

# 《数值分析》 期末复习

→ 重点知识点复习

# 第一部分 非线性方程求根方法

- 不动点迭代的一般理论
- 牛顿迭代法迭代格式
- 牛顿迭代法误差估计和收敛速度分析
- 非线性方程组迭代法

# 不动点迭代的一般理论

$$f(x) = 0 \quad \rightarrow \quad x = \varphi(x)$$

若存在  $x^*$ , 使得  $x^* = \varphi(x^*)$  则称  $x^*$  为  $\varphi(x)$  的不动点

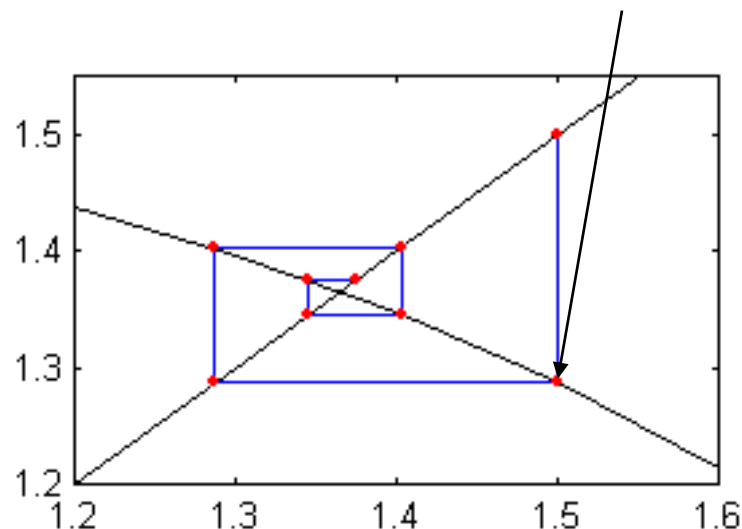
$\varphi(x)$  —— 迭代函数

$$x_{n+1} = \varphi(x_n)$$

$$\rightarrow \begin{cases} y_n = \varphi(x_n) \\ x_{n+1} = y_n \end{cases}$$

$$\begin{aligned} (x_n, y_n) &\rightarrow (x_{n+1}, y_n) \\ &\rightarrow (x_{n+1}, y_{n+1}) \\ &\dots\dots\dots \end{aligned}$$

$$\varphi(x) = \sqrt{10 - x^3} / 2$$



不动点迭代蛛网图

**举例1：** 方程  $x^3 + 4x^2 - 10 = 0$  在  $[1, 2]$  上有一个根，将方程变换成另一形式

$$(1) \quad x = \sqrt{10 - x^3} / 2 \quad \varphi(x) = \sqrt{10 - x^3} / 2$$

$$x_{n+1} = \varphi(x_n) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

$$x_0 = 1.5$$

$$(2) \quad x = \sqrt{10 / (x + 4)} \quad \varphi(x) = \sqrt{10 / (x + 4)}$$

$$x_{n+1} = \varphi(x_n) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

$$x_0 = 1.5$$



唯一性？构造规律？构造有效？

$$x_{n+1} = \frac{1}{2} \sqrt{10 - x_n^3}$$

$n$	$x_n$	$ x_{n+1} - x_n $
0	1.5000	
1	1.2870	2.1e-1
2	1.4025	1.1e-1
3	1.3455	5.7e-2
4	1.3752	2.9e-2
5	1.3601	1.5e-2
6	1.3678	7.7e-3
7	1.3639	3.9e-3
8	1.3659	2.0e-3
9	1.3649	1.0e-3
10	1.3654	5.3e-4

$$x_{n+1} = \sqrt{\frac{10}{x_n + 4}}$$

$n$	$x_n$	$ x_{n+1} - x_n $
0	1.5000	
1	1.3484	1.5e-1
2	1.3674	1.8e-2
3	1.3650	2.4e-3
4	1.3653	3.0e-4
5	1.3652	3.9e-5
6	1.3652	4.9e-6

**引理2.1** 如果  $\varphi(x) \in C^1[a, b]$ , 满足条件:

(1)  $a \leq \varphi(x) \leq b$  ; (2)  $|\varphi'(x)| \leq L < 1$

则  $\varphi(x)$  在  $[a, b]$  有**唯一的不动点**  $x^*$

**证: 1)** 若  $\varphi(a) = a$  或  $\varphi(b) = b$ , 显然  $\varphi(x)$  有不动点

设  $\varphi(a) \neq a, \varphi(b) \neq b$  则有  $\varphi(a) > a$   $\varphi(b) < b$

记  $\psi(x) = \varphi(x) - x$  则有  $\psi(a) \cdot \psi(b) < 0$

所以, 存在  $x^*$ , 使得  $\psi(x^*) = 0$

即  $x^* = \varphi(x^*)$  故  $x^*$  是  $\varphi(x)$  的不动点.

2) 如果  $\varphi(x)$  有两个不同的不动点  $x_1^* \neq x_2^*$  则有

$$x_1^* = \varphi(x_1^*) \quad x_2^* = \varphi(x_2^*)$$

两式相减得

$$x_1^* - x_2^* = \varphi(x_1^*) - \varphi(x_2^*)$$

由拉格朗日中值定理知, 存在  $\xi$  介于  $x_1^*$   $x_2^*$  之间, 使

$$x_1^* - x_2^* = \varphi(x_1^*) - \varphi(x_2^*) = \varphi'(\xi)(x_1^* - x_2^*)$$

$$\rightarrow |x_1^* - x_2^*| = |\varphi'(\xi)| \cdot |x_1^* - x_2^*|$$

$$\rightarrow |x_1^* - x_2^*| \leq L \cdot |x_1^* - x_2^*|$$

$$\rightarrow 1 \leq L \quad (\text{与 } L < 1 \text{ 条件矛盾})$$

故不动点唯一。

**定理2.4** 如果  $\varphi(x) \in C^1[a, b]$ , 满足条件:

(1)  $a \leq \varphi(x) \leq b$  ; (2)  $|\varphi'(x)| \leq L < 1$

则对任意的  $x_0 \in [a, b]$ , 迭代格式  $x_{n+1} = \varphi(x_n)$  产生的序列  $\{x_n\}$  收敛到不动点  $x^*$ , 且有

$$|x^* - x_n| \leq \frac{1}{1-L} |x_{n+1} - x_n|$$

**证:**

$$\begin{cases} x_n = \varphi(x_{n-1}) \\ x^* = \varphi(x^*) \end{cases} \Rightarrow \begin{aligned} |x_n - x^*| &= |\varphi(x_{n-1}) - \varphi(x^*)| \\ &= |\varphi'(\xi)| \cdot |x_{n-1} - x^*| \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |x_n - x^*| \leq L |x_{n-1} - x^*|$$



$$|x_n - x^*| \leq L^n |x_0 - x^*|$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |x_n - x^*| \leq \lim_{n \rightarrow \infty} L^n |x_0 - x^*| = 0 \quad (0 < L < 1)$$

所以,  $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x^*$  故迭代格式收敛

---

$$\begin{aligned} |x_n - x^*| &= |x_n - x_{n+1} + x_{n+1} - x^*| \\ &\leq |x_n - x_{n+1}| + |x_{n+1} - x^*| \leq |x_n - x_{n+1}| + L |x_n - x^*| \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (1 - L) |x_n - x^*| \leq |x_n - x_{n+1}|$$

$$\Rightarrow |x^* - x_n| \leq \frac{1}{1 - L} |x_{n+1} - x_n|$$

# 不动点迭代序列的收敛速度

数列的  $r$  阶收敛(概念):

设  $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x^*$ , 若存在  $a > 0, r > 0$  使得

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|x_{n+1} - x^*|}{|x_n - x^*|^r} = a \quad \text{则称数列}\{x_n\}\text{ } r \text{ 阶收敛.}$$

特别: (1) 收敛阶  $r=1$  时, 称为线性收敛; ( $a < 1$ )

(2) 收敛阶  $r > 1$  时, 称为超收敛;

(3) 收敛阶  $r=2$  时, 称为平方收敛

序列的收敛阶数越高, 收敛速度越快

**例2.3 方程  $x^3+10x-20=0$ , 取  $x_0 = 1.5$ , 证明迭代法在  $[1, 2]$  上,  $x_{n+1} = 20/(x_n^2 + 10)$  是线性收敛**

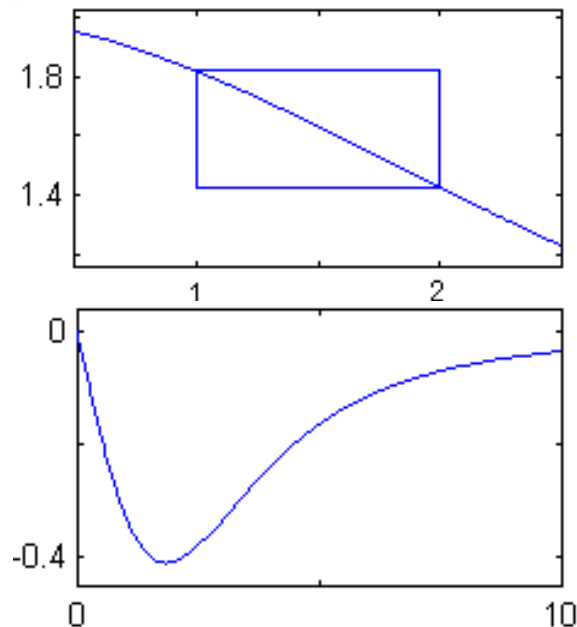
**证:令  $\varphi(x) = 20/(x^2 + 10)$**

**$\rightarrow \varphi(1) \approx 1.82 \quad \varphi(2) \approx 1.43$**

**$\rightarrow \begin{cases} \varphi'(x) = -40x/(x^2 + 10)^2 \\ \varphi''(x) = 40 \frac{3x^2 - 10}{(x^2 + 10)^3} \end{cases}$**

**$\varphi''(x) = 0 \rightarrow \hat{x} = \sqrt{10/3}$**

**$\varphi'(\hat{x}) \approx -0.4108 \rightarrow |\varphi'(x)| \leq 0.411$**



显然,在 $x^*$ 附近  $|\varphi'(x)| < 1$   $\varphi'(x) \neq 0$

利用Lagrange中值定理, 有

$$|x_{n+1} - x^*| = |\varphi(x_n) - \varphi(x^*)| = |\varphi'(\xi_n)| |x_n - x^*|$$

其中,  $\xi_n$  介于 $x_n$ 和 $x^*$ 之间. 所以

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|x_{n+1} - x^*|}{|x_n - x^*|} = \lim_{n \rightarrow \infty} |\varphi'(\xi_n)| = |\varphi'(x^*)|$$

由此可知,这一序列的收敛阶数为1,即迭代法是线性收敛.

