

数值分析

误差来源与分类：

1. 模型误差
2. 观测误差
3. 截断误差
4. 舍入误差

绝对误差：

相对误差：

$$\begin{aligned} & \text{绝对误差} = |x - x^*| \\ & \text{相对误差} = \frac{|x - x^*|}{|x|} \end{aligned}$$

相对误差限：

有效数（四舍五入）：如果近似值 x^* 的误差限是其某一位上的半个单位, 且该位直到 x 的第一个非零数字一共有 n 位, 则称近似值具有 n 位有效数字, 用这 n 位有效数字表示的近似数称为有效数.

在科学记数法中通常将 n 位有效数表示成
即

其中 k 为一整数, a_1, a_2, \dots, a_n 都是 0 到 9 中的整数, 且 $a_1 \neq 0$.

按上式表示的有效数 x^* , 其误差为 $\pm \frac{1}{2} \times 10^{k-n}$.

所以 x^* 的误差限为 $\pm \frac{1}{2} \times 10^{k-n}$. 因此在 x 相同的情况下, n 越大则误差越小, 亦即说明一个近似值的有效位数越多其误差限越小.

又由 $x^* = a_1 \times 10^k + a_2 \times 10^{k-1} + \dots + a_n \times 10^{k-n+1}$, 可知 x^* 的相对误差限为 $\frac{1}{2} \times 10^{k-n+1} / |x^*|$.

上式表明一个近似值的有效位数越多, 其相对误差限也越小. 由于 $|x^*| \approx |x|$, 所以有时也简单地取

$\frac{1}{2} \times 10^{k-n+1} / |x|$ 作为 n 位有效数 x^* 的相对误差限.

数据误差对函数值的影响 (Taylor级数展开)：

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

eg：已知计算球的体积所产生的相对误差为1%，若根据所得体积的值推算球的半径，问相对误差是多少？

$$\frac{(-1)^s M}{R^k} \times 2^E$$

机器数：

设一台计算机有 n 位字长, 采用 R 进制, 阶码为 k , 且 M 和 E 都是由该计算机的硬件所决定的某些常数), 则在此计算机中数的浮点表示为

$$(-1)^s M \times R^E$$

其中 M 为满足

的整数, 称 M 为尾数, 称 R^E 为浮点数的基.
若规定 M 为规格化的浮点数, 则称此浮点数为规格化的浮点数.

机器数系：所有规格化的浮点数的全体及机器零组成的集合称为机器数系, 记作

该集合共有 $2 \times R^k$ 个数

设 x 为任一实数, 由于机器数系 S 是一个不完全的有理数集, 因此一般讲在规格化浮点数系 S 中只能近似地表示 x , 我们将它记为 x^* .

定理TH： 设实数 x , 在机器数系 S 中的浮点表示为 x^* , 则 x^* 的相对误差 ϵ 满足

$$|\epsilon| \leq \frac{1}{2R^k}$$

证明：设 $x = M \times R^E$, 其中 M 为规格化的浮点数, 对于舍入机,

$$M^* = \frac{\lfloor M \times R^k \rfloor}{R^k}$$

对于截断机,

$$M^* = \frac{\lfloor M \times R^k \rfloor}{R^k}$$

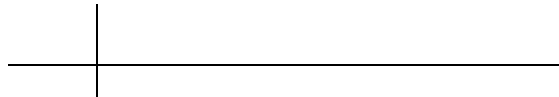
-

定义：对于某一种**算法（对象是算法，不是数学问题）**，如果初始数据有很小的误差仅使最终结果产生较小的误差，则称该算法是（数值）稳定的，否则称为（数值）不稳定的。

判断 A 中的系数 a_{ij} 是否大于1。

病态与良态问题：对**数学问题本身**而言，如果输入数据的微小误差，引起输出数据只有微小的改变，则称这类问题是良态的，否则称为病态的。

秦九韶算法：



非线性方程的求解：

二分法(单根)：

不动点迭代法：

Th：迭代法的收敛性

Th：设方程 $f(x) = 0$ 在区间 $[a, b]$ 上有根 α ，且 $f'(x) \neq 0$ ，则对任意 $x_0 \in [a, b]$ ，且 $x_0 \neq \alpha$ ，迭代格式 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 发散。

定义：对于方程 $f(x) = 0$ ，若在根 α 的某个邻域 $U(\alpha, \delta)$ 内，对任意的初值 $x_0 \in U(\alpha, \delta)$ ，迭代格式 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 都收敛，则称该迭代法在 α 附近局部收敛。

Th：设方程 $f(x) = 0$ 有根 α ，且在 α 的某个邻域 $U(\alpha, \delta)$ 内存在1阶连续导数，则：

- (1) 当 $|\varphi'(\alpha)| < 1$ 时，迭代格式 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 局部收敛；
- (2) 当 $|\varphi'(\alpha)| > 1$ 时，迭代格式 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 发散。

证明：

定义（迭代法的收敛速度）：设序列 $\{x_k\}$ 收敛于 α ，并记 $e_k = x_k - \alpha$ ，如果常数 $p \geq 1$ 及非常数 $C > 0$ ，使得 $|e_{k+1}| \leq C|e_k|^p$ ，则称序列 $\{x_k\}$ 是 p 阶收敛的。

Th: 若 $f(x)$ 在 x_0 的某个邻域内有 n 阶连续导数, 且 $f'(x_0) \neq 0$, 则迭代格式 $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ 在 x_0 附近是 n 阶局部收敛的, 且有 $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x_{k+1} - \alpha}{x_k - \alpha} = 0$

证明:

$$\begin{aligned} f(x_k) &= f(x_0 + (x_k - x_0)) \\ &= f(x_0) + f'(x_0)(x_k - x_0) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x_k - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}(x_k - x_0)^n \end{aligned}$$

Newton迭代法: 设 x_0 是方程 $f(x) = 0$ 的一个近似根, 把 $f(x)$ 在 x_0 处作一阶Taylor展开, $f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$, 近似方程为 $f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) = 0$, 设 $x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$, 则近似方程的解为 x_1 , 取 x_1 作为原方程的近似根, 令 $x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$, 称其为Newton迭代格式, 该方法称为Newton法。

Newton迭代法局部收敛性证明:

$$\begin{aligned} x_{k+1} - \alpha &= x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} - \alpha \\ &= \frac{f'(x_k)(x_k - \alpha) - f(x_k)}{f'(x_k)} \\ &= \frac{f'(x_k)(x_k - \alpha) - [f'(x_k)(x_k - \alpha) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x_k - \alpha)^2 + \dots]}{f'(x_k)} \\ &= -\frac{f''(\xi)}{2f'(x_k)}(x_k - \alpha)^2 + \dots \end{aligned}$$

Th(Newton法大范围收敛): 设函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 内存在2阶连续导数, 且满足条件:

- (1) $f'(x) \neq 0$;
- (2) 当 $x \in [a, b]$ 时, $f(x)f'(x) > 0$;
- (3) 当 $x \in [a, b]$ 时, $|f''(x)| \leq M$;
- (4) $f(a)f(b) < 0$.

则对任意初值 $x_0 \in [a, b]$, 由Newton迭代格式 $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ 产生的序列2阶收敛到方程 $f(x) = 0$ 在 $[a, b]$ 内的唯一单根 α 。

eg: 幂级数法求自然数平方和

$$1^2 + 2^2 + \dots + n^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$$

定义 (向量范数): 设 $\| \cdot \|$ 是定义在 V 上的实函数, 如果它满足以下 3 个条件:

- 对任意 $x \in V$, 有 $\|x\| \geq 0$ 当且仅当 $x = 0$ (非负性);
- 对任意常数 α 和任意 $x \in V$, 有 $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$ (齐次性);
- 对任意 $x, y \in V$ 有 $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (三角不等式), 则称 $\| \cdot \|$ 为 V 上的向量范数。

向量的 1-范数: $\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n|$;
 向量的 p -范数: $\|x\|_p = \sqrt[p]{|x_1|^p + |x_2|^p + \dots + |x_n|^p}$;
 向量的 2-范数: $\|x\|_2 = \sqrt{|x_1|^2 + |x_2|^2 + \dots + |x_n|^2}$.

