计　算　方　法

2020 年春季学期 课程论文


院系（所） 计算机科学与技术学院
专　业 软件工程
学　制 四 年（大写）
入学时间 2018 年 8 月 17 日
发证日期 2018 年 9 月 25 日
补发日期 年 月 日
有效期至 年 月 日
姓　名 郭茁宁 性别 男
学　号 1183710109
身份证号 350581200004173518

籍贯：福建省石狮市

姓名　郭茁宁

学号　1183710109

院系　计算机科学与技术学院

专业　软件工程

哈尔滨工业大学

0 目录

1 引言 4

2 插值与拟合 4

2.1 LAGRANGE 插值多项式 5

2.2 NEWTON 插值多项式 5

2.3 分段线性插值 6

2.4 HERMITE 插值 6

2.5 曲线拟合的最小二乘法 6

2.5.1 直线拟合 6

2.5.2 多项式拟合 7

2.6 插值缺陷 RUNGE 现象 8

2.7 典型算例 8

3 数值积分 9

3.1 NEWTON-COTES 求积公式 10

3.2 复化求积公式 11

3.3 ROMBERG 求积算法 11

3.4 数值积分算法比较性分析 12

3.5 典型算例 13

4 非线性方程数值解法 15

4.1 二分法 15

4.2 迭代法 16

4.3 迭代过程的收敛性 17

4.3.1 整体收敛性 17

4.3.2 局部收敛性 17

4.4 迭代过程的收敛速度 17

4.5 AITKEN 加速方法 18

4.6 弦截法 18

4.7 NEWTON 迭代法 18

4.8 NEWTON 迭代法的初始值选取 19

4.9 典型算例 19

5 常微分方程初值问题数值解法 20

5.1 单步法 21

5.1.1 Euler 方法及其改进形式 21

5.1.2 Runge-Kutta 方法 22

5.1.3 单步法的性质 22

5.2 线性多步法 23

5.2.1 线性多步法一般公式 23

5.2.2 Adams 显式（外推）公式 24

5.2.3 Adams 隐式（内插）公式 24

5.3 典型算例 25

6 解线性方程组 27

6.1 直接法 27

6.1.1 消去法 28

6.1.2 矩阵三角分解法 29

6.1.3 向量、矩阵的范数及方程组的性态 32

6.1.4 方法的稳定性与方程的良病态 34

6.2 迭代法 34

6.2.1 Jacobi 迭代法 34

6.2.2 Gauss-Seidel 迭代法 35

6.2.3 迭代法的收敛性分析 35

6.3 典型算例 36

7 结语 39

8 参考文献 39

数值分析算法概述和分析

摘要：数值分析作为是数学的一个重要分支，着重于研究用计算机求解数学问题的数值计算方法及其理论、各种数学问题求解的数值计算方法，是科学和工程计算问题的理论基础。本论文将总结本门课程所学到的若干典型方法及每个方法所能解决的问题（插值与拟合、数值积分、非线性方程数值解法、常微分方程初值问题数值解法、解线性方程组），每类问题的主要算法提要、特点、适用范围、典型算例。

关键词：数值分析；计算方法；误差；方程；插值；拟合；积分；常微分方程

1 引言

随着电子计算机技术的发展，数值方法在工程技术领域中应用越来越广泛，且已成为数学与计算机之间的桥梁，数值分析是研究各种数学问题求解的数值计算方法。是科学和工程计算问题的理论基础。学习数值分析法对工程实践有重要的意义。所谓数值分析(或计算方法)，主要是为用计算机解决数学问题的方法及其理论，是一门内容丰富、研究方向深刻、实用性很强的数学课程。而算法则是为计算机解决数学问题而构造的能用数值计算的实施方案。

2 插值与拟合

设函数$y=f(x)$在区间$[a,b]$上有定义，且已知它在$[a,b]$上$n+1$个互异点$\{x_i\}_{i=0}^{n}$上的函数值为$\{y_i\}_{i=0}^{n}$，求一个次数$\leq n$的多项式$P_n(x)$，满足条件

$$P_n(x_i)=y_i \quad (i=0,1,\cdots,n)$$

称这类问题为n次代数插值问题,称$P_n(x)$为函数$f(x)$的n次代数插值多项式,称点$x_0,x_1,\dots,x_n$为插值节点。满足上式的条件的n次代数插值多项式$P_n(x)$是存在且唯一的。

Lagrange 插值多项式$L_n(x)$和 Newton 插值多项式$N_n(x)$是 n 次代数插值问题的解$P_n(x)$的两种表示形式.

2.1 Lagrange 插值多项式

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

其中 $l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}$称为以$x_0, x_1, \dots, x_n$为插值节点的 n 次 Lagrange 插值基函数.

定理 设 $L_n(x)$是过点$x_0, x_1, \dots, x_n$的 n 次 Lagrange 插值多项式, 若 $f(x)$在$[a, b]$上存在 n+1 阶导数，则对任意给定的$x \in [a, b]$，总存在一点$\xi \in (a, b)$（依赖于 x）使

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

2.2 Newton 插值多项式

Newton 插值多项式

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

其余项为

$$R_n(x) = f(x) - N_n(x) = f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

Newton 向前插值公式

$$N_n(x) = N_n(x_0 + th) = f_0 + \frac{t}{1!}\Delta f_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f_0 + \cdots + \frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f_0$$

其余项为

$$R_n(x) = R_n(x_0 + th) = \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}t(t-1)\cdots(t-n)\cdot f^{(n+1)}(\xi)$$

Newton 向后插值公式

$$N_n(x) = N_n(x_n + th) = f_n + \frac{t}{1!}\nabla f_n + \frac{t(t+1)}{2!}\nabla^2 f_n + \cdots + \frac{t(t+1)\cdots(t+n-1)}{n!}\nabla^n f_n$$

的余项为

$$R_n(x) = R_n(x_n + th) = \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}t(t+1)\cdots(t+n)f^{(n+1)}(\xi)$$

2.3 分段线性插值

设在区间[a, b]上给定 n+1 个插值节点

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$$

和相应的函数值$y_0, y_1, \cdots, y_n$，求作一个插值函数$\phi(x)$，具有性质

1°$\phi(x_i) = y_i \quad (i = 0,1,\cdots,n)$；

2°$\phi(x)$在每个小区间[x_i, x_{i+1}]（$i = 0, 1, \ldots, n-1$）上是线性函数.

2.4 Hermite 插值

设已知函数 $f(x)$在插值区间[a, b]上 n+1 个互异的节点$x_0, x_1, \cdots, x_n$上的函数值 $y_i = f(x_i)$及一阶导数值$m_i = f'(x_i) \quad (i = 0,1,\cdots,n)$，构造一个插值函数$H_{2n+1}(x)$，使其满足条件

1°$H_{2n+1}(x)$是次数$\leq 2n+1$的多项式

2°$H(x_i) = y_i, \quad H'(x_i) = m_i \quad (i = 0,1,\cdots,n)$ （2-2）

称这类插值问题为 Hermite 插值问题.

满足条件（2-2）的 Hermite 插值问题的解 H_{2n+1}是存在且唯一的，其表达式为

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n}[1 - 2l_i'(x_i)(x - x_i)]l_i^2(x)y_i + \sum_{i=0}^{n}(x - x_i)l_i^2(x)m_i$$

若 $f(x)$在[a, b]上有 2n+2 阶导数，则对任意$x \in [a,\ b]$，总存在一点$\xi \in (a,\ b)$，使

$$f(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}(x - x_0)^2(x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2$$

2.5 曲线拟合的最小二乘法

2.5.1 直线拟合

对于给定的一组数据$(x_i, y_i) \quad (i = 1,2,\cdots,N)$，求作一个一次式$y = a + bx$，使$Q = \sum_{i=1}^{N}[y_i - (a + bx_i)]^2$最小.

对于直线拟合，a、b 应满足的条件是

$$\begin{cases} aN + b\Sigma x_i = \Sigma y_i \\ a\Sigma x_i + b\Sigma x_i^2 = \Sigma x_i y_i \end{cases}$$

其中Σ表示下标 i 从 1 到 N 求和。

2.5.2 多项式拟合

对于给定的一组数据(x_i,y_i) $(i=1,2,\cdots,N)$，求作 m 次式（$m \ll N$）$y=\sum_{j=0}^{m} a_j x^j$ 使

$$Q=\sum_{i=1}^{N}(y_i-\sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j)^2$$

最小.

对于多项拟合，a_k $(k=0,1,\cdots,m)$应满足

$$\begin{cases} a_0 N + a_1 \Sigma x_i + \cdots + a_m \Sigma x_i^m = \Sigma y_i \\ a_0 \Sigma x_i + a_1 \Sigma x_i^2 + \cdots + a_m \Sigma x_i^{m+1} = \Sigma x_i y_i \\ \quad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \\ a_0 \Sigma x_i^m + a_1 \Sigma x_i^{m+1} + \cdots + a_m \Sigma x_i^{2m} = \Sigma x_i^m y_i \end{cases}$$

式中Σ表示下标 i 从 1 到 N 求和.

