T$

证明 设 L 单位下三角阵，$\widetilde{U}$ 单位上三角阵. $A = LD\widetilde{U}, A^T = \widetilde{U}^T DL^T$.由分解的唯一性，$A^T = A, L = \widetilde{U}^T$

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ \ell_{21} & 1 & & \\ & \cdots & & \\ \ell_{n1} & \ell_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & l_{12} & \cdots & l_{1n} \\ & 1 & \cdots & l_{2n} \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

L 是对角元素为 1 的单位下三角阵。

对矩阵 A 做 Doolittle 或 Courant 分解，共计计算 n^2 个矩阵元素；对称矩阵的 LDL^T 分解，只需计算 $\dfrac{n(n+1)}{2}$ 元素，减少了近一半的工作量。借助于 Doolittle 或 Courant 分解计算公式，容易得到 LDL^T 分解计算公式。

设 A 有 Doolittle 分解形式

$$A = L(DL^T) = L\widetilde{U} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & d_1 l_{12} & \cdots & d_1 l_{1n} \\ & d_2 & \cdots & d_2 l_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & d_n \end{pmatrix}$$

其中 $\widetilde{u}_{ij} = d_i l_{ij} = d_i l_{ji}$

在分解中可套用 Doolittle 分解公式，只要计算下三角 L 和 D 的对角元素 d_k 。计算中只需保存 $L = (\ell_{ij})$ 的元素，L^T 的 i 行 j 列的元素用 L 的 ℓ_{ji} 表示。由于对称正定矩阵的各阶主子式大于零，直接调用 Doolittle 或 Courant 分解公式可完成 LDL^T 分解计算，而不必借助于列主元的分解算法。

对于 $k = 1,2,\cdots,n$

$$d_k = \widetilde{u}_{kk} = a_{kk} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}\widetilde{u}_{rk} = a_{kk} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} d_r l_{rk} = a_{kk} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} d_r l_{kr} \qquad \boxed{d_k = a_{kk} - \sum_{r=1}^{k-1} d_r l_{kr}^2}$$

$$l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}\widetilde{u}_{rk}) \Big/ \widetilde{u}_{kk} = (a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} d_r l_{ir} l_{kr}) / d_k$$

$$\boxed{l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} d_r l_{ir} l_{kr}) / d_k \text{ ， } i = k+1,\cdots,n}$$

由 $L(DL^T)X = b$，解方程组 $Ax = b$ 可分三步完成

解方程组 $Lz=b$ ， 其中 $z=DL^TX$ $\boxed{z_i=b_i-\sum_{j=1}^{i-1}l_{ij}z_j,\quad i=1,2,\cdots,n}$

解方程组 $Dy=z$ ， 其中 $y=L^TX$ $\boxed{y_i=z_i/d_i,\qquad i=1,2,\cdots,n}$

解方程组 $L^Tx=y$ $\boxed{x_i=y_i-\sum_{j=i+1}^{n}l_{ji}x_j,\ i=n,n-1,\cdots,1}$

从矩阵分解角度看，直接分解法与消去法本质上没有多大区别，但实际计算时它们各有所长。一般来说，如果仅用单字长进行计算，列主元消去法具有运算量较少精度高的优点，故是常用的。但是，为了提高精度往往采取单字长数双倍内积的办法（即作向量内积计算时，采用双倍位加法，最终结果再舍入成单字长数），这时直接分解法能获得较高的精度。

例 用 LDL^T 分解求解方程组 $\begin{pmatrix}1&-1&1\\-1&3&-2\\1&-2&4.5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}4\\-8\\12\end{pmatrix}$

解 k=1: $d_1=a_{11}=1$, $l_{21}=a_{21}/d_1=-1$

$l_{31}=a_{31}/d_1=1$

k=2: $d_2=a_{22}-l_{21}^2d_1=2$, $l_{32}=(a_{32}-l_{31}l_{21}d_1)/d_2=-0.5$

k=3: $d_3=a_{33}-l_{31}^2d_1-l_{32}^2d_2=3$

$$L=\begin{pmatrix}1&0&0\\-1&1&0\\1&-0.5&1\end{pmatrix},\quad D=\begin{pmatrix}1&&\\&2&\\&&3\end{pmatrix}$$

由 $LDL^TX=b$ ， $LZ=b,\quad Z=(4,-4,6)^T$

$DY=Z,\quad Y=(4,-2,2)^T$ $L^TX=Y,\quad X=\begin{pmatrix}1\\-1\\2\end{pmatrix}$

*5.3 矩阵的条件数

定义：若 A 非奇异，称 $Cond_p(A)=\|A\|_p\|A^{-1}\|_p$ 为 A 的条件数。其中 $\|\bullet\|_p$ 表示矩阵的某种范数。矩阵条件数的大小是衡量矩阵”好”或”坏”的标志。对于线性方程组， $Ax=b$，若系数矩阵有小扰动 δA，这时方程组的解也有扰动，于是 $(A+\delta A)(x+\delta x)=b$ δx 受到 δA 的影响表示为：

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\frac{Cond(A)\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1-Cond(A)\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}$$

条件数越大，近似偏差越大，矩阵越不好！正交阵最好！

若常数b有小扰动δb的影响表示为：$\dfrac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le Cond(A)\dfrac{\|\delta b\|}{\|b\|}$

因此，称$Cond(A)$大的矩阵为”**坏矩阵**”或”**病态矩阵**”，对于$Cond(A)$大的矩阵，小的误差可能会引起解的失真。一般说来，$\boxed{\text{若 } A \text{ 的按模最大特征值与按模最小特征值之比值较大时，矩阵就会呈病态}}$。特别地，当$\det A$很小时，$A$总是病态的。

例　方程组 $\begin{cases} 0.2161x_1 + 0.1441x_2 = 0.1440 \\ 1.2969x_1 + 0.8648x_2 = 0.8642 \end{cases}$ 解为$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \end{pmatrix}$

对常数项b引入λ小扰动$\delta b = (0.00000001, -0.00000001)^T$

则解为 $\begin{pmatrix} x_1 + \delta x_1 \\ x_2 + \delta x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.991 \\ -0.4870 \end{pmatrix}$

即$\delta x = (-1.009, 1.5130)^T$，$\delta b$很小，但解已完全失真。

$\det A = -10^{-8}$　　$A^{-1} = -10^{8}\begin{pmatrix} 0.8648 & -0.1441 \\ -1.2969 & 0.2161 \end{pmatrix}$

$\|A\|_\infty = 2.1617,\quad \|A^{-1}\|_\infty = 1.513 \times 10^{8}$

故　$Cond_\infty(A) = 3.2706521 \times 10^{8}$　　A的病态是显而易见的。

第 6 章 解线性方程组的迭代法

$AX = y$，$A = N - P$，设N可逆，$AX = NX - PX = y$，$NX = PX + y, X = N^{-1}PX + N^{-1}y$.

令$M = N^{-1}P, g = N^{-1}y$，有$X = MX + g$，构造迭代关系式$\boxed{X^{(k+1)} = MX^{(k)} + g}$

任取初始向量$X^{(0)} = \left(x_1^{(0)},\ x_2^{(0)},\ \cdots,\ x_n^{(0)}\right)^T$，

代入迭代式中，计算得到迭代序列$X^{(1)}, X^{(2)}, \cdots$。称 M 为**迭代矩阵**。

若迭代序列$\left\{X^{(k+1)}\right\}$收敛，设$\left\{X^{(k)}\right\}$的极限为X^*，对迭代式两边取极限

$$\lim_{k\to\infty} X^{(k+1)} = \lim_{k\to\infty} (MX^{(k)} + g)$$

即$X^* = MX^* + g$, X^*是方程组$AX = y$的解，称**迭代法收敛**，否则称迭代法发散。

$\boxed{\text{迭代矩阵的谱半径 } \rho\left(M\right) = \max\limits_{1\le i\le n}|\lambda_i| < 1}$是迭代收敛的$\boxed{\textbf{充分必要}}$条件,其中$\lambda_i$是矩阵$M$的特征根。　[注意与第四章迭代收敛条件相区别！]

再由迭代　$X^{(k+1)} = MX^{(k)} + g$　可得到

$$\begin{aligned}X^* - X^{(k+1)} &= MX^* + g - (MX^{(k)} + g)\\ &= M(X^* - X^{(k)}) = M^2(X^* - X^{(k-1)}) = \cdots = M^{k+1}(X^* - X^{(0)})\end{aligned}$$

$$\| X^* - X^{(k+1)} \| = \| M^{k+1}(X^* - X^{(0)}) \| \le \| M^{k+1} \| \| X^* - X^{(0)} \| \to 0$$

由线性代数定理 $\lim\limits_{k->\infty} M^k = O_{n,n}$ 的充分必要条件为 $\rho(M) < 1$。

因此，$\boxed{\text{称谱半径小于 1 的矩阵为收敛矩阵}}$。若 $\| A \|_p$ 为矩阵 A 的范数，则总有 $\rho(A) \le \| A \|_p$。

因此，若 $\| A \|_p < 1$，则 A 必为收敛矩阵。计算矩阵的 1 范数和∝范数方法比较简单，其中：

$$\|A\|_1 = \max_{1\le j\le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \qquad \|A\|_\infty = \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

于是，只要迭代矩阵 M 满足 $\|M\|_1 < 1$ 或 $\|M\|_\infty < 1$，就可以判断迭代序列

$X^{(k+1)} = MX^{(K)} + g$ 是收敛的。

要特别注意是，当 $\| M \|_1 > 1$ 或 $\| M \|_\infty > 1$ 时，不能判断迭代序列发散。$\boxed{\text{范数小于 1 只是判断迭代}}$

$\boxed{\text{矩阵收敛的充分条件，当迭代矩阵的一种范数使} \|B\| > 1\text{，并不能确定迭代矩阵是否为收敛矩阵}}$。例如，

$B = \begin{pmatrix} 0.9 & 0 \\ 0.2 & 0.8 \end{pmatrix}$，则 $\|B\|_\infty = 1.0, \|B\|_1 = 1.1$， 但它的特征值是 0.9 和 0.8。$\rho(B) < 1$，B 是收敛的。

$\| B \|_2 = 0.967666$

在计算中当相邻两次的误差向量的某种范数 $\|X^{(k+1)} - X^{(k)}\|_p$ 小于给定精度时，则停止迭代计算，视 $X^{(k+1)}$ 为方程组 $AX = y$ 的近似解。

6.1 简单（Jacobi）迭代

6.1.1 简单（Jacobi）迭代格式

Jacobi 迭代公式

n 元线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = y_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = y_2 \\ \qquad \cdots \quad \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = y_n \end{cases}$$

若 $a_{ii} \ne 0$，$i = 1,2,\ldots,n$，则可以移项整理为下面的矩阵形式

$$\begin{cases} x_1 = & & -\dfrac{a_{12}}{a_{11}}x_2 - & \cdots & \cdot -\dfrac{a_{1n}}{a_{11}}x_n + \dfrac{y_1}{a_{11}} \\ x_2 = & -\dfrac{a_{21}}{a_{22}}x_1 & & -\cdots & -\dfrac{a_{2n}}{a_{22}}x_n + \dfrac{y_2}{a_{22}} \\ & \cdots & & & \\ x_n = & -\dfrac{a_{n1}}{a_{nn}}x_1 & -\dfrac{a_{n2}}{a_{nn}}x_2 & -\cdots & -\dfrac{a_{n,n-1}}{a_{nn}}x_{n-1} + \dfrac{y_n}{a_{nn}} \end{cases}$$

记 $\boxed{b_{ij} = -a_{ij}/a_{ii}, g_i = y_i/a_{ii},}$ 构造迭代形式

$$\boxed{\begin{cases} x_1^{(k+1)} = & b_{12}x_2^{(k)} + b_{13}x_3^{(k)} + \cdots & + b_{1n}x_n^{(k)} + g_1 \\ x_2^{(k+1)} = b_{21}x_1^{(k)} & + b_{23}x_3^{(k)} + \cdots & + b_{2n}x_n^{(k)} + g_2 \\ \cdots & & \\ x_n^{(k+1)} = b_{n1}x_1^{(k)} + b_{n2}x_2^{(k)} + \cdots + b_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)} & & + g_n \end{cases}} \qquad 或$$

$$\boxed{\begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & 0 & \cdots & b_{2n} \\ & & \ddots & \\ b_{n1} & b_{n,2} & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_n \end{pmatrix}}$$