**定理2.6** 设 $x^*$ 是  $\varphi(x)$ 的不动点,且

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

而  $\varphi^{(p)}(x^*) \neq 0$  则  $x_{n+1} = \varphi(x_n)$   $p$ 阶收敛

由Taylor公式

$$|x_{n+1} - x^*| = |\varphi(x_n) - \varphi(x^*)| = \frac{|x_n - x^*|^p}{p!} |\varphi^{(p)}(\xi_n)|$$

其中,  $\xi_n$  介于 $x_n$ 和 $x^*$ 之间. 所以

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|x_{n+1} - x^*|}{|x_n - x^*|^p} = \frac{1}{p!} \lim_{n \rightarrow \infty} |\varphi^{(p)}(\xi_n)| = \frac{1}{p!} |\varphi^{(p)}(x^*)|$$

故迭代法 $p$ 阶收敛.

# 牛顿迭代法迭代格式

牛顿迭代格式  $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$

给定初值  $x_0$ , 迭代产生数列

$$x_0, x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$$

## 应用——求正数平方根算法

设  $C > 0$ ,  $x = \sqrt{C} \Rightarrow x^2 - C = 0$

令  $f(x) = x^2 - C$ , 则  $f'(x) = 2x$

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^2 - C}{2x_n} \quad x_{n+1} = \frac{1}{2} \left[ x_n + \frac{C}{x_n} \right]$$

# 牛顿迭代法误差估计和收敛速度分析

## Newton迭代法的局部收敛性

**定理2.7:** 设  $f(x)$  在点  $x^*$  的某邻域内具有二阶连续导数, 且设  $f(x^*)=0, f'(x^*) \neq 0$ , 则对充分靠近点  $x^*$  的初值  $x_0$ , Newton迭代法至少平方收敛.

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad \Rightarrow \quad \varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

$$\varphi'(x^*) = f(x^*)f''(x^*)/[f'(x^*)]^2 = 0$$

$$\varphi''(x^*) = \frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}$$

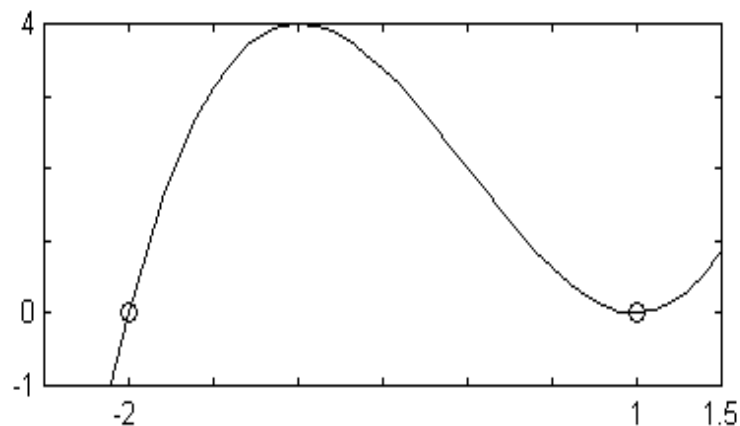
所以, Newton迭代法至少平方收敛  
(第3讲定理2.6)

# 缺陷

## 1.被零除错误

$$f(x) = x^3 - 3x + 2 = 0$$

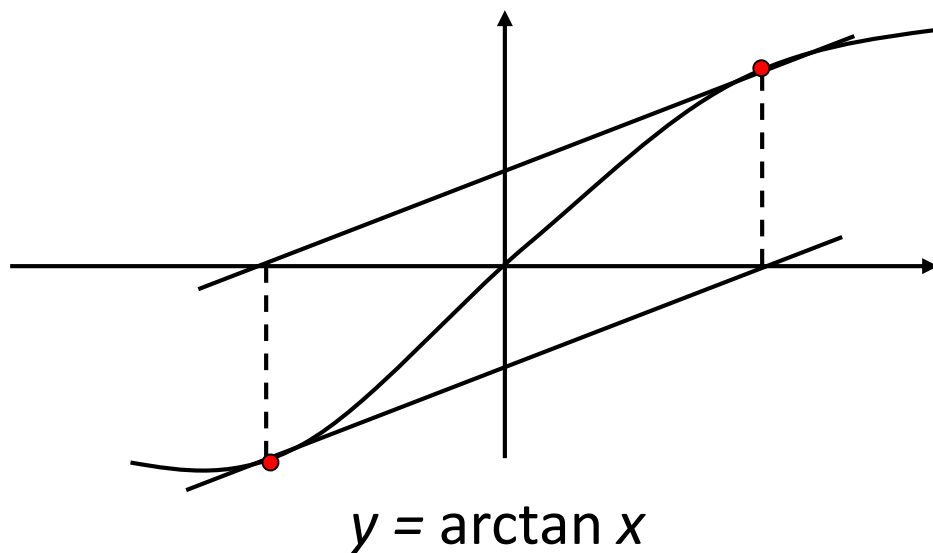
在 $x^*=1$ 附近,  $f'(x) \approx 0$



## 2.程序死循环

对  $f(x) = \arctan x$

存在  $x_0$ , 使Newton迭代法陷入死循环



## 3.其它



**定理：** 若函数 $f(x)$  在 $[a, b]$  上满足条件

(1)  $f(a)f(b) < 0$ ;

(2)  $f'(x), f''(x)$  在 $[a, b]$ 上连续且不变号  
(恒为正或恒为负) ;

(3) 取 $x_0 \in [a, b]$  使得  $f(x_0)f''(x_0) > 0$ 。

则方程  $f(x) = 0$  在 $[a, b]$  上有唯一根  $x^*$ , 且由初值 $x_0$ 按牛顿迭代公式求得的序列 $\{x_n\}$ 二阶收敛于 $x^*$ 。

$$f(x^*) = f(x_k) + f'(x_k)(x^* - x_k) + \frac{1}{2} f''(\xi_k)(x^* - x_k)^2 = 0$$

$$x^* - \left[ x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \right] = -\frac{f''(\xi_k)}{2f'(x_k)} (x^* - x_k)^2$$

$$x^* - x_{k+1} = -\frac{f''(\xi_k)}{2f'(x_k)} (x^* - x_k)^2$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|x_{k+1} - x^*|}{(x_k - x^*)^2} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|f''(\xi_k)|}{2|f'(x_k)|} = \frac{|f''(x^*)|}{2|f'(x^*)|}$$

**引理1** 设  $x^*$  是  $f(x)=0$  的二重根, 则牛顿迭代法只具有一阶收敛

**证:**  $x^*$  是二重根  $\rightarrow f(x)=(x-x^*)^2g(x)$

$$f'(x) = (x-x^*)[2g(x) + (x-x^*)g'(x)]$$

$$\varphi(x) = x - \frac{(x-x^*)g(x)}{2g(x) + (x-x^*)g'(x)}$$

$$\rightarrow \varphi'(x^*) = 1 - \frac{1}{2} \quad \text{牛顿迭代法只是一阶收敛.}$$

**表明: 当有重根时, 传统牛顿法二阶收敛性质不成立!**

**怎么办?**



**引理2** 若  $x^*$  是  $f(x)=0$  的  $m$  重根,修正的牛顿迭代法

$$x_{n+1} = x_n - m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

为至少二阶收敛

$$m = 2 \quad \rightarrow \quad x_{n+1} = x_n - 2 \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

**表5  $x^*$ 为二重根时修正的牛顿迭代实验 (例3)**

$n$	$x_n$	$ e_n $	$ e_{n+1} / e_n ^2$
0	1.5	5.00e-001	
1	1.033333333333	3.33e-002	0.1333
2	1.00018214936	1.85e-004	0.1639
3	1.00000000552	5.52e-009	0.1667

# 非线性方程组迭代法

问题：  $n$ 个方程的 $n$ 元非线性方程组 $F(x) = 0$

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_m(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad \text{令 } x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad F(x) = \begin{pmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \dots \\ f_m(x) \end{pmatrix}, \quad \text{则方程组可以表示为 } F(x) = 0$$

## 1) 不动点方法 ( $x = G(x)$ )

构造  $x = x - F(x)$  的迭代格式

## 2) 牛顿法: $x = x - F(x)/F'(x)$

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - (DF(\vec{x}_n))^{-1} \vec{f}(\vec{x}_n)$$

其中：

$$DF(\vec{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\vec{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\vec{x})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1(\vec{x})}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(\vec{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\vec{x})}{\partial x_2} & & \frac{\partial f_2(\vec{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(\vec{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(\vec{x})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n(\vec{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

## 第二部分 线性方程组的直接法

- 高斯消元法进行LU分解
- 列主元消元法
- Doolittle法进行LU分解
- 向量范数（三种） 定义性质及其计算
- 矩阵范数（三种） 定义性质及其计算