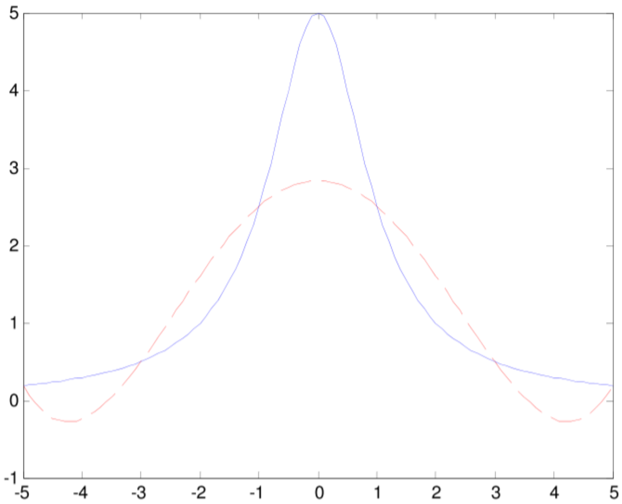

图 1 低阶 Lagrange 插值

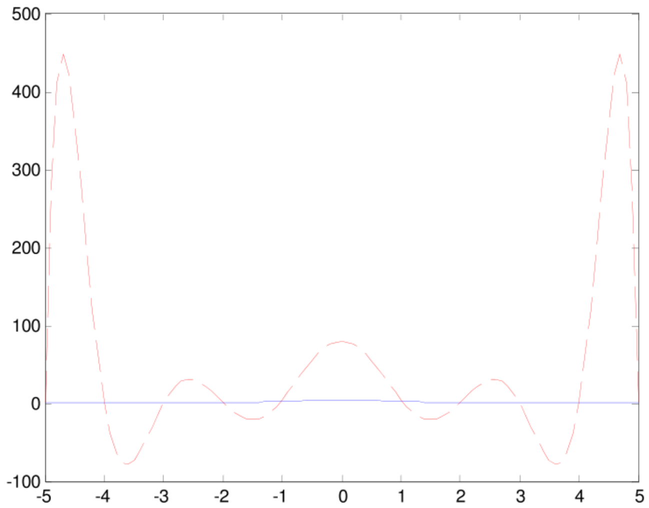

图 2 高阶 Lagrange **插值**

尽管在已知的几个点取到给定的数值，但在附近却会和“实际上”的值之间有很大的偏差。根据定义，插值点可以在节点处与实际函数匹配，但不能保证在节点之间逼近实际函数，插值次数越高，插值结果越偏离原函数的现象称为多项式摆动 Runge 现象，解决的办法是分段用较低次数的插值多项式。

2.6 插值缺陷 Runge 现象

拉格朗日插值法的公式结构整齐紧凑，在理论分析中十分方便，然而在计算中，当插值点增加或减少一个时，所对应的基本多项式就需要全部重新计算，于是整个公式都会变化，非常繁琐。这时可以用重心拉格朗日插值法或牛顿插值法来代替。此外，当插值点比较多的时候，拉格朗日插值多项式的次数可能会很高，因此具有数值不稳定的特点。

2.7 典型算例

已知$y=f(x)$的函数表

x_i	0	1	2
y_i	8	-7.5	-18

求函数 $f(x)$在[0, 2]之间的零点近似值.

分析：一般情况下，先求出 $f(x)$在[0, 2]上的插值函数 $P(x)$，然后求 $P(x)$的零点，把此零点作为 $f(x)$的近似零点.特别地，若 $f(x)$的反函数存在，记为$x=\phi(y)$，那么，求 $f(x)$的零点问题就

变成求函数值$\phi(0)$的问题了.利用插值法构造出$\phi(y)$的插值函数，从而求出 $f(x)$的零点$\phi(0)$的近似值，这类问题称为反插值问题.利用反插值时，必须注意反插值条件，即函数 $y=f(x)$必须有反函数，也即要求$y=f(x)$单调.此时 y_i是严格单调下降排列，可利用反插值法.

解：将原函数表变成反函数表

y_i	8	-7.5	-18
x_i	0	1	2

利用三点二次 Lagrange 插值，由上反函数表构造 $y=f(x)$的反函数$x=\phi(y)$的二次 Lagrange 插值多项式.

令 $y_0=8$，$y_1=-7.5$，$y_2=-18$，$x_0=0$，$x_1=1$，$x_2=2$，则$x=\phi(y)$的二次 Lagrange 插值多项式为

$$L_2(y)=x_0\frac{(y-y_1)(y-y_2)}{(y_0-y_1)(y_0-y_2)}+x_1\frac{(y-y_0)(y-y_2)}{(y_1-y_0)(y_1-y_2)}+x_2\frac{(y-y_0)(y-y_1)}{(y_2-y_0)(y_2-y_1)}$$

函数 $y=f(x)$的近似零点为

$$L_2(0)=0\times\frac{(0+7.5)(0+18)}{(8+7.5)(8+18)}+1\times\frac{(0-8)(0+18)}{(-7.5-8)(-7.5+18)}=2\times\frac{(0-8)(0+7.5)}{(-18-8)(-18+7.5)}$$
$$\approx 0.445\,232$$

3 数值积分

数值积分是数值计算的重要部分，它是求定积分的一种近似方法.

公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i) \tag{3-1}$$

叫做数值求积公式.其中$A_i(i=0,1,\cdots,n)$称为求积系数，$x_i(i=0,1,\cdots,n)$称为求积节点.

$Q[f]=\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)$称为求积算式，

$R[f]=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)$ 称为求积公式的余项.

若求积公式（3-1）对所有次数不超过 m 的代数多项式都精确成立，而对于某个 $m+1$ 次多项式不能精确成立，则称此求积公式具有 m 次代数精度.

上述定义等价于: 若求积公式 (3-1) 对$f(x)=1,x,x^2,\cdots,x^m$，均精确成立，而对$f(x)=$

x^{m+1}不精确成立.

求积公式的代数精度概念是衡量公式逼近好坏的标准之一.

称公式$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$，其中，$A_i = \int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \prod_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}\mathrm{d}x$ 为插值型求积公式.

其余项
$$R[f] = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\mathrm{d}x \qquad (3\text{-}2)$$

若公式（3-1）是插值型求积公式，则它至少具有 n 次代数精度.

3.1 Newton-Cotes 求积公式

称等距节点的插值型求积公式
$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i) \qquad (3\text{-}3)$$
为 n 阶牛顿—柯特斯 Newton-Cotes 求积公式. 其中 $x_i = a + ih \quad (i = 0,1,\cdots,n),\quad h = \frac{b-a}{n}$,
$$C_i^{(n)} = \frac{(-1)^{n-i}}{n\cdot i!(n-i)!}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n}(t-j)\mathrm{d}t,\quad (i = 0,1,2,\cdots,n) \qquad (3\text{-}4)$$
称为 Cotes 系数.

定理 3. 1 对于 n 阶的 Newton-Cotes 求积公式
$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i)$$
当 n 为奇数时，至少具有 n 次代数精度；当 n 为偶数时，至少具有 n+1 次代数精度.

几种低阶的 Newton-Cotes 求积公式：

（1）当 n=1 时，求积公式（3-3）为
$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] = T \qquad (3\text{-}5)$$
称为梯形求积公式.

梯形求积公式的代数精度为 1，其余项是
$$R_T(f) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta) \qquad \eta\in[a,b]$$

（2）当 n=2 时，求积公式（3-3）为
$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] = S \qquad (3\text{-}6)$$

称为抛物线求积公式或 Simpson 求积公式.

抛物线求积公式的代数精度为 3，其余项是

$$
\begin{aligned}
R_s(f) &= \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right] \\
&= -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta) \qquad \eta\in[a,b]
\end{aligned}
$$

（3）当 n=4 时，求积公式（3-3）为

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)] \qquad (3\text{-}7)$$

称为 Cotes 公式.

Cotes 公式的代数精度为 5.

3.2 复化求积公式

将区间[a, b]n 等份，其分点为$x_i = a + i\hbar \quad (i = 0,1,\cdots,n)$， $\hbar = \frac{b-a}{n}$.

（1）复化梯形求积公式

$$T_n = \frac{\hbar}{2}[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)] \qquad (3\text{-}8)$$

其误差为

$$R(f;T_n) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta), \quad \eta\in[a,b] \qquad (3\text{-}9)$$

（2）复化抛物线求积公式:

$$S_n = \frac{\hbar}{6}[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) + f(b)] \qquad (3\text{-}10)$$

其中$x_{i+\frac{1}{2}}$是区间[x_i, x_{i+1}]的中点.其误差是

$$R(f;S_n) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - S_n = -\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta), \quad \eta\in[a,b] \qquad (3\text{-}11)$$

若记 T_{2n} 为将区间[a, b]$2n$ 等分的复化梯形求积公式，则有递推式

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{\hbar}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) \qquad (3\text{-}12)$$

3.3 Romberg 求积算法

将区间[a, b]一步一步对分，即依次作 2^0, 2^1, 2^2, …等分，记$\hbar_i = \frac{b-a}{2^i} \ (i = 0,1,2,\cdots)$，按

复化梯形求积公式（3-8）算得的值相应地记为$T_0^{(0)},T_0^{(1)},T_0^{(2)},\cdots$.

由公式

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

递推计算数表

$$\begin{array}{lllll}
T_0^{(0)} & & & & \\
T_0^{(1)} & T_1^{(0)} & & & \\
T_0^{(2)} & T_1^{(1)} & T_2^{(0)} & & \\
T_0^{(3)} & T_1^{(2)} & T_2^{(1)} & T_3^{(0)} & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}$$

用$T_m^{(k)}$或$T_m^{(0)}$作为定积分$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$的近似值.