称为**简单迭代**或称 **Jacobi 迭代**。任取初始向量 $X^{(0)}$，可以得到迭代向量序列 $\{X^{(k)}\}, k = 1,2,\cdots$。

Jacobi 迭代矩阵

令 $D = \begin{pmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix}$， $AX = (D + A - D)X = y$ ，得到等价方程组

$DX = (D - A)X + y$ $\quad X^{(k+1)} = D^{-1}(D - A)X^{(k)} + D^{-1}y$ $\quad \boxed{X^{(k+1)} = BX^{(k)} + g}$

迭代矩阵

记 $\boxed{B = I - D^{-1}A}$ $\quad g = D^{-1}y$

$$其中 \qquad B = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12}/a_{11} & \cdots & -a_{1n}/a_{11} \\ -a_{21}/a_{22} & 0 & \cdots & -a_{2n}/a_{22} \\ & & \ddots & \\ -a_{n1}/a_{nn} & -a_{n2}/a_{nn} & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \quad g = \begin{pmatrix} y_1/a_{11} \\ y_2/a_{22} \\ \vdots \\ y_n/a_{nn} \end{pmatrix}$$

例 用 Jacobi 方法解下列方程组

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 - x_3 & = & -5 \\ x_1 + 5x_2 - x_3 & = & 8 \\ x_1 + x_2 + 10x_3 & = & 11 \end{cases}$$

解　方程组的迭代格式：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = & & 0.5x_2^{(k)} & +0.5x_3^{(k)} & -2.5 \\ x_2^{(k+1)} = & -0.2x_1^{(k)} & & +0.2x_3^{(k)} & +1.6 \\ x_3^{(k+1)} = & -0.1x_1^{(k)} & -0.1x_2^{(k)} & & +1.1 \end{cases}$$

或

$$\begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ x_3^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0. & 0.5 & 0.5 \\ -0.2 & 0 & 0.2 \\ -0.1 & -0.1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ x_3^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -2.5 \\ 1.6 \\ 1.1 \end{pmatrix}$$

常数项不要忘记除！
上标 k 不要忘记加括号！

$\because \|B\|_1 = 0.7$　　$\therefore$Jacobi 迭代收敛。

取初始值 $X^{(0)} = (0,0,0)^T$，

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$\left\|X^{(k)} - X^{(k-1)}\right\|_\infty$
0	0	0	0	
1	−2.5	1.6	1.1	2.5
2	-1.15	2.32	1.19	1.35
3	-0.745	2.068	0.983	0.405
4	-0.9745	1.9456	0.9677	0.2295
5	-1.04335	1.98844	1.00289	0.06885
6	-1.00433	2.00925	1.00549	0.039015

方程组的准确解是{−1，2，1}。

6.1.2 Jacobi 迭代收敛条件

对于方程组 $AX = y$，构造Jacobi迭代格式，$X^{(k+1)} = BX^{(k)} + g$，其中 $B = I - D^{-1}A,\quad g = D^{-1}y$，

从迭代矩阵考虑：

1）迭代矩阵的谱半径 $\rho = \max\limits_{1\le i\le n}|\lambda_i| < 1$ 时，迭代收敛，这是收敛的$\boxed{\text{充分必要条件}}$。

2）迭代矩阵的某范数 $\|B\|$<1 时，是迭代收敛的$\boxed{\text{充分条件}}$。

从系数矩阵考虑：

A 为**行对角优**阵或**列对角优**阵 Jacobi 迭代收敛。

定理 6.1：若方程组 $AX = y$ 的系数矩阵 A ，满足下列条件之一，则其 Jacobi 迭代收敛。

（1）A 为严格行对角优阵，即 $|a_{ii}| > \sum\limits_{j\ne i}|a_{ij}|$，i=1，2，….，n

（2）A 为严格列对角优阵，即 $|a_{jj}| > \sum\limits_{i\ne j}|a_{ij}|$，j=1，2，….，n

证明　（1）Jacobi 迭代矩阵 $B = (b_{ij})$，其中 $b_{ij} = -a_{ij}/a_{ii}, j \ne i, b_{ii} = 0$，

$$\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} | a_{ij} | < | a_{ii} |, \qquad \sum_{j=1}^{n} | b_{ij} | = \sum_{j\neq i}^{n} \frac{| a_{ij} |}{| a_{ii} |} = \frac{\sum\limits_{j\neq i}^{n} | a_{ij} |}{| a_{ii} |} < 1, \quad i = 1,2,\ldots n$$

$$\|B\|_{\infty} = \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |b_{ij}| = \max_{1\le i\le n} \sum_{j\neq i} \frac{| a_{ij} |}{| a_{ii} |} < 1 \qquad \therefore \text{ Jacobi 迭代收敛。}$$

（行对角优时，$\| B \|_{\infty} < 1$，列对角优时，可证明 $\| B \|_{1} < 1$）

(2)　A 为列对角优阵，则 A^T 为行对角优阵，

由系数矩阵 A^T 构造的迭代矩阵 $C = I - D^{-1}A^T$ ，A^T 为行对角优阵，则有

$\| C \|_{\infty} = \left\| I - D^{-1}A^T \right\|_{\infty} < 1$，　　又　$\rho(I - D^{-1}A^T) \le \left\| I - D^{-1}A^T \right\|_{\infty} < 1$

$$\boxed{\begin{aligned}&(I - D^{-1}A^T)^T\\&= I - D^{-1}A\end{aligned}}$$

得到　$\rho(I - D^{-1}A^T) < 1$　　　而 $\rho\,(I - D^{-1}A\ \ ) = \rho\,(I - D^{-1}A^T)$，

$\rho(B) = \rho(I - D^{-1}A) < 1$　　　∴由系数矩阵 A 构造的 Jacobi 迭代矩阵收敛。

6. 2 高斯-赛德尔（Gauss-Seidel）迭代

6.2.1 高斯-赛德尔迭代公式

在 Jacobi 迭代中，用$(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)})^T$的值计算$x_i^{(k+1)}, i = 1,2,\ldots,n$的值，$x_i^{(k+1)}$的计算公式是

$$(\ X^{(k+1)} = BX^{(k)} + g\ \ ) \qquad x_i^{(k+1)} = \sum_{j=1}^{n} b_{ij}x_j^{(k)} + g_i \qquad x_i^{(k+1)} = \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}x_j^{(k)} + \sum_{j=i+1}^{n} b_{ij}x_j^{(k)} + g_i$$

事实上，在计算$x_i^{(k+1)}$前，已经得到$x_1^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}$的值，不妨将已算出的分量直接代入迭代式中，及时使用最新计算出的分量值。此时：$x_i^{(k+1)} = \sum\limits_{j=1}^{i-1} b_{ij}x_j^{(k+1)} + \sum\limits_{j=i+1}^{n} b_{ij}x_j^{(k)} + g_i$ 即用向量$(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)})^T$计算出$x_1^{(k+1)}$的值，用向量$(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)})^T$计算$x_2^{(k+1)}$的值，… ，用向量$(x_1^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}, x_i^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)})^T$计算出$x_i^{(k+1)}$的值，这种迭代格式称为 Gauss-Seidel 迭代。

Gauss-Seidel 迭代格式

$$\begin{cases}
x_1 = \qquad\quad -\dfrac{a_{12}}{a_{11}}x_2 - \dfrac{a_{13}}{a_{11}}x_3 - \cdots - \dfrac{a_{1n}}{a_{11}}x_n + \dfrac{y_1}{a_{11}} \\
x_2 = -\dfrac{a_{21}}{a_{22}}x_1 \qquad\quad - \dfrac{a_{23}}{a_{22}}x_3 - \cdots - \dfrac{a_{2n}}{a_{22}}x_n + \dfrac{y_2}{a_{22}} \\
\cdots \\
x_n = -\dfrac{a_{n1}}{a_{nn}}x_1 - \dfrac{a_{n2}}{a_{nn}}x_2 - \cdots - \dfrac{a_{n,n-1}}{a_{nn}}x_{n-1} \qquad + \dfrac{y_n}{a_{nn}}
\end{cases}$$

记 $b_{ij} = -a_{ij} / a_{ii}, g_i = y_i / a_{ii}$，对方程组对角线以上的 x_i 取第 k 步迭代的数值，对角线以下的 x_i 取第 k+1 步迭代的数值，构造 Gauss-Seidel 迭代形式

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \qquad\qquad b_{12}x_2^{(k)} + b_{13}x_3^{(k)} + \cdots \qquad + b_{1n}x_n^{(k)} + g_1 \\ x_2^{(k+1)} = b_{21}x_1^{(k+1)} \qquad\quad + b_{23}x_3^{(k)} + \cdots \qquad + b_{2n}x_n^{(k)} + g_2 \\ \cdots \\ x_i^{(k+1)} = b_{i1}x_1^{(k+1)} + \cdots + b_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} + 0 + b_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} \cdots \qquad + b_{i,n}x_n^{(k)} + g_i \\ \cdots \\ x_n^{(k+1)} = b_{n1}x_1^{(k+1)} + b_{n1}x_2^{(k+1)} + \cdots + b_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)} \qquad\quad + g_n \end{cases}$$

例 用 Gauss-Seidel 方法解方程组

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 - x_3 &= -5 \\ x_1 + 5x_2 - x_3 &= 8 \\ x_1 + x_2 + 10x_3 &= 11 \end{cases}$$

解 方程的迭代格式：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \qquad\qquad 0.5x_2^{(k)} + 0.5x_3^{(k)} - 2.5 \\ x_2^{(k+1)} = -0.2x_1^{(k+1)} \qquad\quad + 0.2x_3^{(k)} + 1.6 \\ x_3^{(k+1)} = -0.1x_1^{(k+1)} - 0.1x_2^{(k+1)} \qquad + 1.1 \end{cases}$$

取初始值 $X^{(0)} = (0,0,0)$，

k=1 $x_1^{(1)} = 0.5 \cdot 0 + 0.5 \cdot 0 - 2.5 = -2.5$

$x_2^{(1)} = -0.2 \cdot (-2.5) + 0.2 \cdot 0 + 1.6 = 2.1$ $x_3^{(1)} = -0.1 \cdot (-2.5) - 0.1 \cdot 2.1 + 1.1 = 1.14$

k=2

$x_1^{(2)} = 0.5 \cdot 2.1 + 0.5 \cdot 1.14 - 2.5 = -0.88$ $x_2^{(2)} = -0.2 \cdot (-0.88) + 0.2 \cdot 2.1 + 1.6 = 2.004$

$x_3^{(2)} = -0.1(-0.88) - 0.1 \cdot 2.004 + 1.1 = 0.9876$

计算结果由表所示

k	$X_1^{(k)}$	$X_2^{(k)}$	$X_3^{(k)}$	$\|X^{(k)} - X^{(k-1)}\|_\infty$
0	0	0	0	
1	–2.5	2.1	1.14	2.5
2	–0.88	2.004	0.9876	1.62
3	–1.0042	1.9984	1.0006	0.1242
4	–1.0005	2.0002	1.0000	0.0037

高斯-赛德尔迭代矩阵

设 $A = D + L + U$

$$=\begin{pmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} 0 & & & \\ a_{21} & 0 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & 0 & & a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

写成等价矩阵表达式 $AX=(D+L+U)X=(D+L)X+UX=y$ $(D+L)X=-UX+y$

构造迭代格式： $(D+L)X^{(k+1)}=-UX^{(k)}+y$

有 $X^{(k+1)}=-(D+L)^{-1}UX^{(k)}+(D+L)^{-1}y$

则 Gauss-Seidel 迭代为 $X^{(k+1)}=SX^{(k)}+f$

迭代矩阵

记 $\boxed{S=-(D+L)^{-1}U}$, $f=(D+L)^{-1}y$

或 记 $B=\tilde{L}+\tilde{U}$ $\tilde{L}=-D^{-1}L$, $\tilde{U}=-D^{-1}U$

Jacobi 迭代格式： $X^{(k+1)}=BX^{(k)}+g=\tilde{L}X^{(k)}+\tilde{U}X^{(k)}+g$,

Gauss-Seidel 的迭代格式：

$$X^{(k+1)}=\tilde{L}X^{(k+1)}+\tilde{U}X^{(k)}+g$$

高斯-赛德尔迭代收敛条件 （从迭代矩阵，从系数矩阵）

1）当 ρ(S)<1 或 S 的某种范数 $\|S\|$<1 时，迭代收敛；另一方面，**直接根据方程组系数矩阵的特点**作出判断。

2）**定理 6.2**：若方程组系数矩阵为列或行对角优时，则 Gauss-Seidel 迭代收敛。

3）**定理 6.3**：若方程组系数矩阵 A 为对称正定阵，则 Gauss-Seidel 迭代收敛。

[证明！]