# 高斯消元法进行LU分解

**举例：** 用高斯消元法对如下系数矩阵A进行三角分解

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 5 & 2 \\ 4 & 3 & 30 \end{bmatrix} \xrightarrow[\text{(-2)r}_1+\text{r}_3]{\text{(-3/2)r}_1+\text{r}_2} F_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{4}{2} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{3}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow A^{(1)} = F_1 A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & \frac{1}{2} & -4 \\ 0 & -3 & 22 \end{bmatrix} \xrightarrow{6\text{r}_2+\text{r}_3} F_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{3}{0.5} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow A^{(2)} = F_2 A^{(1)} = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & \frac{1}{2} & -4 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \rightarrow F_2 F_1 A = A^{(2)}$$

$$\rightarrow A = (F_2 F_1)^{-1} A^{(2)} = \boxed{F_1^{-1} F_2^{-1}} \boxed{A^{(2)}}$$

L      U

# 列主元消元法

例 列主元法  
(8位浮点数)

$$\begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 \\ -2 & 1.072 & 5.643 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

第一列中绝对值最大为-2，取-2为主元

$$\begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

不选主元

$$\begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 0.2 \times 10^9 & 0.3 \times 10^9 & 0.1 \times 10^9 \\ 0 & 0.4 \times 10^9 & 0.6 \times 10^9 & 0.2 \times 10^9 \end{bmatrix} \rightarrow \text{Error}$$



$$\rightarrow \begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ 0 & 0.3176 \times 10 & 0.18015 \times 10 & 0.5 \\ 0 & 0.2 \times 10 & 0.3 \times 10 & 0.1 \times 10 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ 0 & 0.3176 \times 10 & 0.18015 \times 10 & 0.5 \\ 0 & 0 & 0.18655541 \times 10 & 0.68513854 \times 10 \end{bmatrix}$$

回代计算

$$x_1 = -0.49105820, x_2 = -0.050886075, x_3 = 0.367257384$$

MATLAB计算

-0.49105816158235   -0.05088609088002   0.36725741028862

# Doolittle法进行LU分解

## 例3.5 求矩阵的Doolittle分解

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3 & 3 & 12 & 6 \\ 2 & 4 & -1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3/2 & 3 & 12 & 6 \\ 1 & 4 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow$$
$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3/2 & -3 & 6 & 3 \\ 1 & 0 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3/2 & -3 & 6 & 3 \\ 1 & 0 & -5 & 0 \\ 2 & 2 & 19/5 & -9 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3/2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 19/5 & 1 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 0 & -3 & 6 & 3 \\ 0 & 0 & -5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -9 \end{bmatrix}$$

**直接分解的运算特点：**

- ①旧元素减去左边行与顶上列向量的点积
- ②计算行不用除法
- ③计算列要除主对角元

# 向量范数（三种） 定义性质及其计算

**定义3.1:** 设  $R^n$  是  $n$  维向量空间, 如果对任意  $x \in R^n$ , 都有一个实数与之对应, 且满足如下三个条件:

(1) 正定性:  $\|x\| \geq 0$ , 且  $\|x\| = 0 \iff x = 0$ ;

(2) 齐次性:  $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$   $\lambda$  为任意实数

(3) 三角不等式:  $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \quad (y \in R^n)$

则称  $\|x\|$  为向量  $x$  的范数.

**三种范数:**

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i| = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n|$$
$$\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}$$
$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| = \max(|x_1|, |x_2|, \cdots, |x_n|)$$

**定义：** 如果 $R^n$ 中有两个范数  $\|x\|_s$  与  $\|x\|_t$  , 存在常数 $m, M>0$ , 使对任意 $n$ 维向量 $x$ , 有

$$m\|x\|_s \leq \|x\|_t \leq M\|x\|_s \quad \text{则称这两个范数等价.}$$

**例2.** 设 $x=(x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ , 证明

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_1 \leq n\|x\|_\infty$$

证明:  $\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n|$

$$\max_{1 \leq k \leq n} |x_k| \leq \|x\|_1 \leq n \times \max_{1 \leq k \leq n} |x_k|$$

所以  $\|x\|_\infty \leq \|x\|_1 \leq n\|x\|_\infty$

三角不等式的变形:  $\|x - y\| \geq \left| \|x\| - \|y\| \right|$

# 矩阵范数（三种）定义性质及其计算

**定义3.2** 对  $A \in R^{n \times n}$ , 存在实数  $\|A\|$  满足:

(1) 正定性:  $\|A\| \geq 0$ , 且  $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = 0$ ;

(2) 齐次性:  $\|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|$   $\lambda$  为任意实数

(3) 三角不等式:  $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$  ( $B \in R^{n \times n}$ )

(4) 相容性:  $\|A \cdot B\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$  ( $\forall A, B \in R^{n \times n}$ )

则称  $\|A\|$  是矩阵  $A$  的一个范数.

Frobenius范数  $\|A\|_F = \left( \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n a_{ij}^2 \right)^{1/2}$

# 矩阵算子范数的概念

设  $\|x\|$  是  $R^n$  上的向量范数,  $A \in R^{n \times n}$ , 则  $A$  的非负函数

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

称为矩阵  $A$  的算子范数

**注1:** 矩阵算子范数由向量范数诱导出, 如

$$\|A\|_2 = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} \quad \text{或} \quad \|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2$$

**注2:**  $A^{-1}$  的算子范数可表示为  $\left( \min_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \right)^{-1}$

$$\|A^{-1}\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|A^{-1}x\|}{\|x\|} = \max_{y \neq 0} \frac{\|y\|}{\|Ay\|} = \frac{1}{\min_{y \neq 0} \frac{\|Ay\|}{\|y\|}}$$

## 第三部分 线性方程组的迭代解法

- 雅可比迭代和高斯-赛德尔迭代的计算格式、收敛性判断方法
- 迭代向量序列的误差估计方法
- 极小化方法的基本思想、等价性定理
- 最速下降的基本思想



$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad \text{“1-范数”(列和范数)}$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad \text{无穷大范数(行和范数)}$$

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

## 雅可比迭代和高斯-赛德尔迭代的计算格式

## 雅可比迭代法

[illegible]

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left[ b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right]$$

$$(i = 1, 2, \dots, n; k = 1, 2, \dots)$$

取初始向量 $X^{(0)}=[x_1^{(0)} \ x_2^{(0)} \ \cdots \ x_n^{(0)}]^T$ , 迭代计算

**总结：雅可比迭代法的矩阵表示**

**将方程组  $AX = b$  的系数矩阵  $A$  分解**

$$A = D - U - L$$

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \quad L = - \begin{bmatrix} 0 & & & \\ a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \quad U = - \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & 0 & a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

$$AX = b \Rightarrow DX^{(k+1)} = (U+L)X^{(k)} + b$$

$$X^{(k+1)} = D^{-1}(U+L)X^{(k)} + D^{-1}b$$

$$\text{记 } B_J = D^{-1}(U+L) \quad X^{(k+1)} = B_J X^{(k)} + f_J$$

# 高斯-赛德尔迭代法的矩阵表示

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

$$\sum_{j=1}^i a_{ij}x_j^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ a_{21} & a_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{bmatrix}$$

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

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

# 迭代向量序列的误差估计方法

$$A X = b \Rightarrow (M - N) X = b \Rightarrow M X = N X + b$$

$$\text{计算格式: } X^{(k+1)} = B X^{(k)} + f \quad (B = M^{-1}N)$$

设方程组的精确解为  $X^*$ , 则有

$$X^* = B X^* + f \quad \Rightarrow$$

$$X^{(k+1)} - X^* = B(X^{(k)} - X^*)$$

$$\text{记 } \varepsilon^{(k)} = X^{(k)} - X^* \quad (k = 0, 1, 2, 3, \dots)$$

$$\text{则有 } \varepsilon^{(k+1)} = B \varepsilon^{(k)}$$

$$\varepsilon^{(k)} = B \varepsilon^{(k-1)} \quad (k = 1, 2, 3, \dots)$$

## 收敛性小结(6个定理)

**定理1:** 若  $\|B\| < 1$ , 则迭代法  $X^{(k+1)} = B X^{(k)} + f$  收敛

**定理2:** 迭代格式  $X^{(k+1)} = B X^{(k)} + f$  序列收敛的充分必要条件是:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} B^k = 0$$

**定理3:** 若  $Ax=b$  的系数矩阵  $A$  是严格对角占优矩阵, 则Jacobi和GS迭代收敛.

**定理4:** 迭代法  $X^{(k+1)} = B X^{(k)} + f$  收敛

$$\Leftrightarrow \text{谱半径 } \rho(B) < 1$$

**定理5:** 方程组  $Ax=b$  中, 若  $A$  是实对称正定矩阵, 则 Gauss-Seidel 迭代法收敛

**定理6:** 设  $X^*$  为方程组  $AX=b$  的解

若  $\|B\| < 1$ , 则对迭代格式  $X^{(k+1)} = B X^{(k)} + f$  有

$$(1) \|X^{(k)} - X^*\| \leq \frac{\|B\|}{1 - \|B\|} \|X^{(k)} - X^{(k-1)}\|$$

$$(2) \|X^{(k)} - X^*\| \leq \frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|} \|X^{(1)} - X^{(0)}\|$$

若:  $B_J = D^{-1}(U+L) \quad B_{G-S} = (D - L)^{-1}U$

# 小结(大规模稀疏线性系统迭代法求解)

三种迭代格式:

雅克比、高斯赛德尔、超松弛(高斯赛德尔为基础)。

收敛性分析(五个角度去思考):

- 是否迭代矩阵B的范数小于1?
- 是否迭代矩阵B的极限为零矩阵?
- 是否系数矩阵A为严格对角占优?
- 是否迭代矩阵B的谱半径小于1?
- 是否系数矩阵A为实对称正定? (针对GS迭代)