Th(向量的连续性)：设 $\|\cdot\|$ 为 E 上的任一向量范数, 则 f 为 E 的分量的连续函数。

$$\|f\| = \max_{1 \leq i \leq n} \|f_i\|$$

定义：设 $\|\cdot\|_1$ 和 $\|\cdot\|_2$ 是 E 上两个范数, 如果存在两个正常数 α 和 β , 使得对任意的 $x \in E$, 有 $\alpha\|x\|_1 \leq \|x\|_2 \leq \beta\|x\|_1$, 则称范数 $\|\cdot\|_1$ 和 $\|\cdot\|_2$ 等价。

Th (向量范数的等价性)：设 $\|\cdot\|_1$ 和 $\|\cdot\|_2$ 是 E 上任意两个范数, 则 $\|\cdot\|_1$ 和 $\|\cdot\|_2$ 是等价的。

定义(向量的收敛)：设 $\|\cdot\|$ 是 E 中的一种范数, $\{x_n\}$ 是 E 中一向量序列, x 是一常向量, 如果 $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x_n - x\| = 0$, 则称向量序列 $\{x_n\}$ 收敛于 x , 并记为 $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x$ 。

定义(向量的距离)：设 $\|\cdot\|$ 为 E 上的一个向量范数, $x, y \in E$, 称 $\|x - y\|$ 为 x 和 y 之间的距离。

定义(矩阵的算子范数)：设 $\|\cdot\|$ 为 E 上的任一向量范数, 称 $\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$ 为矩阵 A 的范数, 记为 $\|A\|$, 即 $\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$ 。

矩阵算子范数的性质：

- 对任意 $A \in R^n$ 和任意 $x \in R^n$ 当且仅当 $\|x\| = 1$ 时, $\|Ax\| = \|A\|$ 。
- 对任意常数 α 和任意 $A \in R^n$ $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$ 。
- 对任意 $A, B \in R^n$, 有 $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ 。
- 对任意 $A, B \in R^n$, 有 $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$ 。
- 对任意 $A \in R^n$, 有 $\|A^T\| = \|A\|$ 。

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

定义(谱半径)：设 $A \in R^n$ 为 A 的 n 个特征值, 称 $\rho(A) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$ 为矩阵 A 的谱半径。

定理：设 $A \in R^n$, 则

(1) $\|A\| \geq \rho(A)$;

(2) $\|A\| \geq \rho(A)$;

(3) $\|A\| = \rho(A)$ 当且仅当 A 是正规矩阵时成立。

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}$$

$$\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2}$$

Th: 设 A 为对称矩阵, 则 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 为 A 的特征值。

$$\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2}$$

Th : 设 $\|\cdot\|$ 是 \mathbb{R}^n 中的任一范数, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则有

Th: 设 $\|\cdot\|_1$ 和 $\|\cdot\|_\infty$ 是 \mathbb{R}^n 上的两个矩阵范数, 则存在两个正常数 α 和 β , 使得 $\alpha\|\cdot\|_1 \leq \|\cdot\|_\infty \leq \beta\|\cdot\|_1$, 对任意 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 成立。

$$\|A\|_1 = \sum_{j=1}^n |a_{1j}| + |a_{2j}| + \dots + |a_{nj}|$$

定义: 设 $\|\cdot\|$ 为 \mathbb{R}^n 上的一个矩阵范数, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 称 $\rho(A)$ 为 A 与 0 之间的距离。

定义: 设 $\|\cdot\|$ 为 \mathbb{R}^n 上的一个矩阵范数, $\{A_k\}_{k=1}^\infty$ 为 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 中的一个矩阵序列, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 如果 $\|A_k - A\| \rightarrow 0$, 则称矩阵序列 $\{A_k\}_{k=1}^\infty$ 收敛于矩阵 A , 并记为 $A_k \rightarrow A$ 。

定理: 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则由 A 的各幂次得到的矩阵序列 $\{A^k\}_{k=1}^\infty$, 收敛于零矩阵 0 的充分必要条件为 $\rho(A) < 1$ 。

的微小变化对解 的影响

定义(条件数): 设 为非奇异矩阵,称数 为矩阵 的条件数,用 表示, 即

通常使用的条件数如下:

(1) ;

(2) 的谱条件数

当 为对称正定矩阵时

其中 和 分别为矩阵 的最大特征值和最小特征值, 和 为 的最大特征值和最小特征值。

Th: 设 是方程组 的一个近似解, 其精确解记为 为 的余量, 则有

定义：考虑线性方程组 $Ax=b$ 其中 A 非奇异, b 为已知向量, 因而它有唯一解 x^* , 构造与其同解的线性方程组 $(I-M)x=y$, 其中 M 为迭代矩阵, y 为已知向量。

任取一个向量 $x^{(0)}$ 作为上式的近似解, 用迭代公式 $x^{(k+1)} = Mx^{(k)} + y$ 产生一个向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 。若

令 $e^{(k)} = x^{(k)} - x^*$, 得到 $e^{(k+1)} = Me^{(k)}$, 即 $e^{(k)}$ 为迭代式的解。由于两式是同解方程组, 因而 x^* 也是原式的解。称上式为迭代格式, 称 M 为迭代矩阵, 称 $x^{(k)}$ 为第 k 次迭代近似解, 称 $e^{(k)}$ 为第 k 次迭代误差。如果迭代格式对任意初始向量 $x^{(0)}$ 产生的向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 是收敛的, 则称该迭代格式是收敛的。

Jacobi迭代格式：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \dots - a_{1n}x_n^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k)} - \dots - a_{2n}x_n^{(k)}) \\ \vdots \\ x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - a_{i1}x_1^{(k)} - a_{i2}x_2^{(k)} - \dots - a_{in}x_n^{(k)}) \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1^{(k)} - a_{n2}x_2^{(k)} - \dots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)}) \end{cases}$$

Gauss-Seidel迭代：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \dots - a_{1n}x_n^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} - \dots - a_{2n}x_n^{(k)}) \\ \vdots \\ x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - a_{i1}x_1^{(k+1)} - a_{i2}x_2^{(k+1)} - \dots - a_{in}x_n^{(k)}) \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - \dots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)}) \end{cases}$$

逐次超松弛（SOR方法）：

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$$

Th:迭代格式 收敛的充分必要条件为

定义(严格对角占优)：设 如果 则称 按行严格对角占优; 如果 则称 按列严格对角占优。按行严格对角占优或按列严格对角占优统称为严格对角占优。

Th:设 是严格对角占优的, 则 。

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$$

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$$

Th: 给定线性方程组 , 如果 是严格对角占优矩阵, 则 Jacobi 迭代格式收敛。

| |

Th: 给定线性方程组 , 如果 是严格对角占优矩阵, 则 Gauss-Seidel 迭代格式是收敛的。

| |

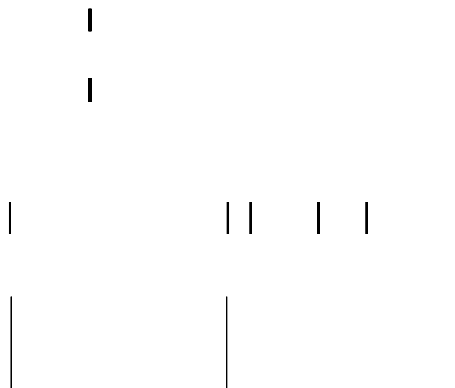
Th:

Th: SOR 方法收敛的必要条件是 。

Th: 给定线性方程组 , 如果 是对称正定矩阵, 且 , 则 SOR 方法收敛。

定义: 设函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上有定义, 并且已知 $f(x)$ 在 $n+1$ 个互异节点 x_0, x_1, \dots, x_n 上的函数值 $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$, 若存在一个次数不超过 n 的多项式 $P_n(x)$, 满足 $P_n(x_i) = f(x_i)$, 则称 $P_n(x)$ 为 $f(x)$ 的 n 次插值多项式, 称上式为插值条件, 称 x_i 为插值节点, 称 $f(x)$ 为被插值函数。

Th: 满足插值条件的 n 次多项式 $P_n(x)$ 是存在唯一的。



定义: Lagrange插值多项式



Th: 设 $f(x)$ 在包含 $n+1$ 个互异节点 x_0, x_1, \dots, x_n 的区间 $[a, b]$ 上具有 n 阶连续导数, 且在 $[a, b]$ 内存在 n 阶导数, 那么, 对于 $[a, b]$ 上的每一点 x 必存在一相应的点 ξ , 使得 $f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x)$, 其中 $\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)$ 。