6.3 松弛迭代

松弛迭代计算公式

方程组 $AX=y$ 的 Jacobi 迭代形式 $X^{(k+1)}=BX^{(k)}+g$,记 $B=\tilde{L}+\tilde{U}$ ，其中 $\tilde{L}$ 是下三角阵，$\tilde{U}$ 是上三角阵。得 Gauss-Seidel 的迭代格式 $X^{(k+1)}=\tilde{L}X^{(k+1)}+\tilde{U}X^{(k)}+g$，记 $\Delta X^{(k)}=X^{(k+1)}-X^{(k)}$，有 $X^{(k+1)}=X^{(k)}+\Delta X^{(k)}$，迭代格式为

与等式左边的 $X^{(k+1)}$ 不同，而要用 G-S 迭代结果带入

$$X^{(k+1)}=X^{(k)}+\omega\Delta X^{(k)} \qquad X^{(k+1)}=X^{(k)}+\omega(\boxed{X^{(k+1)}}-X^{(k)})$$

$$X^{(k+1)}=X^{(k)}+\omega(\tilde{L}X^{(k+1)}+\tilde{U}X^{(k)}+g-X^{(k)})$$

整理得 $\boxed{X^{(k+1)}=(1-\omega)X^{(k)}+\omega(\tilde{L}X^{(k+1)}+\tilde{U}X^{(k)}+g)}$

ω 对于不同问题有不同取值，且 $0<\omega<2$

这里 ω 称为**松弛因子**，上式称为**松弛迭代**。

迭代的分量形式为

G-S 迭代的分量形式

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (1-\omega)x_1^{(k)} + \omega\boxed{(b_{12}x_2^{(k)} + b_{13}x_3^{(k)} + \cdots + b_{1n}x_n^{(k)} + g_1})\\ x_2^{(k+1)} = (1-\omega)x_2^{(k)} + \omega(b_{21}x_1^{(k+1)} + b_{23}x_3^{(k)} \cdots + b_{2n}x_n^{(k)} + g_2)\\ \cdots \\ x_n^{(k+1)} = (1-\omega)x_n^{(k)} + \omega(b_{n1}x_1^{(k+1)} + b_{n2}x_2^{(k+1)} \cdots + b_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)} + g_n) \end{cases}$$

称为松弛迭代的计算公式。

松弛迭代矩阵

将迭代格式中的 $X^{(k+1)}$ 与 $X^{(k)}$ 的项各分别放在方程的两边：

$$(I-\omega\tilde{L})X^{(k+1)} = ((1-\omega)I + \omega\tilde{U})X^{(k)} + \omega g$$

用 $\tilde{L} = -D^{-1}L$， $\tilde{U} = -D^{-1}U$ 代入上式

$$(I+\omega D^{-1}L)X^{(k+1)} = ((1-\omega)I - \omega D^{-1}U)X^{(k)} + \omega g$$

$$X^{(k+1)} = (I+\omega D^{-1}L)^{-1}((1-\omega)I - \omega D^{-1}U)X^{(k)} + \omega(I+\omega D^{-1}L)^{-1}g$$

则松弛因子为 ω 的迭代矩阵为 $X^{(k+1)} = S_\omega X^{(k)} + f$

其中 $S_\omega = (I+\omega D^{-1}L)^{-1}[(1-\omega)I - \omega D^{-1}U]$ $\quad f = \omega(I+\omega D^{-1}L)^{-1}g$

松弛迭代收敛条件

定理 6.4：松弛迭代收敛的必要条件 $0<\omega<2$。

定理 6.5：若 A 为正定矩阵，则当 $0<\omega<2$ 时，松弛迭代恒收敛。

上例定理给出了松弛迭代因子的范围。对于每个给定的方程组，确定 ω 究竟取多少为最佳，这是比较困难的问题，对某些特定的方程组，我们可以得到一些理论结果。

通常，把 $0<\omega<1$ 的迭代称为**亚松弛迭代**，把 $\omega=1$ 的迭代称为 Gauss-Seided 迭代，而把 $1<\omega<2$ 的迭代称为**超松弛迭代**。

6. 4 逆矩阵计算

在线性代数中逆矩阵是按其伴随矩阵定义的，若 $|A|\neq 0$，则方阵 A 可逆，且 $A^{-1} = \frac{1}{|A|}A^*$，其中 A^* 为 A 的伴随矩阵。要计算 n^2 个 $n-1$ 阶的行列式才能得到一个伴随矩阵，在计算中因其计算工作量大而不被采用。通常对 (A,I) 做行的初等变换，在将 A 化成 I 的过程中得到 (I,A^{-1})。在数值计算中，这仍然是一种行之有效的方法。由逆矩阵的定义 $A\cdot A^{-1}=I$ 令 $A=(a_{ij})$，$A^{-1}=(x_{ij})$ ，有

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

化为求解 n 个方程组

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1j} \\ x_{2j} \\ \vdots \\ x_{nj} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = e_j \quad , \quad j = 1,2,\cdots,n$$

e_j 是第 j 个分量为 1，其余分量为零的 n 维向量。或记为： $Ax_j = e_j$ ， $j = 1,2,\cdots,n.$

用直接法或迭代法算出 $x_j, j = 1,2,\cdots,n$ ，也就完成了逆矩阵 A^{-1} 的计算。

如果依次对 $(A,e_1),(A,e_2),\cdots,(A,e_n)$ 作 Gauss-Jordan 消元法，组合起来看有（当然也能组合起来做）： $(A,e_1,e_2,\cdots,e_n) = (A,I)$

这正是在线性代数中的初等变换计算逆矩阵的方法。由此可见，计算一个 n 阶逆矩阵的工作量相当于解 n 个线性方程组。在数值计算中，常常将计算矩阵逆的问题转化为解线性方程组的问题。例如，已知方阵 A 和向量 $X^{(k)}$ 有迭代关系式 $X^{(k+1)} = A^{-1}X^{(k)}$，在计算中不是先算出 A^{-1}，再作 A^{-1} 与 $X^{(k)}$ 的乘积得到 $X^{(k+1)}$；而是将 A 作为线性方程组系数矩阵，求解方程组 $AX^{(k+1)} = X^{(k)}$，$X^{(k)}$ 作为常数项解出 $X^{(k+1)}$。

第 7 章 计算矩阵的特征值和特征向量

7.1 幂法

7.1.1 幂法计算

例 矩阵 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$，用迭代序列 X$^{(k+1)}$=AX$^{(k)}$ 计算 A 的最大特征值。

解 取 $X^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$， $X^{(1)} = A \cdot X^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ ， $X^{(2)} = A \cdot X^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$，

$$X^{(3)} = A \cdot X^{(2)} = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \end{pmatrix}, \quad X^{(4)} = \begin{pmatrix} 5 \\ 8 \end{pmatrix}, \quad X^{(5)} = \begin{pmatrix} 8 \\ 13 \end{pmatrix} \quad , \quad \ldots\ldots$$

在表中列出迭代序列 $X^{(0)}, X^{(1)}, \cdots, X^{(12)}$；以及 $x_1^{(k)} / x_1^{(k-1)}$ $x_2^{(k)} / x_2^{(k-1)}$ 的值。

K	$X^{(k)}$		k	$X^{(k)}$	
0	1	1	**7**	21	34
1	1	2	**8**	34	55
2	2	3	**9**	55	89
3	3	5	**10**	89	144

4	5	8	**11**	144	233
5.	8	13	**12**	233	377
6	13	21	**13**	377	610

观察前后两个向量对应分量的比值

K	$X^{(k)}$		$x_2^{(k)}\ /\ x_2^{(k-1)}$	k	$X^{(k)}$		$x_1^{(k)}\ /\ x_1^{(k-1)}$	$x_2^{(k)}\ /\ x_2^{(k-1)}$
0	1	1		**7**	21	34	1.61538	1.61905
1	1	2	2	**8**	34	55	1.61905	1.61765
2	2	3	1.5	**9**	55	89	1.61765	1.61818
3	3	5	1.66667	**10**	89	144	1.61818	1.61798
4	5	8	1.6	**11**	144	233	1.61798	1.61806
5.	8	13	1.625	**12**	233	377	1.61806	1.61803
6	13	21	1.61538	**13**	377	610	1.61803	1.61804

$$\frac{x_1^{(12)}}{x_1^{(11)}}=\frac{233}{144}=1.61806\ ,\quad \frac{x_2^{(12)}}{x_2^{(11)}}=\frac{377}{233}=1.61803\ ,\frac{x_1^{(13)}}{x_2^{(12)}}=\frac{377}{233}=1.61803\ ,\ \frac{x_2^{(13)}}{x_2^{(12)}}=\frac{610}{377}=1.61804$$

在幂法中，假设矩阵 A 的特征值 $\lambda_i, i=1,2,\dots,n$，并有 n 个线性无关的特征向量 v_i，即 $Av_i=\lambda_i v_i$，$i=1,2,\cdots,n$。任取初始向量 $X^{(0)}$，$X^{(0)}$ 可表示成 A 的 n 个线性无关的特征向量 v_i 的线性组合。

$$X^{(0)}=\alpha_1 v_1+\alpha_2 v_2+\cdots+\alpha_n v_n$$

那么，$X^{(1)}=AX^{(0)}=\alpha_1\lambda_1 v_1+\alpha_2\lambda_2 v_2+\cdots+\alpha_n\lambda_n v_n$

一般地有： $X^{(k)}=AX^{(k-1)}=\alpha_1\lambda_1^k v_1+\alpha_2\lambda_2^k v_2+\cdots+\alpha_n\lambda_n^k v_n$

$X^{(k)}$ 的变化趋势与特征值的分布关系有关，幂法根据 $X^{(k)}$ 的变化趋势计算矩阵按模最大的特征值。下面讨论幂法中两种比较简单的情况。

按模最大的特征值只有一个，且是单实根

设 $|\lambda_1|>|\lambda_2|\geq|\lambda_3|\geq\cdots|\lambda_n|$

$$X^{(k)}=\alpha_1\lambda_1^k v_1+\alpha_2\lambda_2^k v_2+\cdots+\alpha_n\lambda_n^k v_n\ =\lambda_1^k\left[\alpha_1 v_1+\alpha_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k v_2+\cdots+\alpha_n\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k v_n\right]$$

若 $\alpha_1\neq 0$，由于 $\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right|<1$ ， $i=2,3,\dots,n$，对充分大的 k $\left|\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)\right|^k<<1$ ， $i=2,3,\dots,n$

故 $X^{(k)}\approx\lambda_1^k\alpha_1 v_1$ $\quad AX^{(k)}=X^{(k+1)}\approx\lambda_1^{k+1}\alpha_1 v_1=\lambda_1\lambda_1^k\alpha_1 v_1=\lambda_1 X^{(k)}$

得到按模最大的特征值 $\boxed{\lambda_1\approx x_i^{(k+1)}/x_i^{(k)}\ ,i=1,2,\dots,n}$，相应的特征向量近似地为 $X^{(k)}$。

$\{x_i^{(k+1)}/x_i^{(k)}\}$ 收敛于λ_1的速度取决于比值$\left|\dfrac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|$的大小。

例 计算矩阵 A 的按模最大的特征值和它的特征向量 $A=\begin{pmatrix}0 & 2\\ 1 & -1\end{pmatrix}$

解

K	$X^{(k)}$		$x_2^{(k)}/x_2^{(k-1)}$	k	$X^{(k)}$		$x_2^{(k)}/x_2^{(k-1)}$
0	1	1		8	-84	86	-2.04762
1	2.	0.		9	172	-170	-1.97674
2	0	2		10	-340	342	-2.01176
3	4	-2	-1.0000	11	684	-682	-1.99415
4	-4	6	-3.0000	12	-1364	1366	-2.00293
5	12	-10	-1.66667	13	2732	-2730	-1.99854
6	$-20.$	22	-2.200	14	-5460	5462	-2.0073
7	44	-42	-1.90909	15	10924	-10922	-1.99963