# 极小化方法的基本思想、等价性定理

## 初等变分原理

I 方程组问题:  $Ax = b$

II 极值问题:  $\min_{x \in R^n} f(x) = \frac{1}{2} x^T Ax - b^T x$

**定理4.10** 设  $A = (a_{ij})_{n \times n}$  为实对称正定矩阵,

则  $x$  使二次函数

$$f(x) = \frac{1}{2} (Ax, x) - (b, x)$$

取极小值  $\Leftrightarrow x$  是线性方程组  $Ax = b$  的解。

**最速下降法思想：** 解对称正定方程组  $Ax = b$

从初值点  $x^{(0)}$  出发,以负梯度方向  $r$  为搜索方向

选择步长  $t_0$ , 使  $x^{(1)} = x^{(0)} + t_0 r$  为  $f(x)$  极小值点

在  $x$  处,梯度方向是  $f(x)$  增长最快方向

负梯度方向是  $f(x)$  下降最快方向

梯度:  $\nabla f = \text{grad}f(x) = [f_{x1}, f_{x2}, \dots, f_{xn}]^T$

$$\nabla f = Ax - b$$

解对称正定方程组 $Ax = b$  的**最速下降算法**:

第一步: 取初值  $x^{(0)} \in R^{(n)}$ ,  $\varepsilon > 0$ , 计算

$$r_0 = b - Ax^{(0)}, k \leftarrow 0;$$

第二步: 计算  $t_k = (r_k, r_k) / (Ar_k, r_k)$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k r_k; \quad r_{k+1} = b - Ax^{(k+1)};$$

第三步:  $k \leftarrow k + 1$ , 如果  $\|r_k\| \geq \varepsilon$ , 转第二步;

否则, 输出:  $x^{(k)}$ , 结束.

## 第四部分 数据插值方法

- 拉格朗日插值公式以及拉格朗日插值基函数构造方法
- Hermite插值(导数插值)及插值余项
- 分段线性插值
- 均差计算方法以及牛顿插值公式的计算方法
- 样条插值

# 拉格朗日插值公式以及拉格朗日插值基函数构造方法

**定理5.1** 若插值结点 $x_0, x_1, \dots, x_n$  是  $(n+1)$ 个互异点,则满足插值条件  $P(x_k) = y_k \quad (k = 0, 1, \dots, n)$  的  $n$  次插值多项式

$$P(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$$

存在而且是唯一的。

证明: 由插值条件

$$P(x_0) = y_0$$

$$P(x_1) = y_1$$

.....

$$P(x_n) = y_n$$



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

# 方程组系数矩阵取行列式

$$|A| = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{n \geq i > j \geq 0} (x_i - x_j) \neq 0$$

故方程组有唯一解.

从而插值多项式  $P(x)$  存在而且是唯一的.

## 例5.1 误差函数表可构造6次插值函数

$x$	0	0.5000	1.0000	1.5000	2.0000	2.5000	3.0000
$y$	0	0.5205	0.8427	0.9661	0.9953	0.9996	1.0000

# 拉格朗日插值公式

插值条件:  $L(x_k) = y_k \quad (k = 0, 1, \dots, n)$

$$L_n(x) = l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + \dots + l_n(x)y_n$$

其中, 第  $k$  ( $k=0, 1, \dots, n$ ) 个插值基函数

$$l_k(x) = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)}$$

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

**定理5.2** 设  $f(x) \in C[a, b]$ , 且  $f(x)$  在  $(a, b)$  内具有  $n+1$  阶导数, 取插值结点

$$a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$$

则对任何  $x \in [a, b]$ , 满足  $L_n(x_k) = f(x_k)$  的  $n$  次插值多项式  $L_n(x)$  的误差

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

其中,  $\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$

$\xi_n \in (a, b)$  且与  $x$  有关



# 均差计算方法以及牛顿插值公式的计算方法

## 牛顿插值问题

取 $x_0, x_1, x_2$ , 求二次函数

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

满足条件

$$P(x_0) = f(x_0), P(x_1) = f(x_1), P(x_2) = f(x_2)$$

插值条件引出关于 $a_0, a_1, a_2$ 方程

$$\begin{cases} a_0 & = f(x_0) \\ a_0 + a_1(x_1 - x_0) & = f(x_1) \\ a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) & = f(x_2) \end{cases}$$

# 解下三角方程组过程中引入符号

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

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$$

$$a_0 = f(x_0), \quad a_1 = f[x_0, x_1], \quad a_2 = f[x_0, x_1, x_2]$$

牛顿插值公式:

$$P(x) = f(x_0) + f[x_1, x_2](x - x_0) \\ + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$

**定义5.3** 若已知函数  $f(x)$  在点  $x_0, x_1, \dots, x_n$  处的值  $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ . 如果  $i \neq j$ , 则

一阶均差 
$$f[x_j, x_{j+1}] = \frac{f(x_{j+1}) - f(x_j)}{x_{j+1} - x_j} \quad (j = 0, 1, \dots, n-1)$$

二阶均差 
$$f[x_j, x_{j+1}, x_{j+2}] = \frac{f[x_{j+1}, x_{j+2}] - f[x_j, x_{j+1}]}{x_{j+2} - x_j}$$
  
$$(j = 0, 1, \dots, n-2)$$

$n$ 阶均差 
$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, \dots, x_n] - f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}$$

例 由函数表  
求各阶均差

<b>x</b>	<b>- 2</b>	<b>-1</b>	<b>0</b>	<b>1</b>	<b>3</b>
<b>y</b>	<b>-56</b>	<b>-16</b>	<b>-2</b>	<b>-2</b>	<b>4</b>

解:按公式计算一阶均差、二阶均差、三阶均差

<b>x</b>	<b>f(x)</b>	<b>一阶均差</b>	<b>二阶均差</b>	<b>三阶均差</b>
<b>-2</b>	<b>-56</b>			
<b>-1</b>	<b>-16</b>	<b>40</b>		
<b>0</b>	<b>-2</b>	<b>14</b>	<b>-13</b>	
<b>1</b>	<b>-2</b>	<b>0</b>	<b>-7</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>4</b>	<b>3</b>	<b>1</b>	<b>2</b>

$$N_3(x) = -56 + 40(x + 2) - 13(x + 2)(x + 1) + 2(x + 2)(x + 1)x$$

# Hermite插值(导数插值)及插值余项

插值条件中除函数值插值条件外，还有导数值插值条件，  
即：

已知 $2n+2$ 个条件

$x_i$	$x_0$	$x_1$	$\dots$	$x_n$
$y_i = f(x_i)$	$y_0$	$y_1$	$\dots$	$y_n$
$y'_i = f'(x_i)$	$y'_0$	$y'_1$	$\dots$	$y'_n$

求：一个次数不超过 $2n+1$ 的多项式 $H_{2n+1}(x)$

## 三次Hermite插值，采用基函数方式构造 $H(x)$ ：

$$H(x) = \alpha_0(x)y_0 + \alpha_1(x)y_1 + \beta_0(x)m_0 + \beta_1(x)m_1$$

插值条件：

$$H(x_0) = y_0 \quad H(x_1) = y_1$$

$$H'(x_0) = m_0 \quad H'(x_1) = m_1$$

插值条件表

	函数值		导数值	
	$x_0$	$x_1$	$x_0$	$x_1$
$\alpha_0(x)$	1	0	0	0
$\alpha_1(x)$	0	1	0	0
$\beta_0(x)$	0	0	1	0
$\beta_1(x)$	0	0	0	1

最终求得所有4个基函数（针对三次Hermite插值）

$$\begin{aligned}\alpha_0(x) &= \left(1 + 2 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right) \left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2 & \beta_0(x) &= (x - x_0) \left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2 \\ \alpha_1(x) &= \left(1 + 2 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right) \left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)^2 & \beta_1(x) &= (x - x_1) \left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)^2\end{aligned}$$

代入4个基函数即可得：三次Hermite插值多项式

$$H(x) = \alpha_0(x)y_0 + \alpha_1(x)y_1 + \beta_0(x)m_0 + \beta_1(x)m_1$$

**定理：** 两点三次Hermite插值的误差估计式

$$R(x) = f(x) - H_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} [(x - x_0)(x - x_1)]^2$$

# 分段插值

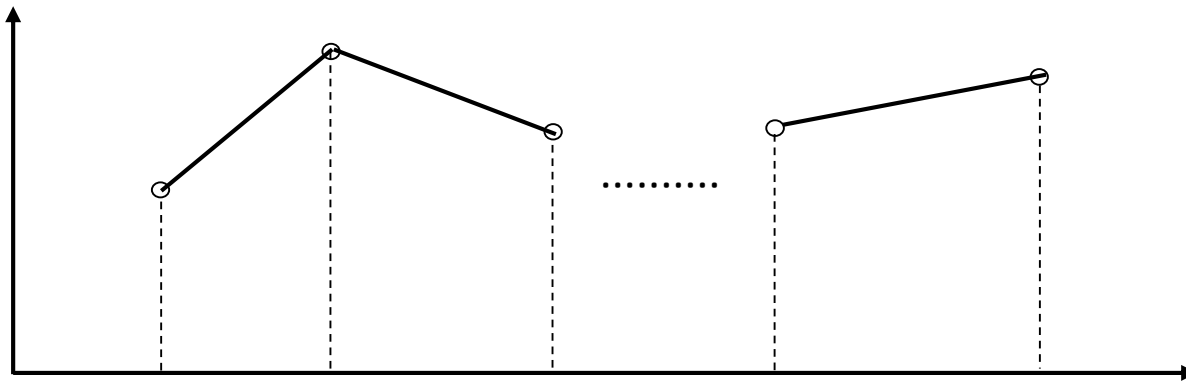
## 分段线性插值

插值节点满足:  $x_0 < x_1 < \dots < x_n$  已知

$$y_j = f(x_j) \quad (j = 0, 1, 2, \dots, n)$$

$x \in [x_j, x_{j+1}]$  时, 线性插值函数

$$L_h(x) = \frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j} y_j + \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j} y_{j+1} \quad (j = 0, 1, \dots, n-1)$$