定义：Newton插值

定义（差商）：设已知函数 $f(x)$ 在 n 个互异节点 x_0, x_1, \dots, x_n 上的函数值为 $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ ，称 $f[x_i]$ 为关于节点 x_i 的 1 阶差商 (或称均差)，记作 $f[x_i]$ ，即 $f[x_i] = \frac{f(x_i) - f(x_i)}{x_i - x_i}$ 称 1 阶差商 $f[x_i, x_j]$ 和 $f[x_j, x_i]$ 的差商 $f[x_i, x_j, x_i]$ 为关于节点 x_i, x_j 的 2 阶差商，记作 $f[x_i, x_j]$ ，即 $f[x_i, x_j] = \frac{f[x_j] - f[x_i]}{x_j - x_i}$ 一般的，称 n 阶差商的差商为 n 阶差商，即 $f[x_0, x_1, \dots, x_n]$ 约定 $f[x_i] = f[x_i]$ 为关于节点 x_i 的零阶差商，并记为 $f[x_i]$ 。

Th: 阶差商可表示成函数值 $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ 的线性组合，即

Th: 阶差商 $f[x_0, x_1, \dots, x_n]$ 与节点的次序无关。即

Th: 阶差商和 阶导数之间有如下关系:

其中

定义(Hermite插值):给定 中 个互异节点 上的函数值 和直到 阶的导数值 ,令 ,若存在 一个次数不超过 的多项式 ,使得

$$\begin{aligned} & \\ & \end{aligned}$$

则称 为 的 次 Hermite 插值多项式, 称节点 为 重节点。

Th:满足 Hermite插值条件 的 次多项式 是存在唯一的。

$$\begin{aligned} & \\ & \end{aligned}$$

Th:设 为满足式 Hermite插值条件 的 次插值多项式, 在包含 个互异节点 的区间 上具有 阶连续导数,且在 内存在 阶导数,那么对于 内的每一点 ,必存在一点 ,使得

(注: 式中 的指数 正好为节点 的重数。)

Th (Hermite-Genocchi): 若 , 则

其中

为 维单纯形, 。

$$\frac{f(x_i) - f(x_{i+1})}{x_i - x_{i+1}}$$

$$f(x_i)$$

$$f(x_{i+1})$$

$$f(x_i)$$

定义：Newton型-Hermite插值多项式

$$\{f(x_i), f'(x_i)\}$$

$$\{f(x_i), f'(x_i)\}$$

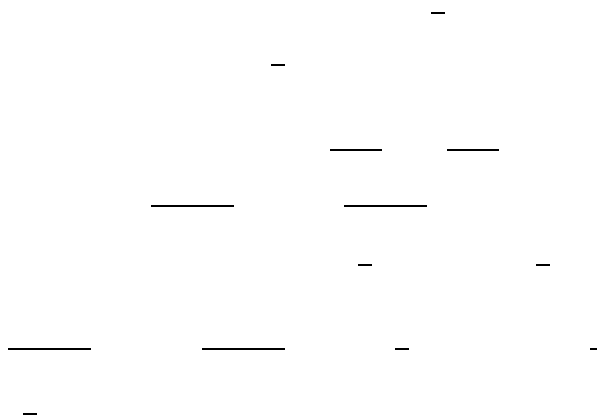
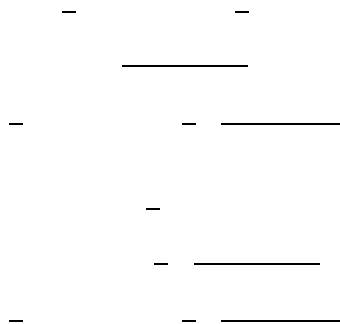
$$\{f(x_i), f'(x_i)\}$$

$$\{f(x_i), f'(x_i)\}$$

$$\{f(x_i), f'(x_i)\}$$

$$\{f(x_i), f'(x_i)\}$$

$$f(x_i)$$



高次插值的误差：如果 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上存在任意阶导数,且存在与 n 无关的常数 M , 使得 $|f^{(n)}(x)| \leq M$, 则 $E_n(f, x) \leq \frac{M}{(n+1)!} (b-a)^{n+1}$, 此时当插值节点的个数越多 (即 n 越大), 误差越小。

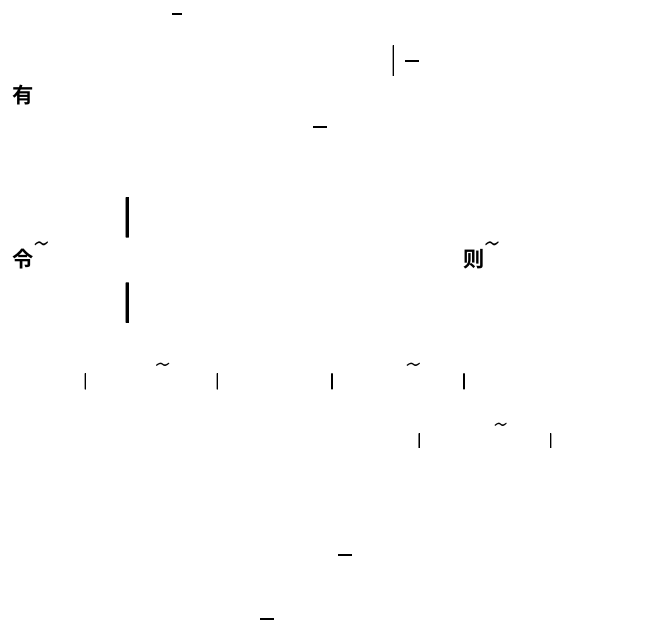
分段线性插值：给定 $n+1$ 个节点 x_0, x_1, \dots, x_n 上的数据表

x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
y_0	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5

记 $L(x)$ 为分段线性插值函数。在每个小区间 $[x_{i-1}, x_i]$ 上利用数据

x_{i-1}	x_i	y_{i-1}, y_i
x_{i-1}	x_i	y_{i-1}, y_i

作线性插值 $L_i(x)$, 由线性插值的余项估计式



分段线性插值的余项只依赖于 $f(x)$ 的 2 阶导数的界。只要 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上存在 2 阶连续导数, 当 $h \rightarrow 0$ 时就有分段线性插值余项一致趋于零。

分段Hermite插值：给定 $f(x)$ 在 n 个节点 x_0, x_1, \dots, x_n 上的数据表

x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	$f(x_4)$	$f(x_5)$
$f'(x_0)$	$f'(x_1)$	$f'(x_2)$	$f'(x_3)$	$f'(x_4)$	$f'(x_5)$

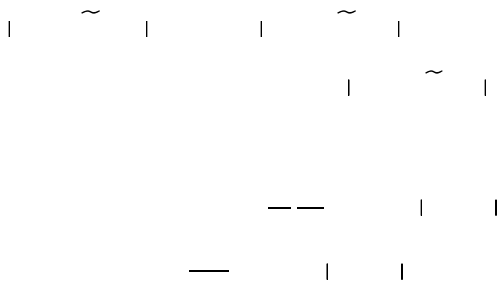
记 $f(x)$ 在每个小区间 $[x_{i-1}, x_i]$ 上利用数据

x_{i-1}	x_i	$f(x_{i-1})$	$f(x_i)$	$f'(x_{i-1})$	$f'(x_i)$
x_{i-1}	x_i	$f(x_{i-1})$	$f(x_i)$	$f'(x_{i-1})$	$f'(x_i)$
x_{i-1}	x_i	$f(x_{i-1})$	$f(x_i)$	$f'(x_{i-1})$	$f'(x_i)$

作 3 次 Hermite 插值

由 Hermite 插值余项估计式, 有

于是 $L_3(x)$ 满足插值条件. 称 $L_3(x)$ 为 $f(x)$ 的分段 3 次 Hermite 插值函数。有



分段 3 次 Hermite 插值的余项只依赖于 4 阶导数的界.只要 在 上存在 4 阶连续导数, 则当 时就有分段 3 次 Hermite 插值余项一致趋于零。

定义 (3 次样条插值) : 设在区间 上给定 个插值节点 及其函数 相应的值 。若函数 满足: 在每一小区间 上是 3 次多项式, 在 上有连续 2 阶导数, 则称 为 3 次样条函数; 如果 还满足 则称 为 3 次样条插值函数。

3 次样条插值函数求法: 在每个小区间 上是三次多项式, 因此 在此小区间 上是一次多项式。如果 在小区间 的两个端点上的值能知道, 设 , 则 的表达式可写成

其中

将上式积分一次, 得到

再将上式积分一次, 并利用 , 得到

利用 , 可得

因而

将 替换为 , 上式即为

得到

整理得

其中

如果边界条件是 , 分别代人得

即

把三式合并在一起写成矩阵形式,有

$$\begin{pmatrix} 1 & x_i & x_i^2 & x_i^3 \\ 1 & x_{i+1} & x_{i+1}^2 & x_{i+1}^3 \\ 1 & x_{i+2} & x_{i+2}^2 & x_{i+2}^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_i) \\ f(x_{i+1}) \\ f(x_{i+2}) \end{pmatrix}$$