$x_1^{(14)}/x_1^{(13)}=-5460/2732=-1.9985$ ， $x_2^{(14)}/x_2^{(13)}=5462/(-2730)=-2.00073$

$x_1^{(15)}/x_1^{(14)}=10924/(-5460)=-2.0073$ ， $x_2^{(15)}/x_2^{(14)}=-10922/5462=-1.99963$

得到 A 按模最大的特征值 $\lambda_1=-1.99963$ ，和相应的特征向量 $v_1\approx(-5460,5462)$

继续算下去，越来越靠近按模最大特征值的准确值$\lambda_1=-2$和特征向量$v_1=(1,-1)$ 。

按模最大的特征值是互为反号的实根

设$\lambda_1>0$，且 $\lambda_1=-\lambda_2$ 即 $|\lambda_1|=|\lambda_2|>|\lambda_3|\geq\cdots|\lambda_n|$，这时有

$$X^{(k)}=\lambda_1^k(\alpha_1 v_1+(-1)^k\alpha_2 v_2+\alpha_3(\frac{\lambda_3}{\lambda_1})^k v_3+\cdots+\alpha_n(\frac{\lambda_n}{\lambda_1})^k v_n)$$

当 k 充分大时有： $X^{(k)}\approx\lambda_1^k(\alpha_1 v_1+(-1)^k\alpha_2 v_2)$

$$X^{(k+1)}=\lambda_1^{k+1}(\alpha_1 v_1+(-1)^{k+1}\alpha_2 v_2)\qquad X^{(k+2)}\approx\lambda_1^{k+2}(\alpha_1 v_1+(-1)^{k+2}\alpha_2 v_2)\approx\lambda_1^2 X^{(k)}$$

$X^{(k)}$呈现有规律的摆动，对充分大的 k， $X^{(k)}$与$X^{(k+2)}$几乎相差一个常数因子λ_1^2。

$$\boxed{\therefore\ \lambda_1=\sqrt{x_i^{(k+2)}/x_i^{(k)}}}$$

由 $\begin{cases} X^{(k)} = \lambda_1^k(\alpha_1 v_1 + (-1)^k \alpha_2 v_2) \\ X^{(k+1)} = \lambda_1^{k+1}(\alpha_1 v_1 + (-1)^{k+1} \alpha_2 v_2) \end{cases}$ 得 $\begin{cases} X^{(k+1)} + \lambda_1 X^{(k)} \approx 2\lambda_1^{k+1}\alpha_1 v_1 \\ X^{(k+1)} - \lambda_1 X^{(k)} \approx (-1)^{(k+1)} 2\lambda_1 \alpha_2 v_2 \end{cases}$

得到相应的特征向量 $\boxed{\begin{cases} V_1 = X^{(k+1)} + \lambda_1 X^{(k)} \\ V_2 = X^{(k+1)} - \lambda_1 X^{(k)} \end{cases}}$

特征向量的倍数
仍为特征向量

还有很多更复杂的情况，可参考有关书籍或选用其它方法。本文中只讨论幂法计算的两种情况。在计算中若 $x_i^{(k+1)} \big/ x_i^{(k)}$ 的比值趋于一个稳定的值，则属于第(1)种情况，如果 $x_i^{(k+1)} \big/ x_i^{(k)}$ 不能趋于一个稳定的值，但是 $x_i^{(2k+2)} \big/ x_i^{(2k)}$ 和 $x_i^{(2k+1)} \big/ x_i^{(2k-1)}$ 的比值**分别**趋于一个稳定的值，则属于第(2)种情况。

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$\sqrt{x_1^{(k+2)} / x_1^{(k)}}$	$\sqrt{x_2^{(k+2)} / x_2^{(k)}}$	$\sqrt{x_3^{(k+2)} / x_3^{(k)}}$
0	**1**	**2**	**3**			
1	**5**	**6**	**7**			
2	**21**	**54**	**55**	**4.58258**	**5.19615**	**4.28174**
3	**85**	**118**	**119**	**4.12311**	**4.43471**	**4.12311**
4	**341**	**886**	**887**	**4.02965**	**4.05061**	**4.01588**
5	**1365**	**1910**	**1911**	**4.00735**	**4.02324**	**4.00735**
6	**5461**	**14198**	**14199**	**4.00183**	**4.0031**	**4.00099**

7.1.2 幂法的规范运算

在幂法迭代计算 $X^{(k+1)} = AX^{(k)}$ 中，当 k 充分大时，若 A 的按模最大特征值其值较大时，$X^{(k)}$ 的某些分量迅速增大（如例 7.2 所示），或许会超过计算机实数的值域（上溢）；而 A 的按模最大特征值其值较小时，$X^{(k)}$ 的分量迅速缩小，当 k 充分大时，或许会被计算机当零处理（下溢）。因此，分量过大或过小都不利于计算的精确度。在实际计算中，通常采用规范运算，即对 $X^{(k)}$ 的每个元素除以 $X^{(k)}$ 按模最大的分量 $\|X^{(k)}\|_\infty = \max\limits_{1 \le i \le n} |x_i^{(k)}|$。

规范运算可按下面公式进行 $\boxed{\begin{cases} Y^{(k)} = X^{(k)} / \|X^{(k)}\|_\infty \\ X^{(k+1)} = AY^{(k)} \end{cases}, \quad k = 0, 1, \ldots,}$

规范化运算保证了 $\|Y^{(k)}\| = 1$，即 $Y^{(k)}$ 按摸最大分量的值保持为 1 或–1。下面给出在规范运算中迭代序列的几种情况：

(1) 如果 $\{X^{(k)}\}$ 收敛，则 A 的特征值按模最大分量的值仅有一个，且 $\lambda_1 > 0$，对充分大的 k，按模最大分量 $x_j^{(k)}$ 不变号，对应的 $|y_j^{(k)}| = 1$，$\lambda_1 \approx |x_j^{(k+1)}|$，即 $\boxed{\lambda_1 \approx \max\limits_{1 \le i \le n} |x_i^{(k+1)}| = |x_j^{(k+1)}|}$，相应的特

征向量是 $\boxed{v_1 \approx Y^{(k)}}$。

(2) 如果 $\{X^{(2k)}\},\{X^{(2k+1)}\}$ 分别收敛于互为反号的向量，则按模最大的特征值也仅有一个单实根，且 $\lambda_1 < 0$，即对充分大的 k，若 $x_j^{(k)}$ 的符号交替变号，则 λ_1 为负值。$\boxed{\lambda_1 \approx -\max\limits_{1\le i\le n}|x_i^{(k)}| = -|x_j^{(k)}|}$，相应的特征向量是 $\boxed{v_1 \approx Y^{(k)}}$。

(3) 如果 $\{X^{(2k)}\},\{X^{(2k+1)}\}$ 分别收敛于两个不同的向量（与(2)不同），则按模最大的特征值有两个，是互为反号的一对实根。这时，对充分大的 k，再作一次非规范运算 $X^{(k+1)} = AX^{(k)}$

则 $\boxed{\lambda_1 \approx \sqrt{x_i^{(k+1)} / y_i^{(k-1)}}\ ,\quad \lambda_2 = -\lambda_1}$ 　　而仍有 $\boxed{\begin{cases} V_1 = X^{(k+1)} + \lambda_1 X^{(k)} \\ V_2 = X^{(k+1)} - \lambda_1 X^{(k)} \end{cases}}$

不规范化！

[注：当 k 很大时，$X^{(k+1)} = AY^{(k)}, X^{(k+2)} = \boxed{AX^{(k+1)}} = A^2Y^{(k)} = \lambda_1^2 Y^{(k)}$]

(4) 如果 $\{X^{(k)}\}$ 的趋势无一定的规律，这时 A 的按模最大的特征值的情况更为复杂，需另行处理。

例　用规范运算计算矩阵 A 的按模最大的特征值和它的特征向量。　$A = \begin{pmatrix} 9 & -3 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$

解　用表给出计算结果

k	$Y^{(k)}$		$X^{(k+1)}$	
0	1	1	6	5
1	1.	0.833333	6.5	4.83333
2	1.	0.74359	6.76923	4.74359
3	1.	0.700758	6.89773	4.70076
4	1.	0.681493	6.95552	4.18149
5.	1.	0.673061	6.98081	4.67306
6	1.	0.669415	6.99176	4.66942
7	1.	0.66782	6.99654	4.66782
8	1.	0.667161	6.99852	4.66716
9	1.	0.666879	6.99936	4.66688
10	1.	0.666883	6.99935	4.66688

得到按模最大的特征值 $\lambda_1 \approx 6.99936$，特征向量 $v_1 = \begin{pmatrix} 1.0 \\ 0.666879 \end{pmatrix}$

例　用规范运算计算矩阵 A 的按模最大的特征值和它的特征向量　$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ 16 & -2 & -2 \\ 16 & -3 & -1 \end{pmatrix}$

解　计算结果列在表中。

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$y_1^{(k)}$	$y_2^{(k)}$	$y_3^{(k)}$
0	0.5	0.5	1	0.5	0.5	1
1	2.5	5	5.5	0.454545	0.909091	1
2	1.909089	3.454538	3.553628	0.537222	0.972116	1
3	2.176772	4.65132	4.679104	0.465201	0.994091	1
4	2.176772	3.455134	3.461124	0.539392	0.998269	1
5	2.159299	4.633734	4.635485	0.465721	0.999627	1
6	1.862661	3.452282	3.452655	0.539487	0.999892	1
7	2.158056	4.632000	4.632116	0.465890	0.999975	1
8	1.863585	3.454290	3.454315	0.534950	0.999993	1
9	2.157985	4.631926	4.631926	0.465893	0.999999	1
10	1.863573	3.454290	3.454291	0.539495	1	1
11	2.157980	4.631920	4.631920	0.465893	1	1
12	1.863572	3.454288	3.454288			
13	7.454288	16.	16.			

不规范化！

$$\lambda_1 = \sqrt{x_2^{(13)} / y_2^{(11)}} = 4, \lambda_2 = -4 \quad v_1 = X^{(13)} + \lambda_1 X^{(12)} = (14.908576, 29.817152, 29.817152)$$

$$v_2 = X^{(13)} - \lambda_1 X^{(12)} = (0, 2.182848, 2.182848)$$

有时题目会通过给定初值或k的前n组值，反推求解方法并完成求解

关于幂法的初始值*

用迭代法求解非线性方程的根，初始值必需选择在根的附近，才能保证迭代收敛；用迭代法求解线性方程组，可任选初始值。在幂法计算中，一般认为初始值 $X^{(0)}$ 是**任取**的，其实也隐含了条件。由特征值和特征向量的定义要求 $X^{(0)}$ 不能是零向量，在幂法中，设 $X^{(0)} = \alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \cdots + \alpha_n v_n$，要求 $\alpha_1 \neq 0$，然而在迭代计算中，由于舍入误差的影响，即使初始值 $X^{(0)}$ 按 $v_1, v_2, \cdots v_n$ 分解时，v_1 的系数 $\alpha_1 = 0$，对充分大的 k，$X^{(k)}$ 按 $v_1, v_2, \cdots v_n$ 分解时，v_1 的系数也不是零，不过这时需要的迭代次数可能很大。

7.2 反幂法

反幂法是计算矩阵**按模最小的特征值以及相应的特征向量**的数值方法。

设矩阵 A 可逆，λ 和 v 分别为 A 的特征值以及相应的特征向量，并设 $\lambda_i \neq 0, \quad i = 1, 2, \cdots, n$。对 $Av = \lambda v$ 两边同乘 A^{-1}，得 $A^{-1} v = \dfrac{1}{\lambda} v$，可见 A 和 A^{-1} 的特征值互为倒数，而且 v 也是 A^{-1} 的特征值 $\dfrac{1}{\lambda}$ 的特征向量。A^{-1} 的按模最大的特征值正是 A 的按模最小的特征值的倒数，用幂法计算 A^{-1} 按模最大的特征值而得到 A 的按模最小的特征值的方法，称为**反幂法**。

用幂法计算 A^{-1} 按模最大的特征值仍可用规范方法：

任取 $X^{(0)}$，规范迭代 $\begin{cases} Y^{(k)} = X^{(k)} / \|X^{(k)}\|_{\infty} \\ X^{(k+1)} = A^{-1}Y^{(k)} \end{cases}$， $k = 0,1,\ldots$