## 分段三次Hermite插值

已知函数值和导数值  $y_j = f(x_j)$ ,  $m_j = f'(x_j)$

$$\begin{aligned} H_h(x) = & (1 + 2 \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j}) (\frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j})^2 y_j \quad (j=0,1,2,\dots,n) \\ & + (1 + 2 \frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j}) (\frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j})^2 y_{j+1} \\ & + (x - x_j) (\frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j})^2 m_j + (x - x_{j+1}) (\frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j})^2 m_{j+1} \end{aligned}$$

$$x \in [x_j, x_{j+1}] \quad (j=0,1,2,\dots,n-1)$$

# 样条插值(含一阶导数刻画的样条函数)

**定义 5.4:** 给定区间 $[a, b]$ 上的一个分划:

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$$

已知  $f(x_j) = y_j$  ( $j = 0, 1, \dots, n$ ), 如果

$$S(x) = \begin{cases} S_1(x), x \in [x_0, x_1] \\ S_2(x), x \in [x_1, x_2] \\ \dots\dots\dots \\ S_n(x), x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases}$$

满足: (1)  $S(x)$ 在  $[x_j, x_{j+1}]$ 上为三次多项式;

(2)  $S''(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上连续;

(3)  $S(x_j) = y_j$  ( $j = 0, 1, \dots, n$ ).

则称  $S(x)$ 为三次样条插值函数.

$n$ 个三次多项式(每个三次多项式是4个待定系数), 待定系数共 $4n$ 个!!

当 $x \in [x_j, x_{j+1}]$  ( $j = 0, 1, \dots, n-1$ )时

$$S_j(x) = a_j + b_j x + c_j x^2 + d_j x^3$$

由样条定义,可建立方程 $(4n-2)$ 个!! Why?

**插值条件:**  $S(x_j) = y_j$  ( $j = 0, 1, \dots, n$ )

**连续性条件:**  $S(x_j+0) = S(x_j-0)$  ( $j = 1, \dots, n-1$ )

$$S'(x_j+0) = S'(x_j-0) \quad (j = 1, \dots, n-1)$$

$$S''(x_j+0) = S''(x_j-0) \quad (j = 1, \dots, n-1)$$

方程数少于未知数个数??

(1)自然边界条件:  $S''(x_0)=0, S''(x_n)=0$

(2)周期边界条件:  $S'(x_0)=S'(x_n), S''(x_0)=S''(x_n)$

(3)固定边界条件:  $S'(x_0)=f'(x_0), S'(x_n)=f'(x_n)$

即可计算所有未知量!

## 举例：分段Hermite插值公式导出的样条方法

已知函数表

$x$	$x_0$	$x_1$	.....	$x_n$
$f(x)$	$y_0$	$y_1$	.....	$y_n$

设  $f(x)$  在各插值节点  $x_j$  处的一阶导数为  $m_j$  (未知)

取  $x_{j+1} - x_j = h$ , ( $j = 0, 1, 2, \dots, n$ ). 当  $x \in [x_j, x_{j+1}]$  时,  
分段Hermite插值

$$S(x) = \left(1 + 2\frac{x - x_j}{h}\right)\left(\frac{x_{j+1} - x}{h}\right)^2 y_j + \left(1 + 2\frac{x_{j+1} - x}{h}\right)\left(\frac{x - x_j}{h}\right)^2 y_{j+1} \\ + (x - x_j)\left(\frac{x_{j+1} - x}{h}\right)^2 m_j + (x - x_{j+1})\left(\frac{x - x_j}{h}\right)^2 m_{j+1}$$

由 $S''(x)$ 连续：有等式： $S''(x_j + 0) = S''(x_j - 0)$

考虑  $S''(x)$  在区间  $[x_j, x_{j+1}]$  和  $[x_{j-1}, x_j]$  上表达式.

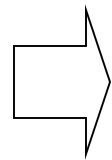
当  $x \in [x_j, x_{j+1}]$  时,  $S(x)$  由基函数组合而成

$$\alpha_j(x) = \left(1 + 2\frac{x - x_j}{h}\right)\left(\frac{x_{j+1} - x}{h}\right)^2$$

$$\alpha_{j+1}(x) = \left(1 + 2\frac{x_{j+1} - x}{h}\right)\left(\frac{x - x_j}{h}\right)^2$$

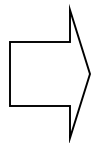
$$\beta_j(x) = (x - x_j)\left(\frac{x_{j+1} - x}{h}\right)^2$$

$$\beta_{j+1}(x) = (x - x_{j+1})\left(\frac{x - x_j}{h}\right)^2$$



$$\left\{ \begin{aligned} \alpha_j''(x_j) &= \left[ \frac{-8}{h^3} (x_{j+1} - x) + \left( 1 + 2 \frac{x - x_j}{h} \right) \frac{2}{h^2} \right]_{x=x_j} = -\frac{6}{h^2} \\ \alpha_{j+1}''(x_j) &= \left[ -\frac{8}{h^3} (x - x_j) + \left( 1 + 2 \frac{x_{j+1} - x}{h} \right) \frac{2}{h^2} \right]_{x=x_j} = \frac{6}{h^2} \end{aligned} \right.$$

$$\left\{ \begin{aligned} \beta_j''(x_j) &= \left[ \frac{4}{h^2} (x - x_{j+1}) + (x - x_j) \frac{2}{h^2} \right]_{x=x_j} = -\frac{4}{h} \\ \beta_{j+1}''(x_j) &= \left[ \frac{4}{h^2} (x - x_j) + (x - x_{j+1}) \frac{2}{h^2} \right]_{x=x_j} = -\frac{2}{h} \end{aligned} \right.$$



$$\begin{aligned} S''(x_j + 0) &= \alpha_j''(x_j)y_j + \alpha_{j+1}''(x_j)y_{j+1} \\ &\quad + \beta_j''(x_j)m_j + \beta_{j+1}''(x_j)m_{j+1} \end{aligned}$$

$$S''(x_j + 0) = -\frac{6}{h^2} y_j + \frac{6}{h^2} y_{j+1} - \frac{4}{h} m_j - \frac{2}{h} m_{j+1}$$

同理, 有

$$S''(x_j - 0) = \frac{6}{h^2} y_{j-1} - \frac{6}{h^2} y_j + \frac{2}{h} m_{j-1} + \frac{4}{h} m_j$$

联立得:

$$\begin{aligned} & -\frac{6}{h^2} y_j + \frac{6}{h^2} y_{j+1} - \frac{4}{h} m_j - \frac{2}{h} m_{j+1} \\ & = \frac{6}{h^2} y_{j-1} - \frac{6}{h^2} y_j + \frac{2}{h} m_{j-1} + \frac{4}{h} m_j \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} m_{j-1} + 4m_j + m_{j+1} &= \frac{3}{h} (y_{j+1} - y_{j-1}) \\ & ( j=1, 2, \dots, n-1 ) \end{aligned}$$



设自然边界条件成立, 即

$$S''(x_0 + 0) = -\frac{6}{h^2} y_0 + \frac{6}{h^2} y_1 - \frac{4}{h} m_0 - \frac{2}{h} m_1 = 0$$

$$S''(x_n - 0) = \frac{6}{h^2} y_{n-1} - \frac{6}{h^2} y_n + \frac{2}{h} m_{n-1} + \frac{4}{h} m_n = 0$$

自然样条的导数值满足:

$$2m_0 + m_1 = \frac{3}{h} [y_1 - y_0]$$

$$m_{n-1} + 2m_n = \frac{3}{h} [y_n - y_{n-1}]$$

$$m_{j-1} + 4m_j + m_{j+1} = \frac{3}{h} (y_{j+1} - y_{j-1})$$

(  $j=1, 2, \dots, n-1$  )

# 第五部分 数据拟合与函数逼近

- 曲线拟合的最小二乘法
- 求解超定方程组的最小二乘法
- 正交多项式及性质

# 求解超定方程组的最小二乘法

离散数据的线性拟合

$x$	$x_1$	$x_2$	.....	$x_m$
$f(x)$	$y_1$	$y_2$	.....	$y_m$

求拟合函数:  $\varphi(x) = c_1 + c_2x$

$$\begin{cases} c_1 + c_2x_1 = y_1 \\ c_1 + c_2x_2 = y_2 \\ \dots\dots\dots \\ c_1 + c_2x_m = y_m \end{cases} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} \Rightarrow GX=F$$

超定方程组

$$GX = F$$

最小二乘问题

$$\min_{X \in \mathbb{R}^2} \|GX - F\|_2$$

$$\Leftrightarrow (G^T G)X = (G^T F)$$

超定方程组:  $GX=F \rightarrow$

正规方程组:  $G^T GX = G^T F$

### 引例3 实验数据3次多项式拟合。

-3	-2	-1	0	1	2	3
-0.277	0.895	-1.565	3.456	3.060	4.856	3.898

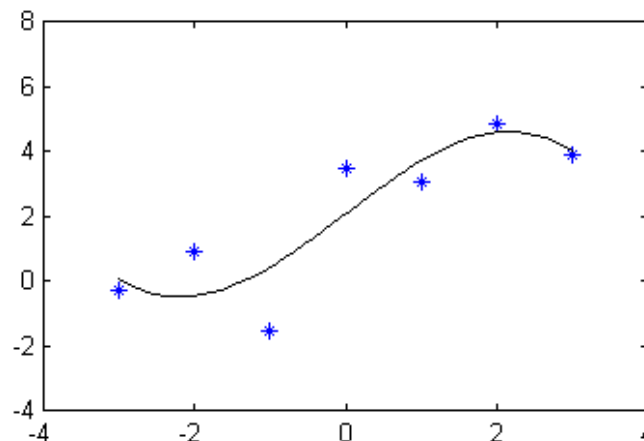
解: 设  $\varphi(x) = c_1 + c_2x + c_2x^2 + c_3x^3$