Th(3次样条插值函数收敛性): 设被插值函数 $f(x)$ 为满足边界条件 $f'(x_0) = f'(x_n) = 0$ 或者 $f(x_0) = f(x_n) = 0$ 的 3 次样条插值函数, 则在插值区间 $[a, b]$ 上成立余项估计式

其中 $h_i = x_{i+1} - x_i$ 。

定义 (线性赋范空间): 设 V 是 F 上的一个线性空间, $\|\cdot\|$ 是 V 上的范数, 如果存在不全为零的数 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 使得

则称 $\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots + \alpha_n x_n = 0$ 是线性相关的; 否则, 若上式仅对 $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_n = 0$ 成立, 则称 x_1, x_2, \dots, x_n 是线性无关的。

若 x_1, x_2, \dots, x_n 是由 n 个线性无关元素 x_1, x_2, \dots, x_n 生成的, 即任给 $x \in V$ 有

则称 x_1, x_2, \dots, x_n 是 V 的一组基, 记为 $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, 并称 V 是 n 维的, 系数 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 称为 x 在基 $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 下的坐标, 记为 $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ 。如果 V 中有任意多个线性无关的元素, 则称 V 是无限维的。

下面考察次数不超过 n 的多项式集合 P_n , 其元素

是由 $n+1$ 个系数 a_0, a_1, \dots, a_n 唯一确定的, 并且 $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ 线性无关, 故 P_n 是 $n+1$ 维的。可以证明 P_n 是 $n+1$ 维的。

记 $C[a, b]$ 为区间 $[a, b]$ 上所有连续函数组成的集合, 令 $(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)dx$, 定义线性运算

则 $C[a, b]$ 为线性空间。

对于任意 $f, g \in C[a, b]$, 有 $\|f+g\| \leq \|f\| + \|g\|$, 因而 $C[a, b]$ 是一个无限维空间。

定义: 设 V 是一个线性空间, 若对任意的 $x \in V$, 有一个实数与之对应, 记为 $\|x\|$, 如果这种对应关系满足:

对任意 $x \in V$, 有 $\|x\| \geq 0$ 当且仅当 $x = 0$ (非负性);

对任意常数 α , 有 $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$ (齐次性);

对任意 $x, y \in V$, 有 $\|x+y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (三角不等式)。

则称 $\|\cdot\|$ 为 V 上的一个范数, 并称定义了范数的线性空间为线性赋范空间。

定义: 设 V 为线性赋范空间, 且有 $\|x\| > 0$, 称 $\|x-y\|$ 为 x 和 y 之间的距离。

(空间 $C[a, b]$ 设 $f, g \in C[a, b]$, 记

$$\|f\|_1 = \int_a^b |f(x)| dx$$

分别称为 1-范数, 无穷范数 (一致范数) 和 2-范数 (平均范数)。

用无穷范数来刻画 2 个连续函数的逼近程度是很自然的, 因为它给出 2 个函数在整个区间 $[a, b]$ 上的最大误差

定义: 设 V 为线性赋范空间, W 为 V 的子集, $x \in V$, 若在 W 中存在 y , 使得对任意 $\epsilon > 0$, 有 $\|x-y\| < \epsilon$, 则称 y 为 x 在 W 中的最佳逼近元。

定义（最佳一致逼近多项式）：设 $f(x)$ 是 $C[a, b]$ 上的函数，若存在 n 次多项式 $p_n(x)$ ，使得对于任意的 $x \in [a, b]$ ，有 $|f(x) - p_n(x)| \leq E_n$ ，即 $E_n = \max_{x \in [a, b]} |f(x) - p_n(x)|$ ，则称 $p_n(x)$ 为 $f(x)$ 的 n 次最佳一致逼近多项式。

Th: 设 $f(x)$ 是 $C[a, b]$ 上的函数，则 在 $C[a, b]$ 中存在唯一的 n 次最佳一致逼近多项式。

定义（偏差点）：设 $p_n(x)$ 是 $f(x)$ 的 n 次最佳一致逼近多项式。如果 $x_1 \in [a, b]$ 使得 $f(x_1) - p_n(x_1) = E_n$ ，则称 x_1 为 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的偏差点。当 x_1 使得 $f(x_1) - p_n(x_1) = E_n$ 时，称 x_1 为正偏差点。当 $x_2 \in [a, b]$ 使得 $f(x_2) - p_n(x_2) = -E_n$ 时，称 x_2 为负偏差点。

Th:

Th (Chebyshev 定理): 设 $p_n(x)$ 是 $f(x)$ 的 n 次最佳一致逼近多项式，则 $p_n(x)$ 在 $[a, b]$ 上至少有 $n+1$ 个交错偏差点，即存在 $n+1$ 个点 x_0, x_1, \dots, x_n ，使得 $f(x_0) - p_n(x_0) = E_n, f(x_1) - p_n(x_1) = -E_n, \dots, f(x_n) - p_n(x_n) = E_n$ ，其中 $x_0 = a$ 或 $x_n = b$ 。

Th: 设 $p_n(x)$ 是 $f(x)$ 的 n 次最佳一致逼近多项式。如果 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 内存在且保号，则 $p_n(x)$ 在 $[a, b]$ 内恰有 $n+1$ 个交错偏差点，且两端点 a, b 也是偏差点。

最佳一次逼近多项式求法：如果 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上保号，且 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上保号，设 $p_1(x)$ 为 $f(x)$ 的 1 次最佳一致逼近多项式，则有 $p_1(x) = \frac{f(a) + f(b)}{2} + \frac{f(b) - f(a)}{2(b-a)}(x-a)$ ，我们有

上述是具有 n 个参数 a_1, a_2, \dots, a_n 的 n 阶非线性方程组, 一般可用 迭代法 求解, 在特殊情形可精确求解.

定义 (内积空间): 设 V 是一个 **线性空间**, 若对 V 中任意两个元素 x, y 有实数与之对应, 记该实数为 (x, y) , 且满足:

- (1) $(x, x) \geq 0$, 有 $(x, x) = 0$ 当且仅当 $x = 0$;
 - (2) $(x, y) = (y, x)$, 有 $(x, y) = 0$ 当且仅当 x 与 y 正交;
 - (3) $(x, y) = 0$, 有 $(x, y) = 0$ 当且仅当 x 与 y 正交;
 - (4) $(x, y) = 0$, 有 $(x, y) = 0$, 且 $(x, y) = 0$.
- 则 V 称为内积空间, 二元运算 (x, y) 成为内积.

定义 (正交):

Th (Cauchy-Schwartz不等式): 设 V 是一个内积空间, 则对 V 中任意两个元素 x, y 有

定义: 在一个内积空间 V 中, 对任意 $x \in V$, 定义 $\|x\| = \sqrt{(x, x)}$.
 可以验证这是 V 上的一种范数. 正定性和齐次性容易验证.
 关于三角不等式, 利用 Cauchy-Schwarz 不等式, 有

$$\|x + y\|^2 = (x + y, x + y) = (x, x) + (x, y) + (y, x) + (y, y) = \|x\|^2 + \|y\|^2 + 2(x, y)$$

两边开方即得

因而 $\|x\| = \sqrt{(x, x)}$ 确实是 V 上的一种范数, 称为内积导出范数. 正由于此, 内积空间赋予范数后, 也是赋范空间.

定义 (最佳平方逼近): 设 V 是内积空间, (\cdot, \cdot) 是内积, W 是 V 的有限维子空间, $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ 是 W 的一组基, $x \in V$, 求 $y \in W$, 使得 $\|x - y\|$ 最小, 或者 $(x - y, y) = 0$, 称 y 为 x 在 W 中的最佳平方逼近元.