3.4 数值积分算法比较性分析

被积函数	*梯形积分*	***Simpson**积分*	***Cotes**积分*	*复化梯形积分**n*** **= 100**	*复化**Simpson**积分**n*** **= 100**
$\boldsymbol{x^4}$	$\mathbf{0.96000}\boldsymbol{d}\mathbf{1}$	$\mathbf{0.26667}\boldsymbol{d}\mathbf{0}$	$\mathbf{0.00000}\boldsymbol{d}\mathbf{0}$	$\mathbf{0.10667}\boldsymbol{d}-\mathbf{2}$	$\mathbf{0.42667}\boldsymbol{d}-\mathbf{7}$
$\mathbf{1/(1+}\boldsymbol{x}\mathbf{)}$	$\mathbf{0.23472}\boldsymbol{d}\mathbf{0}$	$\mathbf{0.12988}\boldsymbol{d}-\mathbf{1}$	$\mathbf{0.64697}\boldsymbol{d}-\mathbf{3}$	$\mathbf{0.29628}\boldsymbol{d}-\mathbf{4}$	$\mathbf{0.52624}\boldsymbol{d}-\mathbf{8}$
$\boldsymbol{sin}\mathbf{(}\boldsymbol{x}\mathbf{)}$	$\mathbf{0.20000}\boldsymbol{d}\mathbf{1}$	$\mathbf{0.94351}\boldsymbol{d}-\mathbf{1}$	$\mathbf{0.14293}\boldsymbol{d}-\mathbf{2}$	$\mathbf{0.16450}\boldsymbol{d}-\mathbf{3}$	$\mathbf{0.10825}\boldsymbol{d}-\mathbf{7}$
$\boldsymbol{Exp}\mathbf{(}\boldsymbol{x}\mathbf{)}$	$\mathbf{0.20000}\boldsymbol{d}\mathbf{1}$	$\mathbf{0.31671}\boldsymbol{d}-\mathbf{1}$	$\mathbf{0.18625}\boldsymbol{d}-\mathbf{3}$	$\mathbf{0.21297}\boldsymbol{d}-\mathbf{3}$	$\mathbf{0.56789}\boldsymbol{d}-\mathbf{8}$

表 1 计算误差

从表可以看出 ,梯形积分方法的误差最大, 近似效果最差, Simpson 方法的精度比梯形积分高了一个数量级,它的代数精度比梯形积分的代数精度高 ,能更好地近似积分值, Cotes 积分方法的误差比 Simpson 积分精度高两个数量级。因此, 一般情况下, 代数精度越高 ,积分公式计算精度也越高 。复化梯形积分方法比单独的梯形积分精度高, 它的积分精度和被积函数有关 ,还和复化积分时的步长有关。复化 Simpson 积分公式比单独的 Simpson 积分公式高近 7 个数量级 , 效果明显 。对 x_4 的积分结果可以看出 , 由于 Simpson 积分的代数精度为 3, 不能完全等于 x_4, 而 Cotes 积分的代数精度为 5,

可以严格等于 x^4,因此积分误差为 0。Romberg 积分方法的计算结果如图 1 所示，积分区间为 [0, 2],图中(a),(b),(c)分别是表 1 中后 3 个试验函数,被积函数 x^4 通过 Cotes 积分已经严格等于解析解 ,所以没有给出计算结果 。图中粗实线代表梯形序列 T_{1k}，点线代表 Simpson 序列 T_{2k}，细实线代表 Cotes 序列 T_{3k},虚线代表 Romberg 序列 T_{4k}。

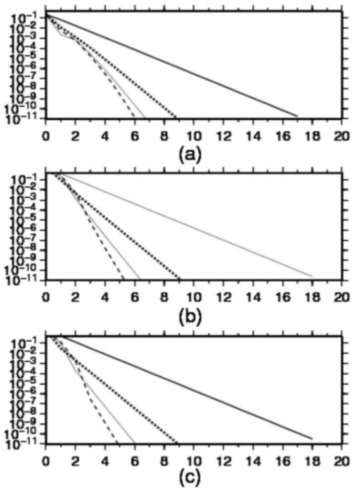

图 3 Romberg **积分误差**

综上所述，通过理论分析和数值计算实验可以得出以下结论:一般来说，Newton-Cotes 方法的代数精度越高 ,数值积分的效果越好 ;当积分区间较大时候，可以采用复化积分方法可以得到较好的效果 ;变步长积分方法不仅可以很好地控制计算误差 ，并且可以寻找到适当的积分步长 ;Romberg 积分方法可以更好地利用变步长复化积分公式得到的积分序列得到更为精确的数值结果，是一个较好的数值积分方法。

3.5 典型算例

求三个不同的节点 x_1，x_2，x_3 和常数 c 使求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx c[f(x_0)+f(x_1)+f(x_2)]$$

具有尽可能高的代数精度.

解：不妨设 $x_0<x_1<x_2$.

本题有 4 个待定参数c, x_0, x_1, x_2，令求积公式对$f(x)=1, x, x^2, x^3$精确成立，即有

$$\begin{cases} 3c = 2 & (2) \\ c(x_0 + x_1 + x_2) = 0 & (3) \\ c(x_0^2 + x_1^2 + x_2^2) = \frac{2}{3} & (4) \\ c(x_0^3 + x_1^3 + x_2^3) = 0 & (5) \end{cases}$$

由（2）得

$$c = \frac{2}{3}$$

于是（3）~（5）变为

$$\begin{cases} x_0 + x_1 + x_2 = 0 & (6) \\ x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 = 1 & (7) \\ x_0^3 + x_1^3 + x_2^3 = 0 & (8) \end{cases}$$

由（6）得

$$x_1 = -(x_0 + x_2) \qquad (9)$$

将其代入（7）和（8）得

$$\begin{cases} x_0^2 + (x_0 + x_2)^2 + x_2^2 = 1 \\ x_0^3 - (x_0 + x_2)^3 + x_2^3 = 0 \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} x_0^2 + x_0 x_2 + x_2^2 = \frac{1}{2} & (10) \\ x_0 x_2 (x_0 + x_2) = 0 & (11) \end{cases}$$

由（11）得，$x_0=0$ 或 $x_2=0$ 或 $x_0+x_2=0$.

当 $x_0=0$ 时，由（10）得$x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$，再由（9）得$x_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$，与 $x_0<x_1$ 矛盾；

当 $x_2=0$ 时，由（10）得$x_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$，再由（9）得$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$，与 $x_1<x_2$ 矛盾；

当 $x_0+x_2=0$ 时，由（10）得$x_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$，$x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$，再由（9）得 $x_1=0$.

综上要使求积公式（1）至少具有 3 次代数精度当且仅当取

$$c = \frac{2}{3}, \quad x_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

此时求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{2}{3}\left[f\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) + f(0) + f\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \right] \qquad (12)$$

将$f(x)=x^4$代入（12）有$\int_{-1}^{1}x^4\mathrm{d}x=\frac{2}{5}\neq\frac{2}{3}\left[\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^4+0^4+\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^4\right]=\frac{1}{3}$.所以求积公式（12）的代数精度为 3.

4 非线性方程数值解法

非线性方程的数值解法是解非线性方程的实用可行方法，具有重要的实际意义.

给定方程 $f(x)=0$，如果有α使得$f(\alpha)=0$，则称α为 $f(x)=0$ 的根或 $f(x)$的零点.设有正整数 m 使得

$$f(x)=(x-\alpha)^m g(x)$$

且$g(\alpha)\neq 0$，则当$m\geq 2$时，称α为 $f(x)=0$ 的 m 重根；当 $m=1$ 时，称α为 $f(x)=0$ 的单根.

求根步骤：

（1） 确定所给方程存在多少个根.

（2） 进行根的隔离，找出每个有根区间，有根区间内的任一点都可看成是该根的一个近似值.

（3） 逐步把近似根精确化，直到足够精确为止.

4.1 二分法

二分法的基本思想是在平分有根区间的过程中，逐步缩小有根区间.设函数 $f(x)$在区间$[a, b]$上连续，且$f(a)\cdot f(b)<0$，则方程 $f(x)=0$ 在（a, b）内至少有一个根.为简便起见，假定方程 $f(x)=0$ 在 (a, b) 内仅有一个根.这样 (a, b) 为有根区间这时可用下面的二分法求方程 $f(x)=0$ 的近似根.

二分法的具体步骤如下：

（1）取（a, b）的中点$\frac{a+b}{2}$，计算$f(\frac{a+b}{2})$的值.

若$f(\frac{a+b}{2})=0$，则$\frac{a+b}{2}$为方程 $f(x)=0$ 的根，计算结束.

若$f(\frac{a+b}{2})\neq 0$，如果$f(\frac{a+b}{2})$与 $f(a)$同号，则记$a_1=\frac{a+b}{2}$，$b_1=b$；如果$f(\frac{a+b}{2})$与 $f(a)$异号，则记$a_1=a$，$b_1=\frac{a+b}{2}$；(a_1, b_1)为新的有根区间，且$(a_1,b_1)\subset(a,b)$，$b_1-a_1=\frac{b-a}{2}$.进行下一步.

（2）取（a1, b1）的中点$\frac{a_1+b_1}{2}$，计算$f(\frac{a_1+b_1}{2})$的值

若$f(\frac{a_1+b_1}{2})=0$，则$\frac{a_1+b_1}{2}$为方程 $f(x)=0$ 的根，计算结束.

若$f(\frac{a_1+b_1}{2})\neq 0$，如果$f(\frac{a_1+b_1}{2})$与 $f(a_1)$同号，则记$a_2=\frac{a_1+b_1}{2}$，　$b_2=b_1$；如果$f(\frac{a_1+b_1}{2})$与 $f(a_1)$异号，则记$a_2=a_1$，　$b_2=\frac{a_1+b_1}{2}$.这时（a_2, b_2）为新的有根区间，且$(a_2,b_2)\subset(a_1,b_1)\subset(a,b)$，$b_2-a_2=\frac{b-a}{2^2}$，进行下一步.