在实际计算中，不是先算出 A^{-1}，再做乘积 $A^{-1}Y^{(k)}$,而是解方程 $AX^{(k+1)} = Y^{(k)}$，求得 $X^{(k+1)}$，求解过程一般采用直接分解法。将 A 分解为 $A = LU$，由 $LZ^{(k+1)} = Y^{(k)}$ 解出 $Z^{(k+1)}$，再由 $UX^{(k+1)} = Z^{(k+1)}$ 解出 $X^{(k+1)}$。

$X^{(0)}$ 可能恰好为 $\lambda = 1$ 的特征向量，因此要验证一下

规范迭代计算公式：

$$\boxed{\begin{cases} Y^{(k)} = X^{(k)} / \| X^{(k)} \|_{\infty} \\ AX^{(k+1)} = Y^{(k)} \end{cases}, \qquad k = 0,1,\ldots}$$

例 用规范运算计算矩阵 A 的按模最小的特征值和它的特征向量 $A = \begin{pmatrix} 9 & -3 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$

解 计算结果列在表中。

k	$Y^{(k)}$		$X^{(k+1)}$	
0	1	1	0.1904766	0.238095
1	0.8	1.	0.180952	0.27619
2	0.655172	1.	0.174056	0.303777
3	0.572973	1	0.170142	0.319434
4	0.532636	1.	0.168221	0.327117
5	0.514253	1.	0.167345	0.330618
6	0.514253	1.	0.16696	0.33216
7	0.502649	1.	0.166793	0.332829
8	0.501137	1.	0.166721	0.333117

由表可知 $\mu = 0.333117$ 为 A^{-1} 的按模最大的特征值

故 $\lambda_2 = 1/0.333117 = 3.0019$ 为 A 的按模最小的特征值

$v_2 = \{0.501137,1\}^T$ 为其近似的特征向量。

7.3 实对称矩阵的 Jacobi 方法

Jacobi 方法数学基础：

(1) 若 A 为 n 阶对角阵，$A = \begin{pmatrix} a_1 & & & \\ & a_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_n \end{pmatrix}$，则 $a_1, a_2, \cdots, a_n$ 就是 A 的 n 个特征值；

(2) A 为 n 阶矩阵，P 为任意 n 阶可逆矩阵，则称 A 与 $P^{-1}AP$ 相似，相似矩阵具有相同的特征值；

(3) 若 A 为 n 阶对称矩阵，则存在正交矩阵 Q，使 $Q^{-1}AQ=Q^{T}AQ=\begin{pmatrix}\lambda_1&&&\\&\lambda_2&&\\&&\ddots&\\&&&\lambda_n\end{pmatrix}$，即对称矩阵正交相似于一个对角阵。

Jacobi 方法就是实现以上思想的一种数值方法，它通过一系列平面旋转变换（也是正交变换），逐渐减弱非对角线元素。**计算对称矩阵 A 全部特征值的 Jacobi 方法是构造一系列的正交矩阵 Q_k 的过程。**

例　计算矩阵 $A=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$ 的特征值和相应的特征向量。

解　记 $B=\begin{pmatrix}\cos\theta&\sin\theta\\-\sin\theta&\cos\theta\end{pmatrix}$，

$$B^{T}AB=\begin{pmatrix}\cos\theta&-\sin\theta\\\sin\theta&\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\theta&\sin\theta\\-\sin\theta&\cos\theta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-2\sin\theta\cos\theta&\cos^2\theta-\sin^2\theta\\\cos^2\theta-\sin^2\theta&2\sin\theta\cos\theta\end{pmatrix}$$

做旋转变换的目的是要　$\cos^2\theta-\sin^2\theta=0$　若取 $\theta=\dfrac{\pi}{4}$，这时 $\cos\theta=\sin\theta=\dfrac{\sqrt{2}}{2}$，

$$B=\begin{pmatrix}\dfrac{\sqrt{2}}{2}&\dfrac{\sqrt{2}}{2}\\-\dfrac{\sqrt{2}}{2}&\dfrac{\sqrt{2}}{2}\end{pmatrix}\qquad 而\quad B^{T}AB=\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

得到 A 的特征值 $\lambda_1=-1,\lambda_2=1$，相应的特征值 $v_1=\begin{pmatrix}\dfrac{\sqrt{2}}{2}\\-\dfrac{\sqrt{2}}{2}\end{pmatrix}$ $v_2=\begin{pmatrix}\dfrac{\sqrt{2}}{2}\\\dfrac{\sqrt{2}}{2}\end{pmatrix}$。

$$记\quad Q(p,q,\theta)=\begin{array}{c}\left(\begin{array}{ccccccccc}1&&&&&&&&\\&\ddots&&&&&&&\\&&\cos\theta&&&&\sin\vartheta&&\\&&&1&&&&&\\&&&&\ddots&&&&\\&&&&&1&&&\\&&-\sin\theta&&&&\cos\theta&&\\&&&&&&&\ddots&\\&&&&&&&&1\end{array}\right)\begin{array}{l}\\\\\to p行\\\\\\\\\to q行\\\\\\\end{array}\\\begin{array}{ccccccccc}&&\text{p 列}&&&&\text{q 列}&&\end{array}\end{array}$$

$Q(p,q,\theta)$ 是一个正交矩阵，称为 Givens 旋转变换。下面分析 Givens 变换作用到对称矩阵后正交

相似的变换效果。

记 $A=(a_{ij})$， $B=Q^T(p,q,\theta)AQ(p,q,\theta)=(b_{ij})$

Q^T 左乘 A 的作用结果是 A 的 p 行和 q 行元素有所变化，其余行的元素依然如故；Q 右乘 $Q^T A$ 的作用结果是 $Q^T A$ 的 p 列和 q 列元素有所变化；其中 p、g 的行和列的交叉元素 $a_{pq},a_{qp},a_{pp},a_{qq}$ 被作用两次。由 $Q^T AQ$ 的对称性容易得到（证明略）下列公式：

$$\begin{cases} b_{ip}=b_{pi}=a_{pi}\cos\theta-a_{qi}\sin\theta\,, \quad i\neq p,q \\ b_{iq}=b_{qi}=a_{pi}\sin\theta+a_{qi}\cos\theta\,, \quad i\neq p,q \\ b_{pp}=a_{pp}\cos^2\theta+a_{qq}\sin^2\theta-a_{pq}\sin 2\theta \\ b_{qq}=a_{pp}\sin^2\theta+a_{qq}\cos^2\theta+a_{pq}\sin 2\theta \\ b_{pq}=b_{qp}=a_{pq}\cos 2\theta+\dfrac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\sin 2\theta \end{cases}$$

利用 Givens 变换的目的是要 $b_{pq}=0,\quad b_{qp}=0$，

即 $a_{pq}\cos 2\theta+\dfrac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\sin 2\theta=0$，或取θ 满足 $\cot 2\theta=\dfrac{a_{pp}-a_{qq}}{2a_{pq}}$，

记 $\boxed{s=\dfrac{a_{qq}-a_{pp}}{2a_{pq}}\,, t=tg\theta}$

由 b_{pq} 的表达式及恒等式 $tg^2\theta+2ctg2\theta tg\theta-1=0$ 可知，当 t 取

$\boxed{t=\begin{cases} t^2+2st-1=0 \quad \text{的按模较小根}, s\neq 0 \\ 1, \qquad\qquad\qquad s=0 \end{cases}}$ 可使 $b_{pq}=0,\quad b_{qp}=0$，

即当 $a_{pp}\neq a_{qq}$ 时，$tg\theta$ 取方程 $t^2+2st-1=0$ 按模最小根；当 $a_{pp}=a_{qq}$ 时，取 $tg\theta$ =1，$\theta=\dfrac{\pi}{4}$。

由 $\boxed{t=tg\theta}$，可得 $\boxed{\begin{cases} \cos\theta=\dfrac{1}{\sqrt{1+t^2}} \\ \sin\theta=\dfrac{t}{\sqrt{1+t^2}} \end{cases}}$ 记 $\boxed{\begin{cases} c=\cos\theta \\ d=\sin\theta \end{cases}}$，则当 t 按上面描述值时，

$$\boxed{\begin{cases} b_{ip}=b_{pi}=c\,a_{pi}-d\,a_{qi}\,, \qquad i\neq p,q \\ b_{iq}=b_{qi}=d\,a_{pi}+c\,a_{qi}\,, \qquad i\neq p,q \\ \quad b_{pp}=a_{pp}-t\,a_{pq} \\ \quad b_{qq}=a_{pp}+ta_{pq} \\ \quad b_{pq}=b_{qp}=0 \\ \quad b_{ij}=a_{ij} \quad i\neq p,q; \quad j\neq p,q \end{cases}}$$

易证$\sum_{i\neq j} b_{ij}^2 = \sum_{i\neq j} a_{ij}^2 - 2a_{pq}^2, \sum_{i=1}^{n} b_{ii}^2 = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}^2 + 2a_{pq}^2$,即 B 非对角元素比重小于 A 非对角元素比重。

如果选取p,q使$|a_{pq}| = \max_{i\neq j}|a_{ij}|$，那么实施以上变换的效率将更高。Jacobi 方法就是对 A 连续施行以上变换的方法。不妨记 $A = (a_{ij}) = A^{(0)} = (a_{ij}^{(0)})$，将按式加框的式子计算得到的矩阵记为 B，$B = (b_{ij}) = A^{(1)} = (a_{ij}^{(1)})$，再对$A^{(1)}$实施类似的变换，得到$A^{(2)}$，继续做下去，得到正交相似序列$A^{(0)}, A^{(1)}, A^{(2)}, \cdots$；而且后面矩阵的非对角元素比重均小于前面矩阵的非对角元素。可以证明，若任给误差控制量 ε>0，必存在充分大的 k，使得$\sum_{i\neq j}(a_{ij}^{(k)})^2 < \varepsilon$，这时$A^{(k)}$的对角元素 $a_{ii}^{(k)}, i = 1,2,\cdots,n$ 可视为 A 的特征值。

上列算法还可以进一步细化，例如，给出选取非对角线按模最大元素 $|a_{pq}| = \max_{i\neq j}|a_{ij}|$算法。在做要$a_{pq}$为零的旋转变换中，常会使原为零的非对角线元素$a_{uv}$变为非零元素。因此，当阶数大于 2 时，一般不可能通过 Jacobi 方法得到纯对角矩阵。

Jacobi 方法求得的计算结果精度一般都比较高，特征向量的正交性也较好，它的缺点是当计算稀疏矩阵的特征值时，旋转以后常不能保持原稀疏的性质，因此，Jacobi 方法用于一般阶不很高的“满矩阵”情形。

例　用 Jacobi 方法计算矩阵$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 6 \end{pmatrix}$的全部特征值

解　取$p = 1, q = 2$；$s = \frac{a_{22} - a_{11}}{2a_{12}} = \frac{3-3}{2} = 0$；$t = 1; c = \cos\theta = \sqrt{2}/2, d = \sin\theta = \sqrt{2}/2$

$$\begin{cases} a_{13}^{(1)} = a_{31}^{(1)} = a_{13}c - a_{23}d = -1.4142 \\ a_{23}^{(1)} = a_{32}^{(1)} = a_{23}c + a_{13}d = 4.2426 \\ a_{11}^{(1)} = a_{11} - ta_{12} = 2 \\ a_{22}^{(1)} = a_{22} + ta_{12} = 4 \\ a_{33}^{(1)} = a_{33} = 6 \\ a_{12}^{(1)} = a_{21}^{(1)} = 0 \end{cases}$$

即 $A^{(1)} = Q^T AQ = \begin{pmatrix} c & -d & 0 \\ d & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} c & d & 0 \\ -d & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1.4142 \\ 0 & 4 & 4.2426 \\ -1.4142 & 4.2426 & 6 \end{pmatrix}$

取$p = 2, q = 3$；$s = \frac{a_{33} - a_{22}}{2a_{23}} = \frac{6-4}{2\cdot 4.2426} = 0.2357$；

$$t=-s+\sqrt{s^2+1}=0.7917$$

$$c=1/\sqrt{1+t^2}=0.7840, d=t/\sqrt{1+t^2}=0.6207$$

即 $$A^{(2)}=Q^TA^{(1)}Q=\begin{pmatrix} c & -d & 0 \\ d & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}A^{(1)}\begin{pmatrix} c & d & 0 \\ -d & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 & 0.8778 & -1.1088 \\ 0.8778 & 0.6411 & 0 \\ -1.1088 & 0 & 9.3589 \end{pmatrix}$$