最佳平方逼近元求法: 记 $x = \sum_{i=1}^n c_i e_i$, 即为求 c_1, c_2, \dots, c_n , 使得

记 $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$, 即为求 c , 使得

注意到

对 \mathbf{x} 求偏导数得

于是我们得到驻点方程组

$$\begin{bmatrix} 2x_1 & 2x_2 & 2x_3 & 2x_4 & 2x_5 \\ 2x_1 & 2x_2 & 2x_3 & 2x_4 & 2x_5 \\ 2x_1 & 2x_2 & 2x_3 & 2x_4 & 2x_5 \\ 2x_1 & 2x_2 & 2x_3 & 2x_4 & 2x_5 \\ 2x_1 & 2x_2 & 2x_3 & 2x_4 & 2x_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

称其为正规方程组, 或法方程组。

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 1 & 4 & 9 & 16 & 25 \\ 1 & 8 & 27 & 64 & 125 \\ 1 & 16 & 81 & 256 & 625 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 5 \\ 18 \\ 47 \\ 104 \\ 226 \end{bmatrix}$$

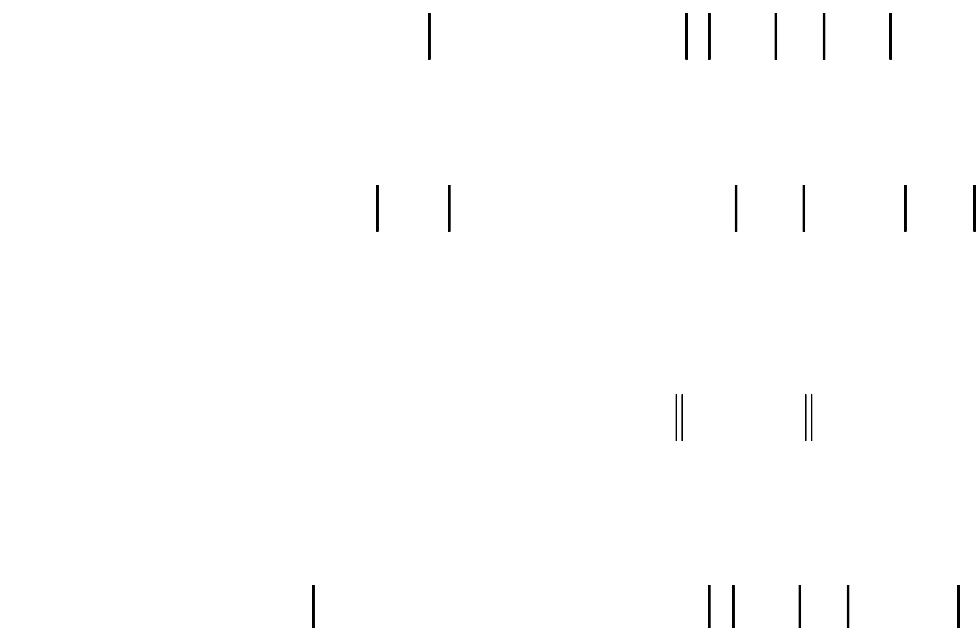
$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & 10 & 15 & 20 & 25 \\ 10 & 30 & 45 & 60 & 75 \\ 15 & 45 & 90 & 135 & 175 \\ 20 & 60 & 135 & 256 & 370 \\ 25 & 75 & 175 & 370 & 625 \end{bmatrix}, \mathbf{A}^T \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 25 \\ 100 \\ 225 \\ 400 \\ 625 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$$

定义(连续函数的最佳平方逼近): 设 $C[a, b]$ 是 $C[a, b]$ 的一个 n 维子空间。任意 $f \in C[a, b]$ 可表示为 $f(x) = \sum_{j=1}^n c_j \phi_j(x)$ 。记 $\mathbf{c} = [c_1, c_2, \dots, c_n]^T$ 。求 \mathbf{c} , 使得

称 \mathbf{c} 为 f 在 C 中的最佳平方逼近元。

超定方程组的最小二乘解:



离散数据的最佳平方逼近：

给定数据：

设 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_{n-1}$ 线性无关, 令

求 a_0, a_1, \dots, a_{n-1} , 使得

称 $p(x)$ 为给定数据的拟合函数。

如果 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_{n-1}$ 是正交基, 则称 $p(x)$ 为给定数据的 n 次最小二乘拟合多项式。

记 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \phi_0(x_0) & \phi_1(x_0) & \dots & \phi_{n-1}(x_0) \\ \phi_0(x_1) & \phi_1(x_1) & \dots & \phi_{n-1}(x_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(x_{n-1}) & \phi_1(x_{n-1}) & \dots & \phi_{n-1}(x_{n-1}) \end{bmatrix}$

则 $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{a} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$ 是下面的正规方程组 $\begin{bmatrix} a_0 & a_1 & \dots & a_{n-1} \end{bmatrix}$ 的解。

定义（机械求积法）：

称 x_0, x_1, \dots, x_{n-1} 为求积节点, 称 A_0, A_1, \dots, A_{n-1} 为求积系数, 它仅与节点 x_0, x_1, \dots, x_{n-1} 的选取有关, 而与 $f(x)$ 的具体形式无关。

这类数值积分的方法通常称作机械求积法, 它是利用一些离散点上函数值的作线性组合而得出积分的近似值, 于是求积分的问题转化为计算被积函数在节点处函数值的问题了。

定义 (插值型求积公式) :

定义 (Newton-Cotes公式) :

如果求积节点是等距的, 即
则相应的插值型求积公式称为 Newton-Cotes 公式。
令 , 则

此值依赖于 和 , 记其为 , 即

于是 Newton - Cotes 公式为
pg

定义（梯形公式）：

2 个求积节点的插值型求积公式:

称 $\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$ 为梯形公式。

定义（Simpson公式）：

3 个等距节点的插值型求积公式:

称 $\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$ 为 Simpson 公式。

定义（Cotes公式）：

5 个等距节点的求积公式:

称 $\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{88} [14f(x_0) + 32f(x_1) + 64f(x_2) + 32f(x_3) + 14f(x_4)]$ 为 Cotes 公式。

定义（代数精度）：

设有计算 $\int_a^b f(x) dx$ 的求积公式 $I(f)$ ，如果它对所有的 n 次多项式是精确的, 但至少对一个 $n+1$ 次多项式是不精确的, 则称该求积公式具有 n 次代数精度。

Th:求积公式 $I(f)$ 至少具有 n 次代数精度的充分必要条件是公式为插值型的, 即

定义(求积公式的稳定性): 已知求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^n A_k f(x_k)$, 其近似值由 $I_n(f) = \sum_{k=1}^n A_k f(x_k)$ 得出, 如果对于任意给定的 $\epsilon > 0$, 存在 $\delta > 0$, 当 $|f(x_k) - f(x)| < \delta$ 时, 成立 $|I_n(f) - \int_a^b f(x)dx| < \epsilon$, 则称此求积公式是稳定的。

复化求积公式: 求积公式的截断误差依赖于区间长度. 要减小误差, 就要减小区间长度. 将区间 $[a, b]$ 作 n 等分, 记

复化梯形公式: 对复化求积公式小区间上的积分 $\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx$ 应用梯形公式, 就得到复化梯形公式. $T_n(f) = \sum_{k=1}^n \frac{h}{2} [f(x_{k-1}) + f(x_k)]$.

由梯形公式的截断误差, 可得复化梯形公式 $T_n(f)$ 得截断误差 $E_n(f) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi)$.

设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上二阶连续可微, 则由连续函数介值定理, 存在 $\xi \in [a, b]$, 使

所以得 的截断误差：
 先验误差估计：记
 后验误差估计：
 当 很小时, 有 .将 进行 等分,

复化Simpson公式：记 , 对每个小区间上积分 应用 Simpson 公式,
 利用 Simpson 公式的截断误差, 可得复化 Simpson 公式的截断误差:

当 很小时有
 复化Cotes公式：记
 对积分 应用 Cotes 公式, 即得复化 Cotes 公式:
 其截断误差为

当 h 很小时有

$$\frac{1}{h} \int_a^b f(x) dx = \int_a^b f(x) dx + O(h^2)$$

定义（复化求积公式的阶数）：设有计算积分 $\int_a^b f(x) dx$ 的复化求积公式 I_n ，如果存在正整数 k 和非零常数 C ，使 $|I_n - I| \leq C h^k$ ，则称公式 I_n 是 k 阶的。

Romberg求积法：

$$\begin{array}{c} I_{1,1} \\ \hline I_{2,1} \quad I_{2,2} \\ \hline I_{3,1} \quad I_{3,2} \quad I_{3,3} \\ \hline I_{4,1} \quad I_{4,2} \quad I_{4,3} \quad I_{4,4} \\ \hline \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \hline I_{m,1} \quad I_{m,2} \quad I_{m,3} \quad I_{m,4} \quad \dots \quad I_{m,m} \end{array}$$

定义（Gauss求积公式）：设 $\omega(x)$ 是求积分 $\int_a^b f(x) \omega(x) dx$ 的求积公式. 如果求积公式 I_n 的代数精度是 $2n-1$ ，则称该求积公式是 Gauss-Legendre 公式 (简称 Gauss 公式), 对应的求积点 x_i 称为 Gauss 点.