如此重复 k 次仍未找到方程的根，反复二分下去，则得一有根区间序列$\{(a_k,b_k)\}_{k=0}^{\infty}$，满足

i）$(a,b)\supset(a_1,b_1)\supset(a_2,b_2)\supset\cdots\supset(a_k,b_k)\supset\cdots$

ii）$b_k-a_k=\frac{b-a}{2^k}$

当$n\to\infty$时（a_k, b_k）缩为一点α，它显然是方程 $f(x)=0$ 的根，当 k 很大时，可取（a_k, b_k）的中点$\alpha^*=\frac{a_k+b_k}{2}$作为方程 $f(x)=0$ 的根α的近似值.

$$|\alpha-\alpha^*|\le\frac{b_k-a_k}{2}=\frac{b-a}{2^{k+1}}$$

二分法适用于求区间（a, b）内的单实根或奇重实根.

4.2 迭代法

迭代法是一种逐次逼近的方法，它的基本思想是利用某一固定公式反复校正根的近似值.

将方程 $f(x)=0$ 改写成等价形式

$$x=\phi(x) \tag{4-1}$$

建立迭代公式

$$x_{k+1}=\phi(x_k) \tag{4-2}$$

在根α的附近任取一点 x_0，可得一序列$\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$.若$\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$收敛，即$\lim_{k\to\infty}x_k=\alpha$，且$\phi(x)$连续，则对（4-2）两端取极限有$\alpha=\phi(\alpha)$，可见$\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$的极限为方程（1）的根，这种求根算法称为迭代法. 若$\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$发散，迭代法就失败.

4.3 迭代过程的收敛性

4.3.1 整体收敛性

定理 4.1 （迭代收敛定理）设$\phi(x)$在[*a*, *b*]上具有连续的一阶导数，且

1°对任意$x \in [a, b]$，总有$\phi(x) \in [a, b]$；
2°存在$0 \le m < 1$，使对任意$x \in (a, b)$，有$|\phi^{'}(x)| \le m$.

则

1°方程$x = \phi(x)$在[*a*, *b*]内有且仅有一根α，且迭代过程$x_{k+1} = \phi(x_k)$对任意初值$x_0 \in [a, b]$均收敛于方程$x = \phi(x)$的根α.

2°有估计式

$$|\alpha - x_k| \le \frac{1}{1-m}|x_{k+1} - x_k|$$

$$|\alpha - x_k| \le \frac{m^k}{1-m} \le |x_1 - x_0|$$

定理 4.2 设方程$x = \phi(x)$在区间[*a*, *b*]内有根α，且存在$L \ge 1$，对任意的$x \in (a, b)$，有$|\phi'(x)| \ge L$，则对任意初值$x_0 \in [a, b]$，且$x_0 \ne \alpha$，迭代过程$x_{k+1} = \phi(x_k)$发散.

4.3.2 局部收敛性

如果存在α的某个邻域Δ: $|x - \alpha| \le \delta$，迭代过程$x_{k+1} = \phi(x_k)$对任意初值$x_0 \in \Delta$均收敛，则称迭代过程$x_{k+1} = \phi(x_k)$是局部收敛的.

定理 4.3 设$\phi(x)$在方程$x = \phi(x)$的根α邻近有连续的一阶导数.

若$|\phi'(\alpha)| < 1$ 则迭代过程$x_{k+1} = \phi(x_k)$具有局部收敛性
若$|\phi'(\alpha)| > 1$ 则迭代过程$x_{k+1} = \phi(x_k)$发散.

4.4 迭代过程的收敛速度

设迭代过程$x_{k+1} = \phi(x_k)$产生的序列$\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$收敛于方程$x = \phi(x)$的根α，记$e_k = \alpha - x_k$，若

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

式中 *C* 是不为零的常数.则称迭代过程是 *p* 阶收敛的.特别地，当 *p*=1 时，称为线性收敛；当

p>1 时，称为超线性收敛，当 p=2 时，称为平方收敛. p 越大，收敛越快.

定理 4.4　设$\phi(x)$在方程$x=\phi(x)$的根α邻近有连续的二阶导数，且$|\phi'(\alpha)|<1$ 则当$\phi'(\alpha)\neq 0$时，迭代过数$x_{k+1}=\phi(x_k)$为线性收敛；而当$\phi'(\alpha)=0$，$\phi''(\alpha)\neq 0$时为平方收敛.

4.5 Aitken 加速方法

$$\begin{cases}\bar{x}_{k+1}=\phi(x_k) & (\textit{迭代})\\ \tilde{x}_{k+1}=\phi(\bar{x}_{k+1}) & (\textit{迭代})\\ x_{k+1}=\tilde{x}_{k+1}-\dfrac{(\tilde{x}_{k+1}-\bar{x}_{k+1})^2}{\tilde{x}_{k+1}-2\bar{x}_{k+1}+x_k} & (\textit{加速})\end{cases}$$

它是一个二阶收敛的方法，一般可以用来加速具有线性收敛序列的收敛速度.

4.6 弦截法

在方程 $f(x)=0$ 的根α附近任取两初始近似根 x_0，x_1，由迭代公式

$$x_{k+1}=x_k-\frac{x_k-x_{k-1}}{f(x_k)-f(x_{k-1})}f(x_k)\quad (k=0,1,\cdots)\qquad (4\text{-}4)$$

逐次逼近 $f(x)=0$ 的根α，这种求根算法称为弦截法.

弦截法是局部收敛的，它具有超线性收敛速度，且收敛阶为 P=1.618.

4.7 Newton 迭代法

设有方程 $f(x)=0$，在 $f(x)=0$ 的根α附近任取一点 x_0 作为初始近似根，由迭代公式

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}\quad (k=0,1,2,\cdots)\qquad (4\text{-}3)$$

逐次逼近方程 $f(x)=0$ 的根α，这种求根算法称为 Newton 法（切线法），公式（4-3）称为 Newton 迭代公式.

Newton 法的迭代函数是

$$\phi(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}$$

从而

$$\phi'(x)=\frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$$

由此知若α是 $f(x)=0$ 的一个单根，则在根α附近 Newton 法是局部收敛的，并且收敛速度是平方收敛的.但如果α是 $f(x)=0$ 的重根，则 Newton 法仅有线性收敛速度.

定理 4.5　设函数 $f(x)$在区间$[a, b]$上存在二阶导数，且满足条件：

1°$f(a)\cdot f(b)<0$;

2°$f'(x)$在$[a, b]$上不等于零；

3°$f''(x)$在$[a, b]$上不变号；

4°在$[a, b]$上任意选取满足条件$f(x_0)f''(x_0)>0$的初始近似值 x_0.

则由 Newton 法产生的序列$\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$单调收敛于方程 $f(x)=0$ 在$[a, b]$上的唯一根.

4.8 Newton 迭代法的初始值选取

用牛顿迭代法解非线性方程时初始值选取很重要,因为它的选取不同，产生的迭代序可能收敛,也可能不收敛,即使收敛也存在收敛速度的问题.又由于非线性方程往往有许多根，初始值的选取不同可能会收敛到不同的根.初始值的选取规则是使不等式 $f(x_0)f''(x_0)>0$ 成立的值作为初始值 x_0,也就是选能使 $f(x_0)$与 $f''(x_0)$同号的值作为初始值 x_0,这个条件仅仅是充分条件不是必要条件.

以 $\sqrt{13}=x$ 为例说明这个问题.

该问题等价于求非线性方程 $f(x)=x^2-13$ 的解 x_*,在这里 $f'(x)=2x$, $f''(x)=2$.如果取 $x_0=0$ ，则迭代序列不收敛，如果取 $x_0=3$ ，这时 $f(x_0)=f(3)=-4<0$ 与 $f''(x_0)=f''(3)=2>0$ 异号，不符合初始值的选取规则，经计算其迭代序列为 $x_1=3.666666667>x_*$, $x_2=3.606060606>xa_*$,$\varepsilon_0=0.605551275$, $\varepsilon_1=0.61115392$, $\varepsilon_2=0.000509331>0.000052173$,可见其迭代序列也是收敛的，但是通过观察分析发现如果要达到同样的计算精度很可能要多迭代一次，这是因为通过不符合选取规则的初始值 x_0 经过一次迭代后产生的 x_1 满足了初始值的选取规则 .所以，虽然按照选取规则选取初始值是产生收敛迭代序列的充分条件而不是必要条件 ，但是在实际计算中也要按照这个规则选取初始值。

4.9 典型算例

例：利用适当的迭代格式证明

$$\lim_{k\to\infty}\sqrt{2+\sqrt{2+\cdots\sqrt{2}}}=2$$

分析：本题应首先设法建立一个收敛的迭代格式$x_{k+1}=\phi(x_k)$，使它收敛于方程$x=\phi(x)$在[a, b]上的唯一根.

证：考虑迭代格式

$$\begin{cases}x_0=0\\ x_{k+1}=\sqrt{2+x_k} \qquad (k=0,1,2,\cdots)\end{cases} \tag{1}$$

则

$$x_1=\sqrt{2}$$

$$x_2=\sqrt{2+\sqrt{2}}$$

$$x_3=\sqrt{2+\sqrt{2+\sqrt{2}}}$$

………

$$x_k=\underbrace{\sqrt{2+\sqrt{2+\cdots+\sqrt{2}}}}_{k个2}$$

………

记$\phi(x)=\sqrt{2+x}$，则$\phi'(x)=\frac{1}{2\sqrt{2+x}}$，当$x\in[0,2]$时，$\phi(x)\in[\phi(0),\phi(2)]=\left[\sqrt{2},2\right]\subset[0,2]$；$|\phi'(x)|\le\phi'(0)=\frac{1}{2\sqrt{2}}<1$，因而迭代格式（1）产生的序列$\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$收敛于方程

$$x=\sqrt{2+x}$$

在[0, 2]内的唯一根$\alpha=2$，即：

$$\lim_{k\to\infty}x_k=2$$

5 常微分方程初值问题数值解法

这里的数值解法，它不是求方程的解的解析表达式或近似表达式，而是直接求一系列离散点$x_i(i=1,2,\cdots)$上的解值$y(x_i)$的近似值 y_i. 利用计算机解微分方程主要使用数值方法.