第一步将 $p=1,q=2$ 位置的元素化为零，第二步将 $p=2,q=3$ 位置的元素化为零后 $p=1,q=2$ 位置的元素 $a_{12}^{(2)}$ 又变为非零元素了，但是$|a_{12}^{(2)}|$ 比$|a_{12}^{(0)}|$的数值小。继续做下去可求出 A 的特征值为：9.52，2.29，0.183。

如果按选取非对角线按模最大元素 $|a_{pq}|=\max\limits_{i\neq j}|a_{ij}|$ 的步骤，那么，第一步选取 $p=2,q=3$ 位置的元素，将 $a_{23}^{(1)}$ 和 $a_{32}^{(1)}$ 化为零。通常，**以按模最大元素的步骤进行旋转变换，其计算速度会更快一些。**

7.4 QR 方法简介

R 矩阵是上三角矩阵

7.4.1 正交矩阵与矩阵的 QR 分解

n 阶矩阵 Q，若满足 $QQ^T=I$，称 Q 为正交矩阵，有(1) $|\det Q|=1$，(2) Q_1,Q_2 为正交阵，则 $Q=Q_1Q_2$ 仍为正交矩阵。7.3 中给出的 Given's 矩阵 $Q(p,q,\theta)$ 为正交矩阵。

若 $v\in R^n, \|v\|=1$，则矩阵 $\boxed{H=I-2vv^T}$ 称为 Householder 矩阵。它也是个正交矩阵，且满足

(1) $\det H=-1$，　　(2) H 为对称的正交矩阵，

(3) x,y 为 R^n 上向量，$\|x\|=\|y\|$，令 $v=\dfrac{y-x}{\|y-x\|}$，$H=I-2vv^T$，则有　$Hx=y$。

若 A 为 n 阶实矩阵，由线性代数定理，存在正交阵 Q，上三角阵 R，使得 $A=QR$，A 分解成正交阵 Q 与上三角阵 R，称为 A 的 QR 分解，它可通过 θ 一系列 Householder 变换实现。

7.4.2 QR 方法初步

A 为给定的 n 阶实矩阵，记 $A_1=A$，对 A_1 作 QR 分解 $A_1=Q_1R_1$，这里 Q_1 为一系列 Householder 矩阵乘积,它仍为正交阵，R_1 为上三角矩阵。记 $A_2=R_1Q_1$,对 A_2 作 QR 分解, $A_2=Q_2R_2$;记 $A_3=R_2Q_2$ 若已有 $A_k=Q_kR_k$,记 $A_{k+1}=R_kQ_k$,如此可得到 n 阶矩阵序列 $\{A_k\}$，它们满足:

(1) $\{A_k\}$ 为相似正交矩阵序列。事实上，对 A_{k+1} 作正交相似变换

$$Q_k^TA_kQ_k=Q_k^TQ_kR_kQ_k=R_kQ_k=A_{k+1}$$　　即 A_{k+1} 正交相似于 A_k。

(2)记 A_k 的元素 $(a_{ij}^{(k)})_{n\times n}$，若 A 满足一定的条件，则有

$$a_{ij}^{(k)} \to 0,\quad 当k\to\infty, 1\le i<j\le n;\qquad a_{ii}^{(k)}\to\lambda_i,\quad 当k\to\infty,\qquad i=1,2,\ldots,n$$

这里 λ_i 即为 A 的特征值，矩阵序列 $\{A_k\}$ 的这种性质称为基本收敛。

利用矩阵的 QR 分解,得到正交相似序列 $\{A_k\}$，从而求得 A 的特征值的方法，称为 QR 方法。

第 8 章 常微分方程数值解

本章主要讨论常微分方程的初值问题

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

为保证微分方程解的存在唯一性及稳定性。当 $f(x,y)$ 对 y 满足李普希兹条件，即对任意 $y,\bar{y}$，存在 $L>0$，$f(x,y)$ 满足 $|f(x,y)-f(x,\bar{y})|<L|y-\bar{y}|$，常微分方程初值问题有解。

常微分方程初值问题的**数值解**是求 $y(x)$ 在求解区间 $[a,b]$ 上剖分点列 x_n, n =1,2,…,m 的数值解 y_n。在计算中**约定** $y(x_n)$ **表示常微分方程准确解的值，** y_n 表示 $y(x_n)$ **的近似值**。

本章主要介绍解常微分方程的差分方法。这是一种通用性强应用广泛的较为简单的方法。

8.1 欧拉(Euler)公式

8.1.1 基于数值微商的欧拉公式

对于常微分方程初值问题，在求解区间 $[a,b]$ 上作等距分割的剖分，步长 $h=\dfrac{b-a}{m}$，记 $x_n=x_{n-1}+h$，$n=1,2,\cdots$，m。用数值微商的方法，即用**差商近似导数**求解常微分方程。

用向前差商近似 $y'(x)$

$y'(x_n)=f(x_n,y(x_n))$ $\quad y'(x_n)\approx\dfrac{y(x_{n+1})-y(x_n)}{h}$，得到计算 $y(x_{n+1})$ 近似值 y_{n+1} 的向前欧拉公式 $\boxed{y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)}$ 向前欧拉公式是**单步的显式格式**。

欧拉方法的几何意义

以 $f(x_0,y_0)$ 为斜率，通过点 (x_0,y_0) 做一条直线，它与直线 $x=x_1$ 的交点就是 y_1。依此类推，y_{n+1} 是以 $f(x_n,y_n)$ 为斜率过点 (x_n,y_n) 的直线与直线 $x=x_{n+1}$ 的交点。也称欧拉法为欧拉折线法。

用向后差商近似 $y'(x)$

做出 $y(x)$ 的在 $x = x_0$ 处的一阶向后差商 $y'(x_1) = f(x_1, y(x_1))$

又 $y'(x_1) \approx \dfrac{y(x_1) - y(x_0)}{h}$，$\dfrac{y(x_1) - y(x_0)}{h} = f(x_1, y(x_1))$，

得到 $y(x_1)$ 的近似值 y_1 的计算公式 $y_1 = y_0 + h\,f(x_1, y_1)$

类似地，得到向后欧拉公式 $\boxed{y_{n+1} = y_n + h\,f(x_{n+1}, y_{n+1})}$ 向后欧拉公式是**单步的隐式格式**。隐式欧拉公式，需要通过迭代法求得 y_{n+1}。其中，初始值 $y_{n+1}^{(0)}$ 由向前欧拉公式提供。

从算法结构上看，显式公式比隐式公式简单，从方法的稳定性和精度上看，多数情况下，隐式公式优于显式公式。

下列最简单的皮卡（Picard）迭代格式：

$$\boxed{\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)}) \end{cases}}, \qquad k = 0,1,2,\cdots，\text{直到 } |\,y_{n+1}^{(k+1)} - y_{n+1}^{(k)}\,| < \text{给定精度}$$

可以证明，h 充分小时，以上迭代收敛。事实上，记 $\phi(y) = y_n + hf(x_{n+1}, y)$ 则

$\phi'(y) = hf_y(x_n, y)$, h 充分小时,有 $|hf_y(x_n, y)| \le hL < 1$，其中 L 为李普希兹($Lipschitz$)常数。

用中心差商近似 $y'(x)$

由于中心差商不是稳定格式（后叙），因此，不予采用。

*8.1.2 欧拉公式的收敛性

局部截断误差

对 $y(x_{n+1})$ 在 x_n 做泰勒展开：

$$y(x_{n+1}) = y(x_n + h) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(\xi_n), \quad x_n \le \xi_n \le x_{n+1}$$

欧拉公式是由以上展开式中截断 $\dfrac{h^2}{2!}y''(\xi_n)$ 而得，故 $T_{n+1} = \dfrac{h^2}{2!}y''(\xi_n)$ 称为欧拉公式的**截断误差**或称**局部截断误差**。

若 $y(x)$ 为线性函数，则 $y''(x) \equiv 0$，这时局部截断误差为 0，由欧拉公式得到的解为精确解，故**欧拉公式是一阶方法**。

如果给定方法的局部截断误差是：$T_{n+1} = O(h^{k+1})$，则称方法是 k 阶的，或称**具有 k 阶精度**。

整体截断误差和收敛性

在计算 y_{n+1} 的局部截断误差时，是假定在 x_n 的 y_n 值是准确的前提下，即 $y(x_n) = y_n$。实际上，从计算 y_1 开始，每个 $y_k, (k = 1,2,\ldots,n)$ 都有截断误差，在 y_k 的误差会扩散到 y_{k+1} 中，将这

些前列点的误差累计到计算 $y(x_{k+1})$ 中，称为**整体截断误差**。它将影响到方法的收敛性，我们将估计这一误差。

由微分方程理论，为保证微分方程解的**存在唯一性**及**稳定性**。通常 $f(x,y)$ 对 y 应满足李普希兹条件，即对任意 $y,\bar{y}$ ，存在 $L>0$ ， $f(x,y)$ 满足 $\boxed{|f(x,y)-f(x,\bar{y})|< L|y-\bar{y}|}$

$$e_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1} = y(x_n) + h\,f(x_n,y(x_n)) + \frac{h^2}{2}y''(\xi_n) - (y_n + h\,f(x_n,y_n))$$

$$= y(x_n) - y_n + h[f(x_n,y(x_n)) - f(x_n,y_n)] + \frac{h^2}{2}y''(\xi_n)$$

曾记 $T_{n+1} = \frac{h^2}{2!}y^{''}(\xi_n)$ ，故有

$$|e_{n+1}| \le |y(x_n) - y_n| + |h[f(x_n,y(x_n)) - f(x_n,y_n)]| + |\frac{h^2}{2}y''(\xi_n)|$$

$$|\le |e_n| + hL\ |y(x_n) - y_n| + |T_{n+1}|$$

$$= (1+hL)|e_n| + |T_{n+1}|$$

记 $T = \max_k |T_k| = O(h^2)$，则有 $|e_{n+1}| \le (1+Lh)|e_n| + T$

因此有 $|e_{n+1}| \le (1+Lh)[(1+Lh)|e_{n-1}|+T] + T \le \cdots$

$$\le (1+Lh)^{n+1}|e_0| + T + (1+Lh)T + (1+Lh)^2T + \cdots + (1+Lh)^nT$$

$$= (1+Lh)^{n+1}|e_0| + \frac{1-(1+Lh)^{n+1}}{1-(1+Lh)}T < (1+Lh)^{n+1}|e_0| + \frac{(1+Lh)^{n+1}}{Lh}T$$

$$= (1+Lh)^{n+1}[|e_0| + \frac{T}{Lh}]$$

对 $z>0$，由公式 $(1+z)^n \le e^{nz}$，最终可得：$\boxed{|e_{n+1}| \le e^{(n+1)Lh}[|e_0| + \frac{T}{Lh}] \ \le e^{L(b-a)}[|e_0| + \frac{T}{Lh}]}$

其中项 $e^{L(b-a)}|e_0|$ 由原始误差引起，当初始值为精确值时，这一项的值是 0， $e^{L(b-a)}\frac{T}{Lh}$ 仍是由截断引起，由于 $T = O(h^2)$，当 $h \to 0$ 时， $e^{L(b-a)}\frac{T}{Lh} = O(h) \to 0$，即欧拉公式是收敛的。

8.1.3 基于数值积分的近似公式

对常微分方程 $\frac{dy}{dx} = f(x,y)$ 两边在区间 $[x_n, x_{n+1}]$ 上积分得

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y)dx$$

即 $$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y)dx = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(t)dt$$

用矩形近似积分公式计算 $\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(t)dt$

取 $y'(t) \approx y'(x_n) = f(x_n, y(x_n))$， 则有 $\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(t)dt \approx (x_{n+1} - x_n)y'(x_n) = hf(x_n, y(x_n))$

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y)dx = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(t)dt$$

得向前欧拉公式: $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$，

取 $y'(t) \approx y'(x_{n+1}) = f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$ $\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(t)dt \approx (x_{n+1} - x_n)y'(x_{n+1}) = hf(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$

得向后欧拉公式: $y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$

用梯形近似积分公式计算 $\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(t)dt$

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(t)dt \approx \frac{1}{2}(x_{n+1} - x_n)(y'(x_{n+1}) + y'(x_n)) = \frac{h}{2}(f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1})))$$