Th: 设 $\{p_k(x)\}_{k=0}^n$ 是计算积分 $\int_a^b f(x) \omega(x) dx$ 的插值型求积公式, 记 $I_n(f) = \int_a^b p_n(x) \omega(x) dx$, 则求积公式 I_n 是 Gauss 求积公式 (代数精度 $2n-1$, 或 n 个 Gauss 点) 与任意一个次数不超过 n 的多项式 $p_n(x)$ 正交, 即

定义（正交多项式）：设 $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ 有 $P_n(x)$ 为区间 $[a, b]$ 上的正交多项式序列，称 $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ 为区间 $[a, b]$ 上的正交多项式序列。其中 $\int_a^b P_n(x) P_m(x) \rho(x) dx = 0$ ，如果对任意的 $n \neq m$ 。

Th: 设 $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ 为区间 $[a, b]$ 上的正交多项式序列，则对任意的 n ，多项式 $P_n(x)$ 线性无关。

Th: 设 $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ 为区间 $[a, b]$ 上的正交多项式序列，则 $P_n(x)$ 在 $[a, b]$ 上有 n 个不同的实零点。

定义（Legendre多项式）：称 $P_n(x)$ 为 n 次勒让德 (Legendre) 多项式。

Th: Legendre 多项式序列 $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ 是区间 $[-1, 1]$ 上的正交多项式序列。

区间 $[-1, 1]$ 上的 Gauss 公式：考虑区间 $[-1, 1]$ 上的 Gauss 公式 $\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n A_k f(x_k)$ ， n 次 Legendre 多项式 $P_n(x)$ 的零点就是 Gauss 公式的节点，而求积系数 $A_k = \frac{2}{(n!)^2 (P_n'(x_k))^2}$ 。

区间 $[a, b]$ 上的 Gauss 公式：考虑区间 $[a, b]$ 上的积分 $\int_a^b f(x) dx$ ，作变换 $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$ ，可得 $\int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right) \frac{b-a}{2} dt$ 。
 由 $\int_{-1}^1 f(t) dt$ 上的 Gauss 公式得 $\int_a^b f(x) dx$ 上的 Gauss 公式
 令 $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$ ，则得 $\int_a^b f(x) dx$ 上的 Gauss 公式为

Th: 设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上 n 次可微，则 Gauss 公式 $G_n(f)$ 的截断误差为

其中

数值微分：

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{h^2}{6} f'''(\xi)$$

截断误差：

$$\begin{aligned} & \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - f'(x) = \frac{1}{2h} [f(x+h) - f(x-h)] - f'(x) \\ &= \frac{1}{2h} \left[f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f'''(\xi_1) - \left(f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{6} f'''(\xi_2) \right) \right] - f'(x) \\ &= \frac{1}{2h} \left[2hf'(x) + \frac{h^3}{6} (f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)) \right] - f'(x) \\ &= \frac{h^2}{6} (f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)) \end{aligned}$$

定义（插值型求导公式）：

对于列表函数

x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	$f(x_4)$	$f(x_5)$

应用插值原理，可以建立插值多项式 $P_n(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似。由于多项式的求导比较容易，因此可以取 $P_n'(x)$ 的值作为 $f'(x)$ 的近似值，这样建立的数值公式统称为插值型求导公式。插值型求导公式的截断误差由插值余项

$R_n(x) = f(x) - P_n(x)$ 求导数得到，其中 $R_n'(x)$ 的截断误差为

在某个节点 x_i 上导数的截断误差表达式

定义：一阶常微分方程初值问题的数值解

假设

(1) $f(x, y)$ 连续.

(2) 上式存在唯一解 $y(x)$ 且在 $[a, b]$ 上充分光滑.

离散化: 将 $[a, b]$ 作 N 等分, 记 $h = (b-a)/N$. 称 h 为步长. 数值解是求初值问题的解 $y(x)$ 在离散点 x_n 处的近似值 y_n .

计算 y_{n+1} 时, 如果只用到前一步的值 y_n , 称这类方法为单步法.

计算 y_{n+1} 时, 如果用到前 k 步的值 $y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-k+1}$, 这类方法称为 k 步方法.

定义：Euler公式

将方程两边在 x_n 积分

得到

应用左矩形公式 近似右端积分得

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

其中 $\tau_n = x_n - x_{n-1}$ 为步长, $\tau_n = h$.

上式中忽略 τ_n^2 有

由上式可依次得到

将 y_n 作为 $y(x_n)$ 的近似值. Euler 公式是一个单步显式公式.

定义：单步显式公式局部截断误差

一般的单步显式公式为

其中, $\phi(x, y, h)$ 称为增量函数.

称

为单步显式公式在点 x_n 处的局部截断误差.

Euler 公式的局部截断误差为

$$-\frac{1}{2}h^2 y''(x_n)$$

定义：后退的 Euler 公式

中的积分用右矩形公式近似得

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

其中 $\tau_n = x_n - x_{n-1}$ 为步长, $\tau_n = h$.

从而有

得后退的 Euler 公式为

后退的 Euler 公式是单步隐式公式.

定义:单步隐式公式局部截断误差

一般的单步隐式公式为

其中 $\phi(x, y, h)$ 称为增量函数.

称

为单步隐式公式的局部截断误差.

后退的 Euler 公式的局部截断误差为

—

定义：梯形公式

将 $y_{n+1} = y_n + h \phi(x_n, y_n, h)$ 中积分用梯形公式近似得

—

其中 $\phi(x, y, h) = \frac{1}{h} \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t, y(t)) dt$ —

略去 $O(h^2)$ 得

—

—

所以得梯形公式

—

它是一个单步隐式公式. 由单步隐式公式局部截断误差的定义得梯形公式的局部截断误差为

—

—

定义：改进的 Euler 公式（预测校正公式）

—

称上式为改进的 Euler 公式. 它是单步显式公式. 也可将上式写为如下两种形式

1

1

—

—

其局部截断误差为

—

用两种方法求上面的局部截断误差.

方法一：由上式得

y_1 与 y_2 之间.
 方法二 将 y_1 在 x_1 点 Taylor 展开, 将 y_2 在 x_2 点 Taylor 展开

$$y_1 = y_1(x_1) + y_1'(x_1)(x - x_1) + \frac{y_1''(x_1)}{2!}(x - x_1)^2 + \dots$$

$$y_2 = y_2(x_2) + y_2'(x_2)(x - x_2) + \frac{y_2''(x_2)}{2!}(x - x_2)^2 + \dots$$
 将上面两式代入误差式并利用 $y_1' = y_2'$ 及 $y_1'' = y_2''$

其导数和 y_2' 的关系

$$y_1' = y_2' + \frac{y_2'' - y_1''}{2!}(x - x_1)^2 + \dots$$

$$y_1'' = y_2'' + \frac{y_2''' - y_1'''}{2!}(x - x_1)^2 + \dots$$

定义：整体截断误差
 设当步长为 h 时某种数值方法求得的数值解为 y_n 。
 设 y^* 为精确解，分别为精确解和数值解，则称

$$|y_n - y^*|$$

 为该数值方法的整体截断误差。如果 $|y_n - y^*| \rightarrow 0$ ，则称该方法收敛。

定义：如果一个求解公式的局部截断误差为 $O(h^{p+1})$ ，则称该公式是 p 阶的，或具有 p 阶精度。Euler 公式、后退的 Euler 公式是 1 阶的，梯形公式和改进的 Euler 公式是 2 阶的。

Runge-Kutta方法：
 对于 $y' = f(x, y)$ 中的积分，应用积分中值定理可得 $y(x) = y(x_0) + \int_{x_0}^x f(t, y(t)) dt$ ，这里的 $f(t, y(t))$ 称作区间 $[x_0, x]$ 上的平均斜率，记作 \bar{f} ，即 $\bar{f} = \frac{1}{x - x_0} \int_{x_0}^x f(t, y(t)) dt$ ，因此只要对平均斜率 \bar{f} 提供一种算法，由上式便可以得到一个微分方程的数值计算公式。如果设法在 $[x_0, x]$ 上多预报几个点的斜率值，然后将它们作加权平均以作为 \bar{f} 的近似值，则有可能构造出更高精度的计算公式。若取 n 个点，构造如下形式的求解公式：