给出形式如

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

的初值问题的数值解法，这里假定 $f(x, y)$满足解的存在唯一性定理的条件.

局部截断误差：设$y_n = y(x_n)$，则称$y(x_{n+1}) - y_{n+1}$为方法的局部截断误差.

方法的阶数：若数值方法的局部截断误差为$O(h^{p+1})$，则称这种方法为 p 阶方法，这里 p 为非负整数.

5.1 单步法

5.1.1 Euler 方法及其改进形式

5.1.1.1 Euler 方法

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \quad (n = 0,1,2,\cdots) \qquad (5\text{-}1)$$

它是显格式，该方法的局部截断误差为$O(h^2)$，是一阶方法.

5.1.1.2 梯形公式（改进的 Euler 方法）

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})] \quad (n = 0,1,2,\cdots) \qquad (5\text{-}2)$$

它是一个隐格式，局部截断误差为 $O(h^3)$，是二阶方法. 运用它常采用下面的迭代格式

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

$(k = 0,1,2,\cdots; n = 0,1,2,\cdots)$ （5-3）

它是二阶方法

5.1.1.3 Euler 预报—校正系统

若迭代公式（5-3）只迭代一步，则该方法称为 Euler 预报—校正系统，即

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

$$(n = 0,1,2,\cdots) \qquad (5\text{-}4)$$

5.1.2 Runge-Kutta 方法

显式 Runge-Kutta 方法的一般形式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{m} w_i K_i \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_i = f(x_n + \alpha_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j) \quad (i = 2,3,\cdots,m) \end{cases}$$

$$(n = 0,1,2,\cdots)$$

其中$w_i(i = 1,2,\cdots,m), \alpha_i, \beta_{ij}(i = 2,3,\cdots,m)$均为待定参数，随着 m 取不同的正整数，便可得到各阶显式 Runge-Kutta 公式.

特别地，二阶 Runge-Kutta 公式

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

$$n = (0,1,2,\cdots)$$

就是改进的 Euler 公式.

在实际应用中，最常用的标准四阶 Runge-Kutta 公式.

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) \\ K_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2) \\ K_4 = f(x_n + h, y_n + hK_3) \end{cases}$$

$$n = (0,1,2,\cdots) \tag{5-5}$$

5.1.3 单步法的性质

收敛性与稳定性从不同的角度描述了数值方法的可靠性，只有既收敛又稳定的方法，才能提供比较可靠的计算结果. 下面给出单步法的收敛性与稳定性.

5.1.3.1 单步法的收敛性

若某数值方法对任意固定的节点$x_n = x_0 + nh \quad (n = 0,1,2,\cdots)$，当$h \to 0$（且$n \to \infty$）时，有$y_n \to y(x_n)$，则称该方法是收敛的.

定理 5.1 若 1°单步法$y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n, y_n, h)$中的增量函数$\phi(x, y, h)$在区域$a \le x \le b$，$-\infty < y < +\infty$，$0 \le h \le h_0$上连续，并且关于 y 满足 Lipschitz 条件

$$\left|\phi(x, y_1, h) - \phi(x, y_2, h)\right| \le L|y_1 - y_2|, \quad (L > 0)$$

2°方法的局部截断误差$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = 0(h^{p+1}), \quad (n = 1,2,\cdots)$；

3°初始值是精确的，即$y(a) = y_0$，

则 1°方法的整体截断误差为$O(h^p)$；

2°当$p \ge 1$时，方法是收敛的.

5.1.3.2 单步法的稳定性

设用某一数值方法计算 y_n时，所得到的实际计算结果为$\tilde{y}_n$，且由误差$\delta_n = y_n - \tilde{y}_n$引起以后各点处$y_m(m > n)$的误差为$\delta_m$，如果总有$|\delta_m| \le |\delta_n|$，则称该数值方法是绝对稳定的.

一个数值方法用于解试验方程$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \lambda y$（其中$\lambda$为常数，当$\lambda$是复数时，$\mathrm{Re}(\lambda) < 0$），若在$\mu = \lambda h$平面中的某个区域 R 中方法都是绝对稳定的，而在域 R 外，方法是不稳定的，则称区域 R 是该数值方法的绝对稳定域.

5.2 线性多步法

5.2.1 线性多步法一般公式

$y_{n+1} = \sum_{k=0}^{r} \alpha_k y_{n-k} + h \sum_{k=-1}^{r} \beta_k f_{n-k}$ （5-6）

其中α_k，β_k为常数，$f_i = f(x_i, y_i)$. 若$\beta_{-1} \ne 0$，则（5-6）是隐格式；若$\beta_{-1} = 0$，则（5-6）是显格式.

5.2.2 Adams 显式（外推）公式

当取 r+1 个点$x_{n-r}, x_{n-r+1}, \cdots, x_n$及已知值$f_{n-r}, f_{n-r+1}, \cdots, f_n$时，可得 Adams 显式公式

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

最常用的是四步 Adams 显式（外推）公式：

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}[55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] \qquad (5\text{-}7)$$

四步 Adams 显式（外推）公式的局部截断误差为$\frac{251}{720}h^5 y^{(5)}(\xi_n)$，它是一个四阶方法，也称为四阶 Adams 显式（外推）公式.

5.2.3 Adams 隐式（内插）公式

如果取 r+1 个点$x_{n+1}, x_n, \cdots, x_{n-r+1}$及对应的函数值$f_{n+1}, f_n, \cdots, f_{n-r+1}$，则可得 Adams 隐式（内插）公式：

$$y_{n+1} = y_n + h\sum_{k=0}^{r} \beta_{k-1}^{*} f_{n-k+1}$$

常用的是四步 Adams 隐式公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}[9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}] \qquad (5\text{-}8)$$

四步 Adams 隐式公式的局部截断误差为$-\frac{19}{720}h^5 y^{(5)}(\xi_n)$，它是一个四阶方法，也称为四阶 Adams 隐式公式.

实际中常常把四阶 Adams 外推公式(5-7)和内插公式(5-8)联合使用，构成四阶 Adams 预报—校正系统

$$\begin{cases} \bar{y}_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{24}[55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{24}[9\bar{f}_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}] \end{cases}$$

其中$\bar{f}_{n+1} = f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1})$.

5.3 典型算例

例 1：取步长 h=0.4，写出用标准四阶 Runge-Kutta 方法求解初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=x\sin(x+y) \quad 1\le x\le 9\\ y(1)=0\end{cases}$$

的计算公式，并计算 $y(1.8)$的近似值，小数点后至少保留 6 位.

解：设 $f(x,y)=x\sin(x+y)$，$x_0=1, y_0=0, x_n=x_0+nh=1+0.4n$ $(n=0,1,2,\cdots,20)$

标准四阶 Runge-Kutta 公式为

$$\begin{cases}y_{n+1}=y_n+\dfrac{h}{6}(K_1+2K_2+2K_3+K_4)\\ K_1=f(x_n,y_n)\\ K_2=f(x_n+\dfrac{h}{2},y_n+\dfrac{h}{2}K_1)\\ K_3=f(x_n+\dfrac{h}{2},y_n+\dfrac{h}{2}K_2)\\ K_4=f(x_n+h,y_n+hK_3)\end{cases}$$

代入 $f(x,y)=x\sin(x+y)$ 有

$$\begin{cases}y_{n+1}=y_n+\dfrac{0.4}{6}(K_1+2K_2+2K_3+K_4)\\ K_1=(1+0.4n)\sin(1+0.4n+y_n)\\ K_2=(1.2+0.4n)\sin(1.2+0.4n+y_n+0.2K_1)\\ K_3=(1.2+0.4n)\sin(1.2+0.4n+y_n+0.2K_2)\\ K_4=(1.4+0.4n)\sin(1.4+0.4n+y_n+0.4K_3)\end{cases}$$

由 y_0=1，计算得

$$y(1.4)\approx 0.460\ 389$$

$$y(1.8)\approx 0.911\ 704$$

例 2：给定常微分方程初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=\dfrac{2}{3}xy^{-2}, \quad x\in[0,1.2]\\ y(0)=1\end{cases} \tag{1}$$

（1）用四阶 Adams 显式公式计算，并与精确解比较. 取 h=0.1.

（2）用四阶 Adams 预报—校正公式计算，并与精确解相比较．取 h=0.1.

解：记$f(x,y)=\frac{2}{3}xy^{-2}$, $h=0.1$, $x_n=nh$ $(n=0,1,2,\cdots,12)$

用经典的 Runge-Kutta 公式提供初始值 y_1，y_2，y_3，计算公式如下：

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+\frac{h}{6}(K_1+2K_2+2K_3+K_4) \\ K_1=f(x_n,y_n)=\frac{2x_n}{3y_n^2} \\ K_2=f(x_n+\frac{h}{2},y_n+\frac{h}{2}K_1)=\frac{2(x_n+0.05)}{3(y_n+0.05K_1)^2} \\ K_3=f(x_n+\frac{h}{2},y_n+\frac{h}{2}K_2)=\frac{2(x_n+0.05)}{3(y_n+0.05K_2)^2} \\ K_4=f(x_n+h,y_n+hK_3)=\frac{2(x_n+0.1)}{3(y_n+0.1K_3)^2} \end{cases}$$

$$(n=0,1,2)$$

计算可得 $y_0=1$, $y_1=1.003\ 322$, $y_2=1.013\ 159$, $y_3=1.029\ 143$，此外，（1）的精确解为$y(x)=\sqrt[3]{1+x^2}$.