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 9 & -27 \\ 1 & -2 & 4 & -8 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 8 \\ 1 & 3 & 9 & 27 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.277 \\ 0.895 \\ -1.565 \\ 3.456 \\ 3.060 \\ 4.856 \\ 3.898 \end{bmatrix}$$

$$c_1 = 2.0563, c_2 = 1.7531$$

$$c_3 = -0.0025, c_4 = -0.1225$$

→



残差2范数:  $\|r\|_2 = 2.9007$

## 正交多项式及性质

**定义6.3** 设  $f(x), g(x) \in C[a, b]$ ,  $\rho(x)$  是区间  $[a, b]$  上的权函数, 若等式

$$(f, g) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx = 0$$

成立, 则称  $f(x), g(x)$  在  $[a, b]$  上带权  $\rho(x)$  正交.  
当  $\rho(x)=1$  时, 简称正交。

例1 验证  $\varphi_0(x)=1, \varphi_1(x)=x$  在  $[-1, 1]$  上正交,  
并求二次多项式  $\varphi_2(x)$  使之与  $\varphi_0(x), \varphi_1(x)$  正交

解: 
$$\int_{-1}^1 \varphi_0(x) \varphi_1(x) dx = \int_{-1}^1 1 \cdot x dx = 0$$

设  $\varphi_2(x) = x^2 + a_{21}x + a_{22}$

$$\int_{-1}^1 1 \cdot \varphi_2(x) dx = 0$$

$$\int_{-1}^1 x \varphi_2(x) dx = 0$$

$$\int_{-1}^1 (x^2 + a_{21}x + a_{22}) dx = 0 \quad \int_{-1}^1 x(x^2 + a_{21}x + a_{22}) dx = 0$$

$$2/3 + 2a_{22} = 0$$

$$2a_{21}/3 = 0$$

$$a_{22} = -1/3$$

$$a_{21} = 0$$

所以,  $\varphi_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$

## 2. 切比雪夫多项式的正交性

$$\int_0^{\pi} \cos(m\theta) \cos(n\theta) d\theta = 0 \quad (m \neq n)$$

$$\begin{aligned} (T_m, T_n) &= \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_m(x) T_n(x) dx \\ &= \int_0^{\pi} \cos m\theta \cos n\theta d\theta = 0 \end{aligned}$$

所以, 切比雪夫多项式在 $[-1, 1]$ 上带权

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \text{正交}$$



# 勒让德(Legendre)多项式

1. 表达式  $P_0(x) = 1, P_1(x) = x$

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n] \quad (n \geq 1)$$

2. 正交性

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ \frac{2}{2n+1}, & m = n \end{cases}$$

**3.递推式**

$$\begin{cases} p_0 = 1, & p_1 = x, \\ p_{n+1} = \frac{2n+1}{n+1}xp_n - \frac{n}{n+1}p_{n-1} \end{cases}$$

$$p_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \quad p_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

#### 4.零点分布

$P_n(x)$  的  $n$  个零点,落入区间  $[-1, 1]$  中

$P_2(x)$  的两个零点:  $x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

$P_3(x)$  的三个零点:  $x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}} \quad x_2 = 0 \quad x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}$

## 用正交多项式作最佳平方逼近

设 $P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x)$ 为区间 $[a, b]$ 上的正交多项式, 即

$$(P_k, P_j) = \int_a^b P_k(x) P_j(x) dx = 0 \\ (k \neq j, k, j = 0, 1, \dots, n)$$

求  $P(x) = a_0 P_0(x) + a_1 P_1(x) + \dots + a_n P_n(x)$

使  $L = \int_a^b [P(x) - f(x)]^2 dx = \min$

$$L(a_0, a_1, \dots, a_n) = \int_a^b \left[ \sum_{j=0}^n a_j P_j(x) - f(x) \right]^2 dx$$

$$\frac{\partial L}{\partial a_k} = 2 \int_a^b P_k(x) \left[ \sum_{j=0}^n a_j P_j(x) - f(x) \right] dx$$

由于  $(P_k, P_j) = \int_a^b P_k(x) P_j(x) dx = 0, (k \neq j)$

令  $\frac{\partial L}{\partial a_k} = 0$       记  $(P_k, f) = \int_a^b P_k(x) f(x) dx$

则有  $(P_k, P_k) a_k = (P_k, f) \quad (k = 0, 1, 2, \dots, n)$

$$a_k = \frac{(P_k, f)}{(P_k, P_k)} \quad (k = 0, 1, 2, \dots, n)$$

$f(x)$  的平方逼近  $P(x) = \sum_{k=0}^n \frac{(P_k, f)}{(P_k, P_k)} P_k(x)$

**例** 求二次多项式  $P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$  使

$$\int_0^1 [P(x) - \sin(\pi x)]^2 dx = \min$$

构造区间  $[0, 1]$  上的正交多项式

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x - 1/2, \quad P_2(x) = x^2 - x + 1/6$$

$$\sin(\pi x) \approx \frac{(P_0, \sin(\pi x))}{(P_0, P_0)} + \frac{(P_1, \sin(\pi x))}{(P_1, P_1)} P_1(x) + \frac{(P_2, \sin(\pi x))}{(P_2, P_2)} P_2(x)$$

$$\frac{(P_0, \sin(\pi x))}{(P_0, P_0)} = \frac{2/\pi}{1} \quad \frac{(P_1, \sin(\pi x))}{(P_1, P_1)} = \frac{0}{1/12}$$

$$\frac{(P_2, \sin(\pi x))}{(P_2, P_2)} = \frac{(\pi^2 - 12)/3\pi^3}{1/180}$$

## 第六部分 数值积分和数值微分

- 梯形公式、辛卜生求积公式
- 复合求积公式及算法
- 插值型求积公式的误差估计方法
- 高斯积分法
- 差商计算数值微分方法

# 梯形公式、辛卜生求积公式

梯形公式:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$$

Simpson 公式:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)] + R[f]$$

# 复合求积公式及算法

如何判断代数精度？

## 复合梯形求积公式

将积分区间 $[a,b]$   $n$  等分.取  $h=(b-a)/n$  .  $x_j=a+jh$

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



# 插值型求积公式的误差估计方法

## 插值型求积公式

对  $[a, b]$  做分划:  $a \leq x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq b$

Lagrange插值 
$$f(x) \approx \sum_{j=0}^n l_j(x) f(x_j)$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=0}^n \left[ \int_a^b l_j(x) dx \right] f(x_j)$$

令 
$$A_j = \int_a^b l_j(x) dx, (j = 0, 1, 2, \dots, n)$$

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{j=0}^n A_j f(x_j) + R[f]$$

## 插值型求积公式的余项

$$R[f] = \int_a^b [f(x) - L_n(x)]dx = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x)dx$$

---

### 例2. 用线性插值公式推导梯形公式

$$A_0 = \int_a^b \frac{b-x}{b-a} dx = \frac{1}{2}(b-a) \quad A_1 = \int_a^b \frac{x-a}{b-a} dx = \frac{1}{2}(b-a)$$

$$\Rightarrow \int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] + R[f]$$

$$R[f] = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2} (x-a)(x-b)dx :$$

# 高斯积分法

**定义** 如果求积结点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ , 使插值型求积公式

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$$

的代数精度为 $2n+1$ , 则称该求积公式为Gauss型求积公式. 称这些求积结点为Gauss点.

**定理7.2** 如果多项式 $w_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$ 与任意的不超过 $n$ 次的多项式 $P(x)$ 正交, 即

$$\int_{-1}^1 w_{n+1}(x) P(x) dx = 0$$

则,  $w_{n+1}(x)$ 的所有零点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 是Gauss点

**举例：**验证多项式  $w_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$  是  $[-1, 1]$  上正交多项式.

$$\int_{-1}^1 (a_0 + a_1 x) w_2(x) dx = a_0 \int_{-1}^1 w_2(x) dx + a_1 \int_{-1}^1 x w_2(x) dx = 0$$

得Gauss点  $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

插值公式:  $f(x) \approx \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)$

$$\int_{-1}^1 \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0} dx = \frac{2x_1}{x_1 - x_0} = 1 \quad \int_{-1}^1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx = \frac{-2x_0}{x_1 - x_0} = 1$$

两点Gauss公式  $\int_{-1}^1 f(x) dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$