得到梯形公式: $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}))$

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

梯形公式也是隐式格式，可用皮卡迭代或牛顿迭代格式计算 y_{n+1}。

预估-校正公式:
$$\boxed{\begin{cases} \bar{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1})] \end{cases}}$$

也称为改进的欧拉公式

例题见教材

8.2 龙格-库塔方法

8.2.1 二阶龙格-库塔方法

常微分方程初值问题 $\begin{cases} y'(x) = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$ $a \le x \le b$

做 $y(x+h)$ 在 x 点的泰勒展开

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \cdots + \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x) + \frac{h^{(p+1)}}{(p+1)!}y^{(p+1)}(x + \theta h)$$

$$= y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \cdots + \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x) + T$$

这里 $0 \le \theta \le 1, T = O(h^{p+1})$。取 $x = x_n$，就有

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \cdots + \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x) + T_{n+1}$$

取 $p = 1, x = x_n$ $\quad y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + T_{n+1} = y(x_n) + hf(x_n, y(x_n)) + T_{n+1}$

截断T_{n+1}可得到$y(x_{n+1})$近似值y_{n+1}的计算公式$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$，得到欧拉公式。

若取$p = 2$，截断T_{n+1}可得到$y(x_{n+1})$近似值y_{n+1}的计算公式：

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

为二阶方法，精度优于一阶，但计算y_{n+1}时，要计算f, f_x, f_y 在(x_n, y_n)点的值，不可取。

龙格-库塔设想用$c_1 f(x_n, y(x_n)) + c_2 f(x_n + ah, y(x_n) + bhf(x_n, y(x_n))$

逼近 $\quad f(x_n, y(x_n)) + \frac{h}{2}[f_x(x_n, y(x_n)) + f_y(x_n, y(x_n))f(x_n, y(x_n))]$

得到数值公式$y_{n+1} = y_n + h[c_1 f(x_n, y_n) + c_2 f(x_n + ah, y_n + bhf(x_n, y_n))]$

或更一般地写成

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(c_1 k_1 + c_2 k_2) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_n + ah, y_n + bhk_1) \end{cases} \qquad \begin{cases} y(x_{n+1}) = y(x_n) + h(c_1 k_1 + c_2 k_2) \\ k_1 = f(x_n, y(x_n)) \\ k_2 = f(x_n + ah, y(x_n) + bhk_1) \end{cases}$$

对$c_1 f(x_n, y(x_n)) + c_2 f(x_n + ah, y(x_n) + bhf(x_n, y(x_n))$在$(x_n, y(x_n))$点展开得到

$$c_1 f(x_n, y(x_n)) + c_2 f(x_n + ah, y(x_n) + bhf(x_n, y(x_n))$$

$$= c_1 f(x_n, y(x_n)) + c_2[f(x_n, y(x_n)) + ahf_x(x_n, y(x_n)) + bhf_y(x_n, y(x_n))f(x_n, y(x_n)) + O(h^2)]$$

$$= (c_1 + c_2)f(x_n, y(x_n)) + \frac{h}{2}[2c_2 af_x(x_n, y(x_n)) + 2c_2 bhf_y(x_n, y(x_n))f(x_n, y(x_n)) + O(h^2)]$$

$$\begin{aligned} y(x_{n+1}) = y(x_n) + h\{&(c_1 + c_2)f(x_n, y(x_n)) \\ &+ \frac{h}{2}[2c_2 af_x(x_n, y(x_n)) + 2c_2 bhf_y(x_n, y(x_n))f(x_n, y(x_n))]\} + O(h^3) \end{aligned}$$

与$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h\{f(x_n, y(x_n))$

$$+ \frac{h}{2!}[f_x(x_n, y(x_n)) + f_y(x_n, y(x_n))f(x_n, y(x_n))]\} + T_{n+1}$$ 比较有

当c_1, c_2, a, b满足

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ 2c_2 a = 1 \\ 2c_2 b = 1 \end{cases}$$

达到二阶逼近效果。这是四个未知数的三个方程，显然方程组有无数组解。

若取$c_1 = \dfrac{1}{2}, c_2 = \dfrac{1}{2}, a = 1, b = 1$，则有二阶龙格-库塔公式：

$$\boxed{\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_n + h, y_n + hk_1) \end{cases}}$$

若取$c_1 = 0, c_2 = 1, a = \dfrac{1}{2}, b = \dfrac{1}{2}$，则得另一种形式的二阶龙格-库塔公式，也称中点公式：

$$\boxed{\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hk_2 \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_n + \dfrac{h}{2}, y_n + \dfrac{h}{2}k_1) \end{cases}}$$

从公式建立过程中可看到，二阶龙格-库塔公式的局部截断误差仍为$\boxed{O(h^3)}$。是**二阶精度**的计算公式。类似地想法，可建立高阶的龙格-库塔公式，同理可知四阶龙格-库塔公式的局部截断误差界为$\boxed{O(h^5)}$的**四阶精度**计算公式。

8.2.2 四阶龙格-库塔格式

常用的三阶，四阶龙格-库塔计算公式见教材

三阶龙格-库塔公式

$$\boxed{\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(c_1k_1 + c_2k_2 + c_3k_3) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_n + a_2h, y_n + hb_2k_1) \\ k_3 = f(x_n + a_3h, y_n + b_3hk_1 + b_4hk_2) \end{cases}}$$

四阶龙格-库塔公式

$$\boxed{\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_n + \dfrac{1}{2}h, y_n + \dfrac{1}{2}hk_1) \\ k_3 = f(x_n + \dfrac{1}{2}h, y_n + \dfrac{1}{2}hk_2) \\ k_4 = f(x_n + h, y_n + hk_3) \end{cases}}$$

例　用四阶龙格-库塔公式 解初值问题 $\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = y^2 \cos x \\ y(0) = 1 \end{cases}$　$0.1 \le x \le 0.8$

解　取步长 $h=0.2$，计算公式为

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+\dfrac{0.2}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4) \\ k_1=y_n^2\cos x_n \\ k_2=(y_n+0.1k_1)^2\cos(x_n+0.1) \\ k_3=(y_n+0.1k_2)^2\cos(x_n+0.1) \\ k_4=(y_n+0.2k_3)^2\cos(x_n+0.2) \end{cases}$$

计算结果列表中。

n	x_n	y_n	$y(x_n)$	$\lvert y_n-y(x_n)\rvert$
1	0.2	1.24789	1.24792	0.00003
2	0.4	1.63762	1.63778	0.00016
3	0.6	2.29618	2.29696	0.00078
4	0.8	3.53389	3.53802	0.00413

8.2.3 步长的自适应

欧拉方法和龙格-库塔方法在计算 y_{n+1} 时仅用到前一步 y_n 的值，我们称这样的方法为**单步法**。在单步法计算中根据需要可以取等步长或变步长。对于 $y(x)$ 变化平缓的区段，步长可以取大一些；而对于 $y(x)$ 变化激烈的区段，则步长可以取小一些。怎样合理选取步长?

以计算 y_1 为例，已知 y_0 的数值，取 $h=h_0$ 做初始步长，ε 是给定的控制精度，用欧拉法或龙格-库塔公式的计算公式。

记 $y_1^{(h)}$ 为由 y_0 和取步长h算出的 y_1，记 $y_1^{(h/2)}$ 为由 y_0 和取步长 $h/2$ 算出的 y_1，即 $y_1^{(h)}$，$y_1^{(h/2)}$ 均是 $y(x_0+h)$ 的近似值，当 $|y_1^{(h)}-y_1^{(h/2)}|<\varepsilon$，逐步放大步长，$h\leftarrow 2h$，直到 $|y_1^{(h)}-y_1^{(h/2)}|>\varepsilon$ 时为止，最后取 $h/2$ 为步长的值。而当 $|y_1^{(h)}-y_1^{(h/2)}|>\varepsilon$，逐步缩小步长，$h\leftarrow h/2$，直到 $|y_1^{(h)}-y_1^{(h/2)}|<\varepsilon$ 时为止，取 h 为步长的值。

8.3 线性多步法

线性多步法的三个基本要素：

(1)积分区间 $[x_{n-p},x_{n+1}]$；　(2)构造 $y'(t)$ 的 q 次插值多项式；　(3) $y'(t)$ 是显式还是隐式（若计算 y_{n+1} 时只需要 y_n，则是显式；若计算 y_{n+1} 还包括 y_{n+1}，则是隐式）

常微分方程初值问题 $\begin{cases}\dfrac{dy}{dx}=f(x,y)\\ y(a)=y_0\end{cases}$，（$a\le x\le b$）

与积分 $y(x)=y(x^*)+\int_{x^*}^{x}y'(t)dt$ 等价，在8.1.3中用数值积分公式建立了欧拉和梯形公式，

下面给出一些更一般的用数值积分工具求解常微分方程初值问题的方法。当积分节点中包含 x_{n+1} 时称为隐式公式，否则称为显式公式。分别取 x, x^* 为剖分点 x_{n+1}, x_{n-p} ，有

$$y(x_{n+1}) = y(x_{n-p}) + \int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} y'(t)dt$$

若用积分节点 $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-q}$ 构造插值多项式近似 $y'(t)$ ，在区间 $[x_{n-p}, x_{n+1}]$ 上计算数值积分 $\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} y'(t)dt,$ 则称构造计算 y_{n+1} 的方法为**线性多步法**。这是**显式公式**。

[q 次显式公式需要的积分节点 $(x_n, y'_n)(x_{n-1}, y'_{n-1})\dots(x_{n-q}, y'_{n-q})$]

若以 $x_{n+1}, x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n+1-q}$ 积分节点构造插值多项式近似 $y'(x)$，在区间 $[x_{n-p}, x_{n+1}]$ 上计算数值积分 $\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} y'(t)dt,$ 则为**隐式公式**。

[q 次隐式公式需要的积分节点 $(x_{n+1}, y'_{n+1})(x_n, y'_n)\dots(x_{n-q+1}, y'_{n-q+1})$]

与通常数值积分不同的是，在线性多步法公式中，有两个控制量 p 和 q ，**p 控制积分区间，q 控制插值节点。**

特别取 $p = 0$，有 $y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx$

若积分 $\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx$ 用关于积分节点 $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-q}$ 的数值积分近似，就可得到显式的阿达姆斯公式。在计算中阿达姆斯的稳定性较好。

例 构造 $p = 0, q = 1$，的显式格式 $y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} [l_0(x)y'(x_n) + l_1(x)y(x_{n-1}) + R(x)]dx$

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} [l_0(x)y'(x_n) + l_1(x)y'(x_{n-1})]dx = y_n + h(\alpha_0 f(x_n, y_n) + \alpha_1 f(x_{n-1}, y_{n-1}))$$

$$\alpha_0 h = \int_{x_n}^{x_{n+1}} l_0(x)dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \frac{x - x_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} dx = \frac{3}{2}h \quad \alpha_1 h = \int_{x_n}^{x_{n+1}} l_1(x)dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \frac{x - x_n}{x_{n-1} - x_n} dx = -\frac{1}{2}h$$

$$T_{n+1} = \int_{x_n}^{x_{n+1}} R(x)dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \frac{y^{(3)}(\eta)}{2}(x - x_n)(x - x_{n-1})dx = \frac{5}{12}h^3 y^{(3)}(\xi)$$

即 $$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \frac{h}{2}[3f(x_n, y(x_n)) - f(x_{n-1}, y(x_{n-1}))] + T_{n+1}$$

截断 T_{n+1} 可得到 $y(x_{n+1})$ 近似值 y_{n+1} 的计算公式：$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[3f(x_n, y_n) - f(x_{n-1}, y_{n-1})]$

上式称为**二阶显式阿达姆斯公式**。

类似可得三阶显式阿达姆斯公式：

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{12}[23f(x_n,y_n)-16f(x_{n-1},y_{n-1})+5f(x_{n-2},y_{n-2})] \qquad T_{n+1}=\frac{3}{8}h^4y^{(4)}(\xi)$$

四阶显式阿达姆斯公式：

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}[55f(x_n,y_n)-59f(x_{n-1},y_{n-1})+37f(x_{n-2},y_{n-2})-9f(x_{n-3},y_{n-3})]$$

$$T_{n+1}=\frac{251}{720}h^5y^{(5)}(\xi)$$

若积分 $\int_{x_n}^{x_{n+1}}y'(x)dx$ 用关于积分节点 $x_{n+1},x_n,\ldots,x_{n+1-q}$ 的数值积分近似，得到隐式的阿达姆斯公式。隐式格式需要通过迭代求解。它们分别为