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

$$k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1)$$

这种方法称为显式 级 Runge-Kutta 方法, 简记为 方法, 其中 及 为待定参数。
该公式的局部截断误差为
其中

将式 中的各项应用 Taylor 级数展开成 的幂级数, 得

如果所选参数 及 , 使得 而 , 则公式是 阶的。
在推导高阶 Runge-Kutta 公式时常需用到如下几个公式:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots \\ & \frac{1}{1-x^2} = 1 + x^2 + x^4 + x^6 + \dots \\ & \frac{1}{1-x^3} = 1 + x^3 + x^6 + x^9 + \dots \\ & \frac{1}{1-x^4} = 1 + x^4 + x^8 + x^{12} + \dots \\ & \frac{1}{1-x^5} = 1 + x^5 + x^{10} + x^{15} + \dots \end{aligned}$$

Th:4 级及 4 级以下的 Runge-Kutta 公式, 其可能达到的最高阶数等于 , 而 4 级以上的公式, 其可能达到的最高阶数小于 , 若用 表示 级公式所能达到的最高阶数, Butcher 于 1965 年证得了如下结果:

Th(如果一个方法的局部截断误差为 , 则整体截断误差 为):

设 为式 的解, 为式 的解。如果

存在常数 , 使得
存在 , 使得 $|y(t_n) - y_n| \leq C h^p$

其中

记 $\lambda = \max_{t \in [a, b]} |f'(t, y)|$, 则当 $\sqrt{-\lambda h} \leq 1$ 时, 有

$$\sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + 4\lambda^2}} \right)}$$

Th(相容性条件)：一个单步显式求解公式应至少是 1 阶的。由局部截断误差的表达式, 有

所以一个单步显式求解公式至少是 1 阶的, 即 $\tau_n = O(h^2)$, 其充分必要条件为

由于 λ 的任意性, 上式又等价于
称上式为相容性条件, 该条件是比较容易验证的.

定义 (单步方法的稳定性)：对于初值问题 $y' = f(x, y), y(x_0) = y_0$, 设 y_n 是由式 (1) 得到的解, y_n^* 是如下扰动问题的解:

若存在正常数 α 及 β , 使对所有的 n , 当 $|y_0 - y_0^*| \leq \alpha$ 时, 有 $|y_n - y_n^*| \leq \beta$, 则称单步显式公式是稳定的或称为零稳定的。

定义 (线性多步法)：线性 k 步方法的一般公式为 $y_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y_{n+j} + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{n+j}$, 其中 α_j, β_j 均为与 h 无关的常数,

当 $\alpha_k \neq 0$ 时为显格式, 当 $\alpha_k = 0$ 时为隐格式.

定义：称 τ_n 为 k 步公式在 x_n 处的局部截断误差。当 $\tau_n = O(h^{p+1})$ 时称多步公式是 p 阶的。

定义：如果线性 k 步方法至少是 1 阶的, 则称是相容的; 如果线性 k 步法是 p 阶的, 则称是 p 阶相容的。

基于数值积分的构造方法（Adams显式公式）：

以 x_0, x_1, \dots, x_n 为插值节点作 n 次插值多项式, 则有

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n L_k(x) f(x_k)$$

其中

作变量代换 $x = x_0 + \tau(x_n - x_0)$, 并应用积分中值定理, 得

$$I_n = \int_{x_0}^{x_n} p_n(x) dx = \int_0^1 p_n(x_0 + \tau(x_n - x_0)) (x_n - x_0) d\tau$$

其中

记

$$L_k(\tau) = \prod_{j \neq k} \frac{\tau - x_j}{x_k - x_j}$$

则有

在上式中略去 $L_0(\tau)$, 并用 τ 代替 x , 得到 n 步求解公式

其局部截断误差为

称上式为 n 步 Adams 显式公式。由上式知 n 步 Adams 显式公式是 n 阶的。

基于Taylor展开的待定系数方法：

设想要构造如下形式的线性 n 步公式:

其中 α 和 β 为待定常数。将其局部截断误差在点 x_n 处作 Taylor 展开, 得

$$\begin{aligned} & - \\ & - \\ & - \\ & - \end{aligned}$$

要使求解公式为 p 阶的, 只需

即

此时局部截断误差为

$$O(\tau^{p+1})$$

二阶一维 (x关于t) 线性偏微分方程：

$$u_{tt} = a^2 u_{xx} + f(x, t)$$

上式中的 D 为 x 平面上的某区域。在 D 内, 函数 u 严格为正, $u > 0$ 。实际问题中 t 为时间变量, x 为空间变量, 所以抛物型方程通常描述的是随时间变化的物理过程, 即所谓不定常的物理过程。通常考虑下列 3 种形式的定解问题。

(1) 初值问题。此时 D 为带状区域 $0 \leq t \leq T, -\infty < x < +\infty$ 。若给出初始条件 $u(x, 0) = \phi(x)$, 则构成初值问题 (或称 Cauchy 问题)。

(2) 半无界域的初边值问题。此时 D 为带状区域 $0 \leq t \leq T, 0 \leq x < +\infty$ 。若给出初始条件 $u(x, 0) = \phi(x)$, 及边界条件 $u(0, t) = \psi(t)$, 这里 $\phi(x)$ 且 $\psi(t)$, 在右边界 $x \rightarrow +\infty$ 处要求 u 为有界, 则称半无界域的初边值问题。

(3) 有界域的初边值问题。此时 D 为矩形区域 $0 \leq t \leq T, 0 \leq x \leq l$ 。若给出初始条件 $u(x, 0) = \phi(x)$, 及边界条件 $u(0, t) = \psi(t)$, $u(l, t) = \eta(t)$, 这里 $\phi(x)$ 且 $\psi(t), \eta(t)$, 在右边界 $x = l$ 处要求 u 为有界, 则称有界域上的初边值问题。

二阶一维线性抛物线型定解问题的有限差分法：

定解问题：

$$\begin{cases} u_t = \Delta u & (x,y) \in \Omega, t > 0 \\ u = \varphi & (x,y) \in \partial\Omega, t > 0 \\ u = \psi & (x,y) \in \Omega, t = 0 \end{cases}$$

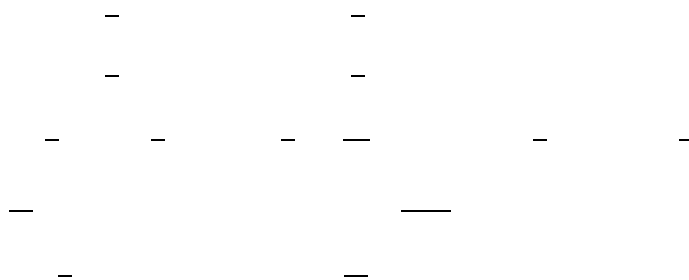
的有限差分法, 其中 τ 为正常数, φ 为已知函数, 且满足连接性条件 $\varphi|_{\partial\Omega} = \psi|_{\partial\Omega}$ 。始终假设上式有解, 且 φ 具有一定的光滑性。

网格剖分：将区域 Ω 用两簇平行直线

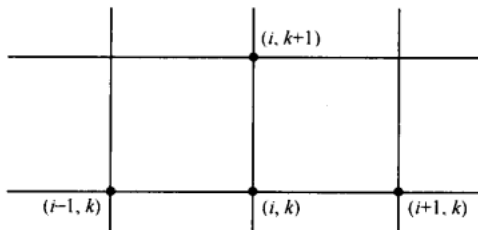
分割成矩形网络, 其中 h 和 τ 分别称为空间步长和时间步长。

网络点 (i, k) 称为节点, 其中在 $\partial\Omega$ 及 $t=0$ 上的所有节点称为边界节点 (记为 B), 其余所有属于 Ω 的节点称为内部节点 (记为 I), 在 $t=k\tau$ 上的所有节点称为第 k 层节点。此外记 $\Omega_k = \{(i, k) \in \Omega\}$ 。

简化公式工具：



古典显格式



节点 (i, k) 处考虑微分方程, 有一 τ 阶精度。对于其中的偏导数, 用不同的差商代替, 将得到不同的差分格式。

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u(i+1, k) - u(i-1, k)}{2h} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &\approx \frac{u(i-1, k) - 2u(i, k) + u(i+1, k))}{h^2} \end{aligned}$$

将上式代入方程得

$$u(i, k+1) = u(i, k) + \tau \left[\frac{u(i-1, k) - 2u(i, k) + u(i+1, k))}{h^2} + \frac{u(i, k+1) - u(i, k)}{\tau} \right]$$

再注意到初边值条件

$$u(i, 0) = \psi(i, 0) \quad u(0, k) = \varphi(0, k) \quad u(L, k) = \varphi(L, k)$$

并用 τ 代替 Δx , 得到

$$u_{i,j+1} = \frac{1}{2} (u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1})$$