**Legendre多项式递推式**

$$\begin{cases} p_0 = 1, & p_1 = x, \\ p_{n+1} = \frac{2n+1}{n+1}xp_n - \frac{n}{n+1}p_{n-1} \end{cases}$$

$$p_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \quad p_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

$$p_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) = 0$$

$$x_{0,2} = \mp \sqrt{\frac{3}{5}} \approx -0.7745067 \quad x_1 = 0$$

**三点Gauss数值求积公式**  $\int_{-1}^1 f(x)dx \approx$

$$0.5556f(-0.7745) + 0.8889f(0) + 0.5556f(0.7745)$$

# 差商计算数值微分方法

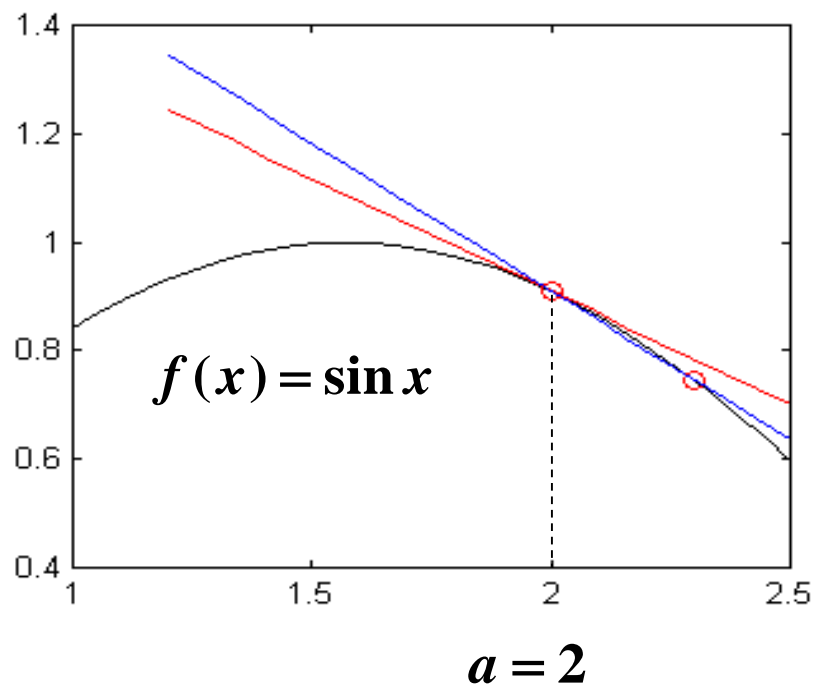
## Taylor级数展开

$$f(a+h) = f(a) + hf'(a) + \frac{h^2}{2} f''(a) + \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(a) + O(h^4)$$

### 一阶向前差商

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} + O(h)$$

$h$	误差
0.5	-0.2055
0.4	-0.1684
0.3	-0.1292
0.2	-0.0879
0.1	-0.0447

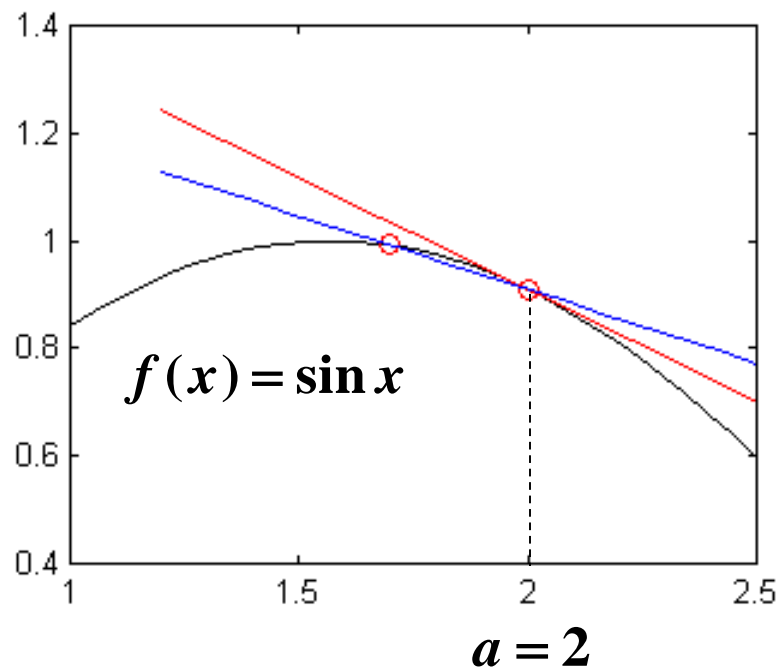


$$f(a-h) = f(a) - hf'(a) + \frac{h^2}{2} f''(a) - \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(a) + O(h^4)$$

## 一阶向后差商

$$f'(a) = \frac{f(a) - f(a-h)}{h} + O(h)$$

$h$	误差
0.5	0.2398
0.4	0.1905
0.3	0.1416
0.2	0.0934
0.1	0.0461



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

$$f(a-h) = f(a) - hf'(a) + \frac{h^2}{2} f''(a) - \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(a) + \dots$$

$$f(a+h) - f(a-h) = 2hf'(a) + O(h^3)$$

---

一阶中心差商  $f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} + O(h^2)$

$$f(a+h) + f(a-h) = 2f(a) + h^2 f''(a) + O(h^4)$$

---

二阶中心差商  $f''(a) = \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{h^2} + O(h^2)$

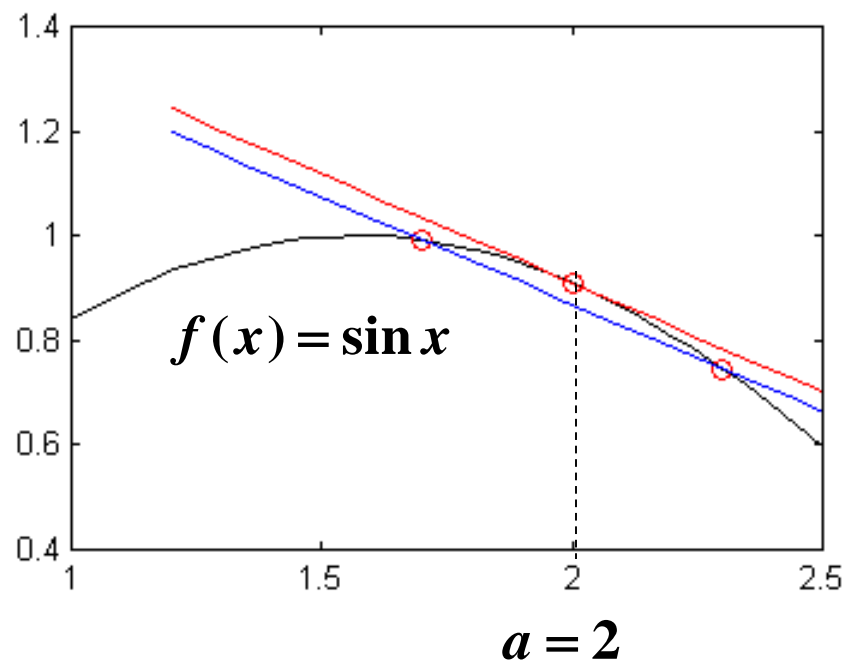


## 三种一阶差商与导数误差比较

$h$	0.5	0.4	0.3	0.2	0.1
误差1	-0.2055	-0.1684	-0.1292	-0.0879	-0.0447
误差2	0.2398	0.1905	0.1416	0.0934	0.0461
误差	0.0171	0.0110	0.0062	0.0028	0.00073

## 二阶差商与二阶导数误差

$h$	误差
0.5	0.0188
0.4	0.0121
0.3	0.0068
0.2	0.0030
0.1	0.0008



## Lagrange插值函数方法

二次多项式插值

$$f'(x) \approx \sum_{j=0}^2 l'_j(x) f(x_j)$$

$$l_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

$$l_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

$$l_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

$$f(x) \approx \sum_{j=0}^2 l_j(x) f(x_j)$$

$$f'(x_k) \approx \sum_{j=0}^2 l'_j(x_k) f(x_j)$$

$$l'_0(x) = \frac{(x-x_1) + (x-x_2)}{2h^2}$$

$$l'_1(x) = \frac{(x-x_0) + (x-x_2)}{-h^2}$$

$$l'_2(x) = \frac{(x-x_0) + (x-x_1)}{2h^2}$$

$$l'_0(x_0) = -\frac{3}{2h} \quad l'_1(x_0) = \frac{2}{h} \quad l'_2(x_0) = -\frac{1}{2h}$$

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


---

$$l'_0(x_1) = -\frac{1}{2h} \quad l'_1(x_1) = 0 \quad l'_2(x_1) = \frac{1}{2h}$$

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


---

$$l'_0(x_2) = \frac{1}{2h} \quad l'_1(x_2) = \frac{-2}{h} \quad l'_2(x_2) = \frac{3}{2h}$$

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


---

## 二次多项式插值导出的二阶导数计算公式

$$f''(x_j) \approx \frac{f(x_{j-1}) - 2f(x_j) + f(x_{j+1}))}{h^2}$$

## 四次多项式插值导出的二阶导数计算公式

$$f''(x_j) \approx \frac{1}{h^2}[-f_{j-2} + 16f_{j-1} - 30f_j + 16f_{j+1} - f_{j+2}]$$

## 第七部分 常微方程的数值解法

- 一阶常微分方程的欧拉方法、修正的欧拉法
- 局部截断误差和计算格式的精度阶概念
- 龙格库塔方法
- 常微分方程组和高阶常微分方程的数值法
- 有限差分法

# 一阶常微分方程的欧拉方法、修正的欧拉法

## 近似解求法（Euler法）：

❖ 问题：

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y), x > x_0 \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

1) 区域离散：取定步长  $h$ , 记

$$x_n = x_0 + nh, \quad (n = 1, 2, \dots, N)$$

2) 格式：Euler公式（法），

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

## 近似解求法（修正-Euler法）：

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

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

预-校方法又称为修正的Euler法,算法如下

$$k_1 = f(x_n, y_n),$$

$$k_2 = f(x_{n+1}, y_n + h k_1),$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[k_1 + k_2]$$

# 局部截断误差和计算格式的精度阶概念

设  $y_n = y(x_n)$ , 称  $R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$  为局部截断误差.