（1）四阶 Adams 显式公式为

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}[55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3}] \quad (n=3,4,5,\cdots,11)$$

计算结果列表如下

n	x_n	y_n	$y(x_n)$	$\lvert y(x_n)-y_n\rvert$
4	0.4	1.050 695	1.050 718	0.000 023
5	0.5	1.077 171	1.077 217	0.000 046
6	0.6	1.107 865	1.107 932	0.000 066
7	0.7	1.142 086	1.142 165	0.000 079
8	0.8	1.179 190	1.179 274	0.000 084
9	0.9	1.128 606	1.218 689	0.000 084
10	1.0	1.259 842	1.259 921	0.000 079
11	1.1	1.302 487	1.302 559	0.000 072
12	1.2	1.346 199	1.346 263	0.000 065

（2）四阶阿当姆斯预报—校正公式为

$$\begin{cases}\bar{y}_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}[55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3}] \\ y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}[9\bar{f}_{n+1}+19f_n-5f_{n-1}+f_{n-2}]\end{cases} \qquad (n=3,4,5,\cdots 11)$$

计算结果列表如下

n	x_n	y_n	$y(x_n)$	$\lvert y(x_n)-y_n\rvert$
4	0.4	1.050 720	1.050 718	0.000 002
5	0.5	1.077 222	1.077 217	0.000 005
6	0.6	1.107 938	1.107 932	0.000 006
7	0.7	1.142 172	1.142 165	0.000 007
8	0.8	1.179 281	1.179 274	0.000 007
9	0.9	1.218 696	1.218 689	0.000 007
10	1.0	1.259 928	1.259 921	0.000 007
11	1.1	1.302 565	1.302 559	0.000 006
12	1.2	1.346 268	1.346 263	0.000 005

6 解线性方程组

6.1 直接法

直接解法是解线性方程组的重要方法. 它是指通过有限步的算术运算求出精确解的方法（若计算过程没有舍入误差）. 其基本思想是通过等价变换将线性方程组化为结构简单、易于求解的形式，从而求解.

对于线性方程组

$$AX=b$$

其中 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}\end{bmatrix}$, $\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n\end{bmatrix}$, $\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n\end{bmatrix}$

若系数阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则方程组有唯一解. 这里给出了此唯一解的直接解法.

6.1.1 消去法

6.1.1.1 Jordan 消去法

对$k=1,2,\cdots,(n-1),n$，依次计算

$$\begin{cases} a_{kj}^{(k)}=a_{kj}^{(k-1)} \\ b_k^{(k)}=b_k^{(k-1)} \end{cases} \qquad (j=k,k+1,\cdots,n)$$

$$\begin{cases} l_{ik}=a_{ik}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)} \\ a_{ij}^{(k)}=a_{ij}^{(k-1)}-l_{ik}a_{kj}^{(k-1)} & (j=k+1,k+2,\cdots,n) \\ b_i^{(k)}=b_i^{(k-1)}-l_{ik}b_k^{(k-1)} & (i=1,2,\cdots,k-1,k+1,\cdots,n) \end{cases} \tag{6-1}$$

$$x_i=b_i^{(n)}/a_{ii}^{(n)} \quad (i=1,2,\cdots,n) \tag{6-2}$$

6.1.1.2 Gauss 消去法

1°消元过程

对$k=1,2,\cdots,(n-1)$，依次计算

$$\begin{cases} l_{ik}=a_{ik}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)} \\ a_{ij}^{(k)}=a_{ij}^{(k-1)}-l_{ik}a_{kj}^{(k-1)} \\ b_i^{(k)}=b_i^{(k-1)}-l_{ik}b_k^{(k-1)} \end{cases} \quad (i,j=k+1,k+2,\cdots,n) \tag{6-3}$$

2°回代过程

$$x_i=(b_i^{(i-1)}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}^{(i-1)}x_j)/a_{ii}^{(i-1)} \quad (i=n,n-1,\cdots,1) \tag{6-4}$$

6.1.1.3 选列主元的 Gauss 消去法

Gauss 消去法能够进行到底的条件是各步的主元素$a_{kk}^{(k-1)}\neq 0$. 另外既使主元素$a_{kk}^{(k-1)}$不为零，但如果主元素$a_{kk}^{(k-1)}$的绝对值很小，用它作除数，势必造成舍入误差的严重扩散，以致于方程组的解的精度受到严重影响, 为此引入选列主元的方法, 选列主元的具体方法如下:

对方程组 ***AX=b*** 仍按$x_1,x_2,\cdots$的顺序依次消元，只是在每一步消元前都增加一步按列选主元的工作，如第 *k* 步消元前，就所有$a_{\mu k}^{(k-1)}(\mu=k,k+1,\cdots,n)$，取绝对值最大值，设$\left|a_{lk}^{(k-1)}\right|=\max\limits_{k\le\mu\le n}\left|a_{\mu k}^{(k-1)}\right|$，将第 *l* 个方程与第 *k* 个方程互换位置，这样$a_{lk}^{(k-1)}$成为第 *k* 步的主元

素，然后进行第 k 步消元. 每步消元都如此，最后再进行回代过程，得出方程组的解.

选列主元的 Gauss 消去法能压制计算过程中舍入误差的增长，减少舍入误差对计算结果的影响.

6.1.2 矩阵三角分解法

定理 6.1　设 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{m\times n}$，$\boldsymbol{A}$ 的所有顺序主子式均不等于零⇔方阵 $\boldsymbol{A}$ 存在唯一的分解式

$$A = LDR$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 是单位下三角阵，$\boldsymbol{R}$ 是单位上三角阵，$\boldsymbol{D}$ 是对角阵. 这种分解称为 $\boldsymbol{A}$ 的 $\boldsymbol{LDR}$ 分解.

1°若把 $\boldsymbol{D}$ 并入 $\boldsymbol{R}$，则有分解

$$L(DR) = LU$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 是单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$ 是上三角阵. 称此分解为 A 的 Doolittle 分解.

2°若把 $\boldsymbol{D}$ 并入到 $\boldsymbol{L}$ 中，则有分解

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

其中$\tilde{L}$是下三角阵，$\tilde{U}$为单位上三角阵，这种分解称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Crout 分解.

3°如果 $\boldsymbol{A}$ 是对称的，则 $\boldsymbol{A}$ 可分解为

$$A = LDL^T$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 为单位下三角阵，$\boldsymbol{D}$ 为对角阵.

4°如果 $\boldsymbol{A}$ 是正定对称的，则 $\boldsymbol{A}$ 可分解为

$$\boldsymbol{A} = \tilde{\boldsymbol{L}}\tilde{\boldsymbol{L}}^T$$

其中$\tilde{L}$为对角元全为正的下三角阵，称此分解为平方根分解或 Cholesky 分解.

6.1.2.1 直接三角分解法

i）分解 $\boldsymbol{A=LU}$，其中 $\boldsymbol{L}$ 为单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$ 为上三角阵. 其分解公式为

对$k = 1,2,3,\cdots,n$，计算

$$\begin{cases} u_{kj} = a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}u_{rj} & (j = k, k+1, \cdots, n) \\ l_{ik} = \frac{(a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}u_{rk})}{u_{kk}} & (i = k+1, k+2, \cdots, n) \end{cases} \tag{6-5}$$

其中$\sum_1^0 = 0$.

ii）求解方程组 ***LY=b***，其计算公式为

$$y_k = b_k - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} y_r \quad (k = 1,2,\cdots,n) \tag{6-6}$$

其中$\sum_1^0 = 0$.

iii）求解方程组 ***UX=Y***，其计算公式为

$$x_k = \frac{(y_k - \sum_{r=k+1}^{n} u_{kr} x_r)}{u_{kk}} \quad (k = n, n-1, \cdots, 2,1) \tag{6-7}$$

其中$\sum_{n+1}^{n} = 0$.

6.1.2.2 平方根（Cholesky 分解）法

平方根法是用于解系数矩阵为对称正定矩阵的线性代数方程组，其计算步骤如下：

i）对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 进行 Cholesky 分解 $\boldsymbol{A} = \tilde{\boldsymbol{L}}\tilde{\boldsymbol{L}}^T$，其分解公式为

对$k = 1,2,\cdots,n$，计算

$$\begin{cases} \tilde{l}_{kk} = (a_{kk} - \sum_{r=1}^{k-1} \tilde{L}_{kr}^2)^{1/2} \\ \tilde{l}_{ik} = (a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} \tilde{l}_{ir}\tilde{l}_{kr})/\tilde{l}_{kk} \quad (i = k+1, k+2, \cdots, n) \end{cases} \tag{6-8}$$

其中$\sum_1^0 = 0$

这里 $\tilde{\boldsymbol{L}} = \begin{bmatrix} \tilde{l}_{11} & & & \\ \tilde{l}_{21} & \tilde{l}_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \tilde{l}_{n1} & \tilde{l}_{n2} & \cdots & \tilde{l}_{nn} \end{bmatrix}$

ii）求解方程组 $\tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{b}$．即

$$y_k = \frac{(b_k - \sum_{r=1}^{k-1} \tilde{l}_{kr} y_r)}{\tilde{l}_{kk}} \quad (k = 1,2,\cdots,n) \tag{6-9}$$

其中$\sum_{r=1}^{0} = 0$

iii）求解方程组 $\tilde{\boldsymbol{L}}^T\boldsymbol{X}=\boldsymbol{Y}$．即

$$x_k = \frac{(y_k - \sum_{r=k+1}^{n} \tilde{l}_{rk} x_r)}{\tilde{l}_{kk}} \quad (k = n, n-1, \cdots, 2,1) \tag{6-10}$$

其中$\sum_{r=n+1}^{n} = 0$

6.1.2.3 解三对角方程组的追赶法

设方程组

$$AX = d$$

它的系数方阵 ***A*** 是一个阶数较高的三对角方阵.