二阶隐式阿达姆斯公式（也称为梯形公式）

自己推导一下略

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})] \qquad T_{n+1}=-\frac{1}{12}h^3y^{(3)}(\xi)$$

三阶隐式阿达姆斯公式

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{12}[5f(x_{n+1},y_{n+1})+8f(x_n,y_n)-f(x_{n-1},y_{n-1})] \qquad T_{n+1}=-\frac{1}{24}h^4y^{(4)}(\xi)$$

四阶隐式阿达姆斯公式

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}[9f(x_{n+1},y_{n+1})+19f(x_n,y_n)-5f(x_{n-1},y_{n-1})+f(x_{n-2},y_{n-2})]$$

$$T_{n+1}=-\frac{19}{720}h^5y^{(5)}(\xi)$$

例 建立 $p=1,q=2$ 显式公式

解 $$y_{n+1}=y_{n-1}+\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}}[l_0(x)f(x_n,y_n)+l_1(x)f(x_{n-1},y_{n-1})+l_2(x)f(x_{n-2},y_{n-2}))]dx$$

$$y_{n+1}=y_{n-1}+h[a_0f(x_n,y_n)+a_1f(x_{n-1},y_{n-1})+a_2f(x_{n-2},y_{n-2})]$$

$$a_0h=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}}\frac{(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})}{(x_n-x_{n-1})(x_n-x_{n-2})}dx=\frac{7}{3}h$$

$$a_1h=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}}\frac{(x-x_n)(x-x_{n-2})}{(x_{n-1}-x_n)(x_{n-1}-x_{n-2})}dx=-\frac{2}{3}h$$

$$a_2h=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}}\frac{(x-x_n)(x-x_{n-1})}{(x_{n-2}-x_n)(x_{n-2}-x_{n-1})}dx=\frac{1}{3}h$$

计算格式：

$$y_{n+1}=y_{n-1}+\frac{h}{3}[7f(x_n,y_n)-2f(x_{n-1},y_{n-1})+f(x_{n-2},y_{n-2})]$$

其中：$n=2,3,\cdots,m-1.$，$h=\dfrac{b-a}{m}$，用龙格-库塔公式计算 y_1,y_2 。

截断误差

$$T_{n+1}=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}}\frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(x-x_{n-2})(x-x_{n-1})(x-x_n)dx$$

$$=\frac{1}{6}\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}}f^{(3)}(\xi)(x-x_{n-2})(x-x_{n-1})(x-x_n)dx=\frac{1}{3}h^4y^{(4)}(\eta)$$

$f^{(3)}(x,y)=y^{(4)}(x)$

三步三阶的显式格式

例　构造 P=2，$q=2$ 的隐式格式

解　取 $[x_{n-2},x_{n+1}]$为积分区间；

以$(x_{n+1},f(x_{n+1}))$，$(x_n,f(x_n))$，$(x_{n-1},f(x_{n-1}))$构造拉格拉日插值多项式。

$$y_{n+1}=y_{n-2}+h[\beta_0f(x_{n+1},y_{n+1})+\beta_1f(x_n,y_n)+\beta_2f(x_{n-1},y_{n-1})]$$

则

$$\beta_0h=\int_{x_{n-2}}^{x_{n+1}}\frac{(x-x_n)(x-x_{n-1})}{(x_{n+1}-x_n)(x_{n+1}-x_{n-1})}dx=\frac{3}{4}h$$

$$\beta_1h=\int_{x_{n-2}}^{x_{n+1}}\frac{(x-x_{n+1})(x-x_{n-1})}{(x_n-x_{n+1})(x_n-x_{n-1})}dx=0$$

$$\beta_2h=\int_{x_{n-2}}^{x_{n+1}}\frac{(x-x_{n+1})(x-x_n)}{(x_{n-1}-x_{n+1})(x_{n+1}-x_n)}dx=\frac{9}{4}h$$

计算格式：$y_{n+1}=y_{n-2}+\dfrac{h}{4}[3f(x_{n+1},y_{n+1})+9f(x_{n-1},y_{n-1})]$

截断误差：$T_{n+1}=\dfrac{1}{6}\displaystyle\int_{x_{n-2}}^{x_{n+1}}y^{(4)}(\xi)(x-x_{n+1})(x-x_n)(x-x_{n-1})dx=-\dfrac{3}{8}h^4y^{(4)}(\eta)$

为了避免迭代，可用预估-校正公式

$$\boxed{\begin{cases}\bar{y}_{n+1}=y_{n-2}+\dfrac{h}{3}[7f(x_n,y_n)-2f(x_{n-1},y_{n-1})+f(x_{n-2},y_{n-2})]\\[2ex] y_{n+1}=y_{n-2}+\dfrac{h}{4}[3f(x_{n+1},\bar{y}_{n+1})+9f(x_{n-1},y_{n-1})]\end{cases}}$$

带入显式格式求 $\bar{y}_{n+1}$

带入显式格式求 y_{n+1}

替换上面的计算公式。

8.4 常微分方程组的数值解法

8.4.1 一阶常微分方程组的数值解法

将由 m 个一阶方程组成的常微分方程初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{dy_1}{dx}=f_1(x,y_1,y_2,...,y_m)\\ \dfrac{dy_2}{dx}=f_2(x,y_1,y_2,...,y_m)\\ \cdots\\ \dfrac{dy_m}{dx}=f_m(x,y_1,y_2,...,y_m), \qquad (a\le x\le b)\\ y_1(a)=\eta_1\\ y_2(a)=\eta_2\\ \cdots\\ y_m(a)=\eta_m\end{cases}$$

写成向量形式：

$$\begin{cases}\dfrac{dY}{dx}=F(x,Y);\\ Y(a)=\eta\end{cases}$$

其中

$$Y(x)=\begin{pmatrix}y_1(x)\\ y_2(x)\\ \cdots\\ y_m(x)\end{pmatrix},\quad F(x,y)=\begin{pmatrix}f_1(x,y_1,\cdots,y_m)\\ f_2(x,y_1,\cdots,y_m)\\ \cdots\\ f_m(x,y_1,\cdots,y_m)\end{pmatrix},\quad \eta=\begin{pmatrix}\eta_1\\ \eta_2\\ \cdots\\ \eta_m\end{pmatrix}$$

解常微分方程的欧拉方法、龙格-库塔方法等各种方法，都可以平行地应用到常微分方程组的数值解中。为了叙述方便，下面以两个方程组为例，给出相应的计算公式。

常微分方程组

$$\begin{cases}\dfrac{dy}{dx}=f(x,y,z)\\ \dfrac{dz}{dx}=g(x,y,z) \qquad (a\le x\le b)\\ y(a)=y_0\\ z(a)=z_0\end{cases}$$

欧拉公式

$$\begin{cases}y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n,z_n)\\ z_{n+1}=z_n+hg(x_n,y_n,z_n)\end{cases}$$

要算一个 y，算一个 z，再算一个 y，再算一个 z…而不能算完所有 y 之后再算所有 z

梯形预估-校正公式

$$\begin{pmatrix}\bar{y}_{n+1}\\ \bar{z}_{n+1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}y_n\\ z_n\end{pmatrix}+h\begin{pmatrix}f(x_n,y_n,z_n)\\ g(x_n,y_n,z_n)\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}y_{n+1}\\ z_{n+1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}y_n\\ z_n\end{pmatrix}+\frac{h}{2}\left[\begin{pmatrix}f(x_n,y_n,z_n)\\ g(x_n,y_n,z_n)\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}f(x_{n+1},\bar{y}_{n+1},\bar{z}_{n+1})\\ g(x_{n+1},\bar{y}_{n+1},\bar{z}_{n+1})\end{pmatrix}\right]$$

例 两种果树寄生虫，其数量分别是$u=u(t),v=v(t)$，其中一种寄生虫以吃另一种寄生虫

为生，两种寄生虫的增长函数如下列常微分方程组所示，预测 3 年后这一对寄生虫数量。

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = 0.09u(1-\dfrac{u}{20}) - 0.45uv \\ \dfrac{dv}{dt} = 0.06v(1-\dfrac{v}{15}) - 0.001uv \\ u(0) = 1.6 \\ v(0) = 1.2 \end{cases}$$

解 记 $\begin{cases} f(u,v) = 0.09u(1-\dfrac{u}{20}) - 0.45uv \\ g(u,v) = 0.06v(1-\dfrac{v}{15}) - 0.001uv \end{cases}$

在本例中 $f(t,u,v) = f(u,v), g(t,u,v) = g(u,v)$，用欧拉预估-校正公式

$$\begin{pmatrix} \overline{u}_{n+1} \\ \overline{v}_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} + h\begin{pmatrix} f(u_n, v_n) \\ g(u_n, v_n) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} u_{n+1} \\ v_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} + \frac{h}{2}\left[\begin{pmatrix} f(u_n, v_n) \\ g(u_n, v_n) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f(\overline{u}_{n+1}, \overline{v}_{n+1}) \\ g(\overline{u}_{n+1}, \overline{v}_{n+1}) \end{pmatrix}\right]$$

取 $h = 1$，计算结果如表。

t（年）	$u(t)$	$v(t)$
1	1.6	1.2
2	1.02457	1.26834
3	0.640912	1.3366
4	0.391211	1.41077

8.4.2 高阶常微分方程数值方法

将高阶方程化为一阶方程组

*8.5 常微分方程的稳定性

用欧拉公式 $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$ 计算 y_{n+1} 时，假设计算中的某一步有误差，而以后的计算是精确的，那么这一步的误差对以后的计算有何影响？如果随着计算的进程这一步的误差对以后的影响逐步消失，我们称方法是绝对稳定的。如果这一步的误差在以后的计算中恶性放大，则称方法是不稳定的。还有其它的一些稳定性定义。在选用方法时，方法的绝对稳定性是最为重要的指标。不绝对稳定的方法是不能采用的。讨论绝对稳定性是把方法用到最为典型的微分方程上进行的。

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = \lambda\, y \\ y(a) = y_0 \end{cases} \quad a \le x \le b\text{，}\lambda\text{是复数，} \operatorname{Re}\lambda < 0$$

例 讨论向前欧拉方法的稳定性。

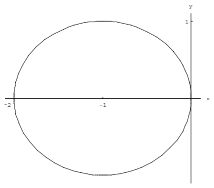
解 向前欧拉方法计算公式： $y_{n+1} = y_n + \lambda h y_n$ （1）

若 y_n 有误差 ρ_n，记 $y^*_n = y_n + \rho_n$ 那 y_{n+1} 就有误差 ρ_{n+1}，记为 $y^*_{n+1} = y_{n+1} + \rho_{n+1}$

y_{n+1}^*满足　　$y_{n+1}^* = y_n^* + \lambda\ hy_n^*$　　　（2）

（2）-（1）得到　$\rho_{n+1} = \rho_n + \lambda h\rho_n = (1+\lambda h)\rho_n$　　或　　$\dfrac{|\rho_{n+1}|}{|\rho_n|} = |1+\lambda h|$

当$|1+\lambda h| < 1$时，即λh落在如图 8 的单位圆上时有$\dfrac{|\rho_{n+1}|}{|\rho_n|} < 1$，误差逐次衰减，方法是绝对稳定的。图上的单位圆，称为**绝对稳定区域**。



例　讨论向后欧拉方法的稳定性。

解　向后欧拉方法计算公式：$y_{n+1} = y_n + \lambda\ hy_{n+1}$　　$y_{n+1}^* = y_n^* + \lambda hy_{n+1}^*$

误差方程：$y_{n+1}^* - y_{n+1} = y_n^* - y_n + \lambda h(y_{n+1}^* - y_{n+1})$　　$\rho_{n+1} = \rho_n + \lambda\ h\rho_{n+1}$

计算相邻两步误差的比值　$\left|\dfrac{\rho_{n+1}}{\rho_n}\right| = \dfrac{1}{|1-\lambda h|}$

当　$\mathrm{Re}\,(\lambda) < 0$，恒有$|\dfrac{\rho_{n+1}}{\rho_n}| = \dfrac{1}{|1-\lambda\ h|}$<1，当绝对稳定区域是左半平面时，则称在这个数值方法是 A **稳定**的，或称**无条件绝对稳定**。

可以证明，龙格—库塔方法和隐式的阿达姆斯方法都是绝对稳定的，中心差分法是不稳定的。