由泰勒公式

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + (x_{n+1} - x_n)y'(x_n) + \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{2} y''(\xi)$$
$$\text{即 } y(x_{n+1}) = y(x_n) + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2} y''(\xi)$$

Euler公式:  $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$  的局部截断误差

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = y(x_n) - y_n + O(h^2) = O(h^2)$$

Euler公式的局部截断误差记为:  $O(h^2)$

称Euler公式具有1阶精度。



若局部截断误差为  $O(h^{p+1})$ ，则称显式单步法（如欧拉法）具有  $p$  阶精度。(计算格式的精度概念)

例 3. 证明修正的Euler法具有2阶精度

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

其中：

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

# 将改进欧拉法推广为：龙格库塔方法（推导方法）

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h[\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2] \\ K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f(x_i + p_1 h, y_i + p_2 K_1) \end{cases}$$

首先希望能确定系数  $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$ 、 $p_1$ 、 $p_2$ ，  
的前提假设下，使得  $y_i = y(x_i)$

$$R_i = y(x_{i+1}) - y_{i+1}$$

Step 1: 将  $K_2$  在  $(x_i, y_i)$  点作 Taylor 展 (二阶泰勒展开)

$$\begin{aligned} K_2 &= f(x_i + p_1 h, y_i + p_2 h K_1) \\ &= f(x_i, y_i) + p_1 h f_x(x_i, y_i) + p_2 h K_1 f_y(x_i, y_i) + O(h^2) \end{aligned}$$

Step 2: 将  $K_2$  代入第1式，得到

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + (\lambda_1 + \lambda_2) h y'(x_i) + \lambda_2 h^2 [p_1 f_x(x_i, y_i) \\ &\quad + p_2 f(x_i, y_i) f_y(x_i, y_i)] + O(h^3) \end{aligned}$$

$$y''(x) = \frac{d}{dx} f(x, y)$$

$$= f_x(x, y) + f_y(x, y) \frac{dy}{dx}$$

$$= f_x(x, y) + f_y(x, y) f(x, y)$$

**Step 3:** 将  $y_{i+1}$  与  $y(x_{i+1})$  在  $x_i$  点的泰勒展开作比较

$$y_{i+1} = y_i + (\lambda_1 + \lambda_2)hy'(x_i) + \lambda_2 h^2 [p_1 f_x(x_i, y_i) + p_2 f(x_i, y_i)f_y(x_i, y_i)] + O(h^3)$$

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2} y''(x_i) + O(h^3)$$

要求  $R_i = y(x_{i+1}) - y_{i+1} = O(h^3)$ ，则必须有：

$$\lambda_1 + \lambda_2 = 1;$$

$$\lambda_2 p_1 = \frac{1}{2}; \quad \lambda_2 p_2 = \frac{1}{2};$$

这里有 4 个未知数，3 个方程。

满足上述方程的一族公式称为**二阶龙格 - 库塔格式**。

注意到，当  $p_1 = p_2$ ,  $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{1}{2}; p_1 = p_2 = 1$  就是改进的欧拉法。

**问题:** 为获得更高的精度，应该如何进一步推广？

## 二阶龙格 - 库塔格式推广得到更高精度格式

$$\left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + h[\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2 + \dots + \lambda_m K_m] \\ K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f(x_i + \alpha_2 h, y_i + \beta_{21} h K_1) \\ K_3 = f(x_i + \alpha_3 h, y_i + \beta_{31} h K_1 + \beta_{32} h K_2) \\ \dots \dots \\ K_m = f(x_i + \alpha_m h, y_i + \beta_{m1} h K_1 + \beta_{m2} h K_2 + \dots + \beta_{m, m-1} h K_{m-1}) \end{array} \right.$$

其中 $\lambda_i$  ( $i = 1, \dots, m$ ),  $\alpha_i$  ( $i = 2, \dots, m$ ) 和  $\beta_{ij}$  ( $i = 2, \dots, m; j = 1, \dots, i-1$ ) 均为待定系数, 确定这些系数的步骤与前面相似。

➤ 最常用为四阶经典龙格-库塔法 /\*  
Classical Runge-Kutta Method \*/ :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} y_{i+1} & = & y_i + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 & = & f(x_i, y_i) \\ K_2 & = & f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_1) \\ K_3 & = & f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_2) \\ K_4 & = & f(x_i + h, y_i + hK_3) \end{array} \right.$$

# 常微分方程组和高阶常微分方程的数值法

例1: 一阶常微分方程组初值问题

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f_1(t, x, y) & x(t_0) = x_0 \\ \frac{dy}{dt} = f_2(t, x, y) & y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

一阶常微分方程组的向量表示

$$\text{记 } Y = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad F(t, Y) = \begin{bmatrix} f_1(t, Y) \\ f_2(t, Y) \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt} = F(t, Y) & t > t_0 \\ Y(t_0) = Y_0 \end{cases} \quad \text{欧拉公式: } Y_{n+1} = Y_n + hF(t_n, Y_n) \quad (n = 0, 1, \dots, N-1)$$

$$Y_0 = [x_0, y_0]^T$$

## 例2：高阶常微分方程组初值问题

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ y(x_0) = y_0, \quad y'(x_0) = m_0 \end{cases} \quad \text{令} \quad \begin{cases} y_1(x) = y(x) \\ y_2(x) = y'(x) \end{cases}$$

一阶常微分方程组：

初值条件：

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = f(x, y_1, y_2) \end{cases} \quad \begin{matrix} y_1(x_0) = y_0, \\ y_2(x_0) = m_0 \end{matrix}$$

$$Y(x) = \begin{bmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \end{bmatrix} \quad F(x, Y) = \begin{bmatrix} y_2(x) \\ f(x, y_1, y_2) \end{bmatrix} \quad Y_0 = \begin{bmatrix} y_0 \\ m_0 \end{bmatrix}$$

常微分方程组

$$\begin{cases} \frac{dY}{dx} = F(x, Y) \\ Y(x_0) = Y_0 \end{cases}$$

# 有限差分法

二阶常微分方程边值问题一般形式

$$-\frac{d}{dx}\left(p\frac{du}{dx}\right)+r\frac{du}{dx}+qu=f(x), \quad a \leq x \leq b$$
$$u(a)=\alpha, \quad u(b)=\beta$$

将边值问题离散化为代数方程分三个步骤:

第一步:将求解区域离散化;

第二步:将微分方程离散化;

第三步:处理边界条件.

微分方程离散化方法——有限差分法

(finite difference method)

用差商替代微分方程中的导数项



有限差分法的基本问题是研究对微分算子的各阶逼近格式（即差分格式）。

第一步：求解区域离散化，均匀剖分构造均匀网格，取正整数 $n$ ，步长 $h = (b - a)/(n+1)$ ，得

$$x_j = a + jh \quad (j = 0, 1, \dots, n+1)$$

求解区域



$$\Omega = \{x \mid a < x < b\}$$



$$\Omega_h = \{x_j \mid x_j = a + jh, j = 1, \dots, n\}$$



## 第二步:微分方程离散化

考虑微分方程 
$$\begin{cases} -u'' + qu = f(x), & a \leq x \leq b \\ u(a) = \alpha, & u(b) = \beta \end{cases}$$

差分逼近

$$u''(x_j) = \frac{1}{h^2} [u(x_{j+1}) - 2u(x_j) + u(x_{j-1}))] + \frac{h^2}{12} u^{(4)}(\xi_j)$$

$$\rightarrow -\frac{1}{h^2} (u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) + qu_j = f_j$$

三点差分格式 
$$-u_{j-1} + (2 + qh^2)u_j - u_{j+1} = h^2 f_j$$

$$(j = 1, \dots, n)$$

### 第三步：边界条件处理

第一类边界条件  $u(a) = \alpha, u(b) = \beta$

$$u_0 = \alpha, u_{n+1} = \beta$$

$$\begin{bmatrix} 2+qh^2 & -1 & & \\ -1 & 2+qh^2 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 2+qh^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_n \end{bmatrix}$$

$$F_1 = h^2 f_1 + u_0$$

$$F_j = h^2 f_j \quad (j = 1, 2, \dots, n)$$

$$F_n = h^2 f_n + u_{n+1}$$

## 第八部分 矩阵的特征值与特征向量

→ 计算实矩阵的按模最大（小）的特征值  
及其相应的特征向量的乘幂法(反幂法)

(刚讲，自复习)

# 乘幂法求矩阵的特征值及特征向量的方法可归纳如下:

**输入:** 矩阵A, 初始向量  $x_0$ , 误差限  $e$ , 最大迭代次数  $N$ ,  $k \leftarrow 0$ ,  $\lambda_0 = 0$

1) 规范化计算得到:

$$z_k = \frac{x_k}{\|x_k\|_\infty}$$

2) 递归计算:

$$x_{k+1} = Az_k$$

3) 计算最大值:  $\lambda = \|x_{k+1}\|_\infty$  (即:  $\lambda = \max\{x_{k+1}\}$ )

4) 如果  $|\lambda - \lambda_0| < e$ , 则**输出:**

$\lambda$  (特征值),  $z_{k+1}$  或  $x_{k+1}$  (特征向量)

最终计算得 $\lambda_1$

5) 否则( $|\lambda - \lambda_0| \geq e$ ):

如果 $k < N$ , 则 $k \leftarrow k+1$ ,  $\lambda_0 \leftarrow \lambda$ ;

**转1)**

# 反幂法求矩阵的特征值及特征向量的方法可归纳如下:

**输入:** 矩阵A, 初始向量 $x_0$ , 误差限 $e$ , 最大迭代次数N,  $k \leftarrow 0$ ,  $\lambda_0 = 0$

1) 规范化计算得到:

$$z_k = \frac{x_k}{\|x_k\|_\infty}$$

2) 对A作三角分解 $A=LU$

即:  $x_{k+1} = A^{-1}z_k$  (与乘幂法不同)

3) 解方程组:  $LUx_{k+1} = z_k$  (两步:  $Lw_k = z_k$ ,  $Ux_{k+1} = w_k$ ) (对比乘幂法  $x_{k+1} = Az_k$ )

4) 计算最大值:  $a = \|x_{k+1}\|_\infty$  (即  $a = \max\{|x_{k+1}|\}$  为 $A^{-1}$ 的最大特征值近似)

5) 如果  $|a - \lambda_0| < e$ , 则输出:

$\lambda = 1/a$  (特征值),  $z_{k+1}$  或  $x_{k+1}$  (对应的特征向量)

6) 否则  $|a - \lambda_0| \geq e$ :

如果:  $k < N$ , 则  $k \leftarrow k+1$ ,  $\lambda_0 \leftarrow a$ ;