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ & a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & & a_3 & b_3 & c_3 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & c_n \end{bmatrix}$$

简记 $\boldsymbol{A} = [a_i, b_i, c_i]_1^n$，上述方程组称为三对角方程组.

i）对 ***A*** 进行分解

A=LU

其中

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \alpha_2 & 1 & & & \\ & \alpha_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \alpha_n & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & & & \\ & \beta_2 & \gamma_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-1} & \gamma_{n-1} \\ & & & & \beta_n \end{bmatrix}$$

计算α_i， β_i， γ_i的计算公式为

$$\begin{cases} \beta_1 = b_1,\ \ \gamma_i = c_i, \quad (i = 1,2,\cdots,n-1) \\ \alpha_i = \frac{a_i}{\beta_{i-1}},\ \ \beta_i = b_i - \alpha_i\gamma_{i-1} \quad (i = 2,\cdots,n) \end{cases} \tag{6-11}$$

ii）求解 ***LY=d***. 即

$$y_1 = d_1$$

$$y_i = d_i - \alpha_i y_{i-1} \quad (i = 2,\cdots,n) \tag{6-12}$$

iii）解 ***UX=Y***. 即

$$x_n = y_n/\beta_n$$

$$x_i = (y_i - c_i x_{i+1})/\beta_i \quad (i = n-1, n-2, \cdots, 1) \tag{6-13}$$

6.1.3 向量、矩阵的范数及方程组的性态

6.1.3.1 向量的范数

若对任一 n 维向量 X，对应一个实数$\|X\|$，满足如下条件

（Ⅰ）非负性：$\|X\| \geq 0$且$\|\boldsymbol{X}\| = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{X} = \boldsymbol{0}$；

（Ⅱ）齐次性：$\|\lambda X\| = |\lambda| \cdot \|X\| \quad (\forall \lambda \in R)$；

（Ⅲ）三角不等式：$\|X + Y\| \leq \|X\| + \|Y\| \quad (\forall X, Y \in R^n)$

则称$\|X\|$为向量 $\boldsymbol{X}$ 的一种范数.

设 $\boldsymbol{X} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$，最常用的向量范数是 p 一范数$\|\boldsymbol{X}\|_p \ (p = 1, 2, \infty)$

其中

1-范数：$\|\boldsymbol{X}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$

2-范数：$\|\boldsymbol{X}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$

∞-范数：$\|\boldsymbol{X}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$

6.1.3.2 矩阵的范数

若对任一 n 阶方阵 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n \times n}$，对应一个实数$\|\boldsymbol{A}\|$，满足以下条件

（Ⅰ）非负性：$\|\boldsymbol{A}\| \geq 0$，且$\|\boldsymbol{A}\| = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{A} = \boldsymbol{0}$；

（Ⅱ）齐次性：$\|\lambda \boldsymbol{A}\| = |\lambda| \cdot \|\boldsymbol{A}\| \quad (\forall \lambda \in R)$；

（Ⅲ）三角不等式：$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ （$\forall n$阶方阵 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$）；

（Ⅳ）$\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$.

则称$\|A\|$为方阵 $\boldsymbol{A}$ 的一种范数.

考虑到矩阵范数总是与向量范数联系在一起的. 对于给定向量范数$\| \cdot \|$和矩阵范数$\| \ \|$，如果对任一个 n 维向量和任一 n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$，都有不等式

$$\|AX\| \leq \|A\| \cdot \|X\|$$

成立，则称所给的矩阵范数与向量范数是相容的.

下面给出一种定义矩阵范数的方法，它是由向量范数诱导出来的，且这种矩阵范数与向量范数是相容的.

设 n 维向量 $\boldsymbol{X}$ 和 n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$，且给定一种向量范数$\|X\|$，则定义

$$\|\boldsymbol{A}\|_p=\max_{\boldsymbol{X}\neq 0}\frac{\|\boldsymbol{AX}\|_p}{\|\boldsymbol{X}\|_p} \quad \text{或} \quad \|\boldsymbol{A}\|_p=\max_{\|\boldsymbol{X}\|=1}\|\boldsymbol{AX}\|_p$$

为方阵 $\boldsymbol{A}$ 的范数，并称为 $\boldsymbol{A}$ 的算子范数.

与向量 1-范数，2-范数，∞-范数相容的三种常用方阵范数分别为

定理 6.2 设 n 阶方阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}$，则

1-范数：$\|\boldsymbol{A}\|_1=\max\limits_{1\le j\le n}\sum\limits_{i=1}^{n}|a_{ij}|$

2-范数：$\|\boldsymbol{A}\|_2=(\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}))^{\frac{1}{2}}$

∞-范数：$\|\boldsymbol{A}\|_\infty=\max\limits_{1\le i\le n}\sum\limits_{j=1}^{n}|a_{ij}|$

其中 $\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})$ 为 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的最大特征值.

6.1.3.3 矩阵的谱半径

设 n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为$\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$，则称

$$\rho(\boldsymbol{A})=\max_{1\le i\le n}|\lambda_i|$$

为 $\boldsymbol{A}$ 的谱半径（$|\lambda_i|$为λ_i的模）.

定理 6.3 对于$\|\cdot\|_p$ $(p=1,2,\infty)$，都有

$$\rho(\boldsymbol{A})\le\|\boldsymbol{A}\|_p$$

6.1.3.4 矩阵的条件数

设 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵，称数

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

为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数.

6.1.4 方法的稳定性与方程的良病态

对于一个确定的线性方程组，系数矩阵的条件数较小（接近 1）时，方程组是良态的；反之，条件数较大（>>1）时，则称方程组是病态的. 条件数越大，则病态越严重. 条件数的值刻划了方程组病态的程度. 用一个稳定的方法去解一个良态方程组，必然得到精度很高的解. 同样，用一个稳定的方法去解一个病态方程组，结果就可能很差.

6.2 迭代法

迭代法的基本思想是用逐次逼近的方法求解线性方程组的解，是解线性方程组的重要方法.

设线性方程组为

$$AX = b$$

其中

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

这里讨论的线性方程组的系数矩阵都是非奇异阵，从而方程组 $\boldsymbol{AX=b}$ 有唯一解.

将方程组 $\boldsymbol{AX=b}$，改写成便于迭代的形式

$$X = BX + g$$

建立迭代格式

$$\boldsymbol{X}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{X}^{(k)} + \boldsymbol{g} \quad (k = 0,1,\cdots) \tag{7-1}$$

向量 $\boldsymbol{X}^{(0)}$事先给定，称为初始向量，用公式（7-1）逐步迭代求解的方法叫做迭代法.

如果由（7-1）产生的序列$\{\boldsymbol{X}^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$收敛，则称迭代法（7-1）是收敛的，否则称为迭代法发散.

6.2.1 Jacobi 迭代法

若$a_{ii} \neq 0$

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}) \quad (i = 1,2,\cdots,n; \quad k = 0,1,2,\cdots) \qquad (7\text{-}2)$$

其中 $\boldsymbol{X}^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)})^T$.

6.2.2 Gauss-Seidel 迭代法

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}) \quad (i = 1,2,\cdots,n; \quad k = 0,1,2,\cdots)$$

(7. 3)

其中 $\boldsymbol{X}^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)})$.

6.2.3 迭代法的收敛性分析

迭代法 $\boldsymbol{X}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{X}^{(k)} + \boldsymbol{g}$ 的收敛性与迭代矩阵 $\boldsymbol{B}$ 有关，而与右端向量 $\boldsymbol{g}$ 和初始向量 $\boldsymbol{X}^{(0)}$无关.

定理 7. 1 （迭代法的基本收敛定理）

设有方程组

$$X = BX + g$$

则对于任意初始向量 $\boldsymbol{X}^{(0)}$及右端向量 $\boldsymbol{g}$，解此方程组的迭代法（7-5）收敛的充要条件是迭代矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的谱半径

$$\rho(B) < 1$$

并可以证明，$\rho(B)$愈小，收敛速度愈快.

定理 7. 2 （迭代法收敛的充分条件）

若迭代法 $\boldsymbol{X}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{X}^{(k)} + \boldsymbol{g}$ 的迭代矩阵 $\boldsymbol{B}$ 满足 $\|\boldsymbol{B}\| = q < 1$，则

（1）对于任意的初始向量 $\boldsymbol{X}^{(0)}$与右端向量 $\boldsymbol{g}$，迭代法收敛于方程组$X = BX + g$的精确 $\boldsymbol{X}^*$.

且有如下两个误差估计式：

（2）$\|\boldsymbol{X}^* - \boldsymbol{X}^{(k)}\| \le \frac{q}{1-q}\|\boldsymbol{X}^{(k)} - \boldsymbol{X}^{(k-1)}\|$ （7-6）

（3）$\|\boldsymbol{X}^* - \boldsymbol{X}^{(k)}\| \le \frac{q^k}{1-q}\|\boldsymbol{X}^{(1)} - \boldsymbol{X}^{(0)}\|$ （7-7）

由于$\|\boldsymbol{B}\|_1$，$\|\boldsymbol{B}\|_\infty$都能很方便地用 $\boldsymbol{B}$ 的元素来表示，因此常用

$$①\|\boldsymbol{B}\|_\infty = \max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|b_{ij}| < 1$$

或 $$②\|\boldsymbol{B}\|_1 = \max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|b_{ij}| < 1$$

来作为判别迭代法是否收敛的充分条件：当$\|\boldsymbol{B}\|<1$时，迭代必然收敛，不过要注意，$\|\boldsymbol{B}\|<1$仅是收敛的充分条件而不是必要条件.