为

记 $\tau = \Delta t$, 称 τ 为步长比。上式可写

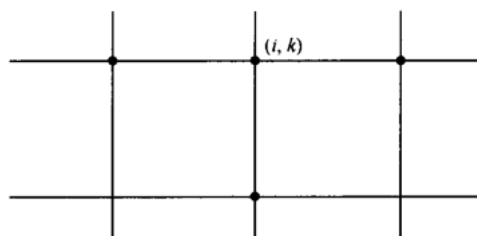
上式表明第 $(k+1)$ 层的值由第 k 层的值显式表示。

若已知第 k 层上的值 $u_{i,j}$, 则由上式可直接得到第 $(k+1)$ 层上的值 $u_{i,j+1}$ 。称差分格式为古典显格式, 并称 τ 为差分格式的截断误差。
可把古典显格式写成矩阵形式

$$U^{k+1} = G U^k$$

$$G = \frac{1}{2} (I + \tau^2 A)$$

古典隐格式



$$u_{i,j+1} = \frac{1}{4} (u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1})$$

再注意到初边值条件

略去小量项

并用 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$ 代替 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, 得到

$$u_i^{n+1} = \frac{1}{2} (u_{i-1}^n + u_{i+1}^n) + \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n)$$

有 u_i^{n+1} , 需要通过解线性方程组才能得到第 k 层上的值

若已知第 n 层上的值 u_i^n , 称为古典隐格式。写成矩阵形式,

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \vdots \\ u_N^{n+1} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} u_1^n + u_2^n \\ u_2^n + u_3^n \\ \vdots \\ u_{N-1}^n + u_N^n \end{bmatrix} + \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} \begin{bmatrix} u_1^n - 2u_2^n + u_3^n \\ u_2^n - 2u_3^n + u_4^n \\ \vdots \\ u_{N-1}^n - 2u_N^n + u_{N+1}^n \end{bmatrix}$$

Crank-Nicolson格式

古典显格式的截断误差 $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$ 和古典隐格式的截断误差 $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$ 均为 $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$ 。为 了提高精度改用时间方向的中心差商来代替偏导数

在点 $(x_i, t_{n+1/2})$ 处考虑微分方程

$$u_t = \alpha u_{xx}$$

由 $u_t \approx \frac{u_i^{n+1/2} - u_i^{n-1/2}}{\Delta t}$, 有:

$$\frac{u_i^{n+1/2} - u_i^{n-1/2}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i-1}^{n+1/2} - 2u_i^{n+1/2} + u_{i+1}^{n+1/2}}{\Delta x^2}$$

$$u_i^{n+1/2} - u_i^{n-1/2} = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i-1}^{n+1/2} - 2u_i^{n+1/2} + u_{i+1}^{n+1/2})$$

$$u_i^{n+1/2} - u_i^{n-1/2} = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i-1}^{n+1/2} - 2u_i^{n+1/2} + u_{i+1}^{n+1/2})$$

再应用—— $u_i^{n+1/2} = \frac{1}{2} (u_i^{n+1} + u_i^n)$

$$u_i^{n+1} - u_i^n = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1})$$

$$u_i^{n+1} - u_i^n = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1})$$

$$u_i^{n+1} - u_i^n = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1})$$

得

$$u_i^{n+1} - u_i^n = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1})$$

$$u_i^{n+1} - u_i^n = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1})$$

$$u_i^{n+1} - u_i^n = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1})$$

$$u_i^{n+1} - u_i^n = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1})$$

再注意到初边值条件

这里及以下记 u_i^n 在式中略去

用 $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ 代替 $\frac{\Delta t}{\Delta x}$, 得到差分格式

$$\begin{cases} u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \\ u_i^0 = \phi(x_i) \end{cases}$$

定义 (网络函数的范数) : 稳定性是考虑的计算过程中的误差传播问题 ; 收敛性考虑的是当步长趋于零时差分方程的解是否趋于微分方程问题的解.

记 U_h 为 U_h 上的网格函数. 记 U_h 为网格函数空间. 对于网格函数引进范数. 设 U_h 定义下面的范数:

$$\|u\|_h = \left(\sum_{i=1}^N |u_i|^2 \right)^{1/2}$$

设 u_i^n 是差分格式的解. 定义 u_i^n 为 U_h 上的网格函数。

定义 (网络函数的范数) : 稳定性是考虑的计算过程中的误差传播问题 ; 收敛性考虑的是当步长趋于零时差分方程的解是否趋于微分方程问题的解.

记 U_h 为 U_h 上的网格函数. 记 U_h 为网格函数空间. 对于网格函数引进范数. 设 U_h 定义下面的范数:

$$\|u\|_h = \left(\sum_{i=1}^N |u_i|^2 \right)^{1/2}$$

设 u_i^n 是差分格式的解. 定义 u_i^n 为 U_h 上的网格函数。

定义 (稳定性: 考虑的计算过程中的误差传播问题) : 设 u_i^n 是差分格式的解, \tilde{u}_i^n 是由于初始数据有误差而得到的差分格式的近似解, 记 $\epsilon_i^n = u_i^n - \tilde{u}_i^n$ 如果存在与步长 $\Delta t, \Delta x$ 无关的常数 C , 使得

或者

则称该差分格式关于范数 $\| \cdot \|_h$ 是稳定的, 否则称不稳定

Th: 当步长比 $\Delta t \leq \Delta x$ 时, 古典显格式关于 $\| \cdot \|_h$ 范数是稳定的; 当 $\Delta t > \Delta x$ 关于 $\| \cdot \|_h$ 范数不稳定.

由初始条件, 有

Figure 6

Figure 6 consists of three panels labeled A, B, and C, each showing a horizontal bar chart representing the percentage distribution of different types of vegetation cover across various land use categories.

Panel A: The y-axis lists five categories: "Forest", "Shrubland", "Grassland", "Barren", and "Water". The x-axis ranges from 0% to 100%. The bars show the following approximate percentages: Forest (~85%), Shrubland (~15%), Grassland (~10%), Barren (~5%), and Water (~5%).

Panel B: The y-axis lists five categories: "Forest", "Shrubland", "Grassland", "Barren", and "Water". The x-axis ranges from 0% to 100%. The bars show the following approximate percentages: Forest (~75%), Shrubland (~25%), Grassland (~10%), Barren (~5%), and Water (~5%).

Panel C: The y-axis lists five categories: "Forest", "Shrubland", "Grassland", "Barren", and "Water". The x-axis ranges from 0% to 100%. The bars show the following approximate percentages: Forest (~65%), Shrubland (~35%), Grassland (~10%), Barren (~5%), and Water (~5%).

由边界条件, 有

忽略 $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ 得下面的差分格式：

记 $\alpha = \frac{\Delta t}{\Delta x}$ 称为步长比, 则上

面的差分格式可以写成

Th:(1) 当步长比 Δt 时, 显式差分格式在 L_2 范数下是稳定的; 当步长比 Δt 时, 显式差分格式在 L_∞ 范数下是不稳定的;

(2) 当步长比 Δt 小时, 显式差分格式在 Δt 范数下关于空间步长和时间步长都是二阶收敛的。

隐格式

还是考虑 点的方程

利用平均公式得

其中

由初边值条件

忽略上面的 $\frac{1}{2} \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2}$ ，并用 $\frac{d\mathbf{r}}{dt}$ 代替 $\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2}$ 的下面的差分格式

Th:(1) 对任意步长比 τ , 隐式差分格式在 L^2 范数下是稳定的; (2) 对任意步长比 τ , 隐式差分格式在 L^2 范数下关于空间步长和时间步长都是二阶收敛的。

eg: 分别用显格式和隐格式, 取 $\tau = 0.1$ 计算

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} \\ u(0, x) = \sin(x) \\ u(x, 0) = 0 \end{cases}$$

前 3 层上的差分解。

eg: 对下列 1 阶双曲方程初边值问题:

$$\begin{cases} u_t + u u_x = 0 \\ u(0, x) = \sin(x) \\ u(x, 0) = 0 \end{cases}$$

将 x 作 10 等分, 将 t 作 10 等分, 并记

建立如下差分格式:

$$\begin{cases} u_{i,j+1} = u_{i,j} - \tau u_{i,j} u_{i,j} (u_{i,j+1} - u_{i,j}) \\ u_{i,0} = \sin(x_i) \\ u_{i,j} = 0 \end{cases}$$

- (1) 写出截断误差;
- (2) 证明当 $\tau \leq 1$ 时差分格式对初值是稳定的;
- (3) 分析差分格式的收敛性。