判别条件 1：若线性代数方程组 $\boldsymbol{AX=b}$ 的系数方阵 $\boldsymbol{A}=[a_{ij}]_{n\times n}\in\boldsymbol{R}^{n\times n}$ 满足下列条件一：

①按行（或按列）为严格对角占优；

②不可约且按行（或按列）为弱对角占优，则 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法都是收敛的.

判别条件 2：若线性代数方程组 $\boldsymbol{AX=b}$ 的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为对称正定阵，则 Gauss-Seidel 迭代法收敛.

判别条件 3：若线性代数方程组 $\boldsymbol{AX=b}$ 的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为对称正定阵，且 $2\boldsymbol{D}-\boldsymbol{A}$ 也为对称正定阵，则 Jacobi 迭代法收敛；若 $\boldsymbol{A}$ 为对称正定阵而 $2\boldsymbol{D}-\boldsymbol{A}$ 为非正定阵，则 Jacobi 迭代法发散（其中，$\boldsymbol{D}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的对角元组成的对角阵，所以，$2\boldsymbol{D}-\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 只是非对角元的符号不同）.

定理 7.3　逐次超松驰迭代法收敛的必要条件是松驰因子满足

$$0<\omega<2 \tag{7-8}$$

判别条件 4：若线性代数方程组 $\boldsymbol{AX=b}$ 的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为对称正定阵，则当$0<\omega<2$时，逐次超松驰迭代法收敛.

判别条件 5：若线性代数方程组 $\boldsymbol{AX=b}$ 的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为严格对角占优矩阵，则当$0<\omega\le 1$时，逐次超松驰迭代法收敛.

6.3 典型算例

例 1：用直接三角分解法求解两个有相同系数矩阵的方程组 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}_1$ 和 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}_2$.

其中 $$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&2&3&4\\1&4&9&16\\1&8&27&64\\1&16&81&256\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}_1=\begin{bmatrix}4\\10\\28\\82\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}_2=\begin{bmatrix}2\\12\\56\\240\end{bmatrix}$$

分析 用系数矩阵 A 的 LU 直接三角分解法求解方程组时, 由于把对系数矩阵的计算和对右端项的计算分开了，这就使我们在计算系数矩阵相同而右端项不同的若干方程组

$$\boldsymbol{AX}=(\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_m)$$

时显得方便（其中 $\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_m$ 是各方程组的右端向量)，只须做一次矩阵分解 $A=LU$，然后解 m 个三角形方程组

$$\boldsymbol{UX}=\boldsymbol{Y}_i \quad (i=1,2,\cdots,m)$$

且每多解一个方程组仅需增加大约 n^2 次乘（除）法运算.

又由于 A 的 LU 分解规则不仅能用于分解 A, 而且能用于在把 $AX=b$ 消元化成 $UX=Y$ 时从 b 算出 Y. 这不妨把 b 看作在 A 右边的另一个列，并按照对待 A 的元 $a_{ij}(i<j)$ 的分解办法一样来处理. 也就是说，按

$$\begin{bmatrix}u_{11}&u_{12}&\cdots&u_{1n}&y_1\\l_{21}&u_{22}&\cdots&u_{2n}&y_2\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots\\l_{n1}&l_{n2}&&u_{nn}&y_n\end{bmatrix}$$

计算即可.

解： 由 A，b_1，b_2 组成 4×6 阶矩阵

$$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2]=\begin{bmatrix}1&2&3&4&4&2\\1&4&9&16&10&12\\1&8&27&64&28&56\\1&16&81&256&82&240\end{bmatrix}\xrightarrow[\text{分解得}]{\text{由公式(6−5),(6−6)}}\begin{bmatrix}1&2&3&4&\vdots&4&2\\1&2&6&12&\vdots&6&10\\1&3&6&24&\vdots&6&24\\1&7&6&24&\vdots&0&24\end{bmatrix}$$

即得

$$\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix}1&2&3&4\\&2&6&12\\&&6&24\\&&&24\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{Y}_1=\begin{bmatrix}4\\6\\6\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{Y}_2=\begin{bmatrix}2\\10\\24\\24\end{bmatrix}$$

再用回代分别求解 $\boldsymbol{UX}=\boldsymbol{Y}_1$，$\boldsymbol{UX}=\boldsymbol{Y}_2$，可得题中两个方程组的解分别为

$$\boldsymbol{X}_1=(1,0,1,0)^T,\boldsymbol{X}_2=(0,-1,0,1)^T$$

例 2：设 $\boldsymbol{A}$ 为对称正定矩阵. 考虑迭代格式

$$\boldsymbol{X}^{(k+1)}=\boldsymbol{X}^{(\boldsymbol{k})}-\omega[\boldsymbol{A}(\frac{\boldsymbol{X}^{(k+1)}+\boldsymbol{X}^{(k)}}{2})-\boldsymbol{b}]\quad(\omega>0)$$

$$(k=0,1,2,\cdots)$$

求证：（1）对任意初始向量 $\boldsymbol{X}^{(0)}$，$\left\{\boldsymbol{X}^{(k)}\right\}_{k=0}^{\infty}$ 收敛；

（2）$\left\{\boldsymbol{X}^{(k)}\right\}_{k=0}^{\infty}$ 收敛到 $\boldsymbol{AX=b}$ 的解.

分析：从所给格式的形式看，首先应把它整理成格式 $\boldsymbol{X}^{(k+1)}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}^{(k)}+\boldsymbol{g}$ 的形式，然后讨论 $\boldsymbol{B}$ 的特征值的大小，这主要是根据 $\boldsymbol{A}$ 的正定性来进行.

证：（1）因为 $\boldsymbol{A}$ 对称正定，而 $\omega>0$，对任意向量 $\boldsymbol{X}\neq\mathbf{0}$，有 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}+\frac{\omega}{2}\boldsymbol{A})\boldsymbol{X}$ $=\boldsymbol{X}^{T}\boldsymbol{X}+\frac{\omega}{2}\boldsymbol{X}^{T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}>0$，故$I+\frac{\omega}{2}A$也对称正定，从而$(I+\frac{\omega}{2}A)$可逆.

将所给格式化为

$$\boldsymbol{X}^{(k+1)}=(\boldsymbol{I}+\frac{\omega}{2}\boldsymbol{A})^{-1}(\boldsymbol{I}-\frac{\omega}{2}\boldsymbol{A})\boldsymbol{X}^{(k)}+\omega(\boldsymbol{I}+\frac{\omega}{2}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{b}$$

设迭代矩阵

$$B=(I+\frac{\omega}{2}A)^{-1}(I-\frac{\omega}{2}A)$$

的特征值为λ，$\boldsymbol{Y}\neq\mathbf{0}$ 为相应的特征向量，有

$$BY=\lambda Y$$

即

$$(I-\frac{\omega}{2}A)Y=\lambda(I+\frac{\omega}{2}A)Y$$

两边左乘 $\boldsymbol{Y}^{T}$有

$$\boldsymbol{Y}^{T}(\boldsymbol{I}-\frac{\omega}{2}\boldsymbol{A})\boldsymbol{Y}=\lambda\boldsymbol{Y}^{T}(\boldsymbol{I}+\frac{\omega}{2}\boldsymbol{A})\boldsymbol{Y}$$

$$\lambda=\frac{\boldsymbol{Y}^{T}(\boldsymbol{I}-\frac{\omega}{2}\boldsymbol{A})\boldsymbol{Y}}{\boldsymbol{Y}^{T}(\boldsymbol{I}+\frac{\omega}{2}\boldsymbol{A})\boldsymbol{Y}}=\frac{\boldsymbol{Y}^{T}\boldsymbol{Y}-\frac{\omega}{2}\boldsymbol{Y}^{T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Y}}{\boldsymbol{Y}^{T}\boldsymbol{Y}+\frac{\omega}{2}\boldsymbol{Y}^{T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Y}}$$

因 $\boldsymbol{A}$ 正定，故$\boldsymbol{Y}^{T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Y}>0$，于是显然$|\lambda|<1$，$\rho(B)<1$，从而迭代格式收敛；

（2）设$\left\{\boldsymbol{X}^{(k)}\right\}_{k=0}^{\infty}$ 收敛到 $\boldsymbol{X}^{*}$，则

$$X^* = X^* - \omega[A(\frac{X^* + X^*}{2}) - b]$$

即 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}$，即 $\left\{\boldsymbol{X}^{(k)}\right\}_{k=0}^{\infty}$ 收敛到 $\boldsymbol{AX=b}$ 的解.

7 结语

《计算方法》课程围绕非线性方程与非线性方程组的数值解法，线性方程组的数值解法，插值与逼近，积分的数值解法，常微分方程的数值解法五个方面，通过普通课和实验课两种形式，让我们在掌握理论的同时，学会将其应用于实际。通过本课程的学习，我对以前的数值分析问题有了更深的认识，从了解到运用，从运用到理解，从理解到举一反三，收获颇丰。

8 参考文献

（1） 徐利治，王仁宏，周蕴时. 函数逼近的理论与方法. 上海科学技术出版社，1983.

（2） 武汉大学，山东大学计算数学教研室编. 计算方法. 高等教育出版社，1986.

（3） 李荣华，冯果忱. 微分方程数值解法. 高等教育出版社，1991.

（4） 沈剑华. 数值计算基础. 同济大学出版社，1999.

（5） 封建湖，车刚明. 计算方法典型题分析解集. 西北工业大学出版社，1999.

（6） 同济大学计算数学教研室编. 数值计算解题方法与同步训练. 同济大学出版社，2001.

（7） 孙志忠. 计算方法典型例题分析. 科学出版社，2001.