第1章 数值分析与科学计算引论

教学目的： 通过对本章的学习，使学生了解数值分析的对象、任务、掌握数值计算中的误差基础知识.

教学重点：误差的基本概念.

教学难点：误差的传播、数值计算中误差分析的原则.

教学过程与内容：

1.1 数值分析的对象与特点

随着计算机的发展，人们对计算方法的需要就显的越来越重要，同一个问题选择的计算方法不同所得结果就完全不一样.当然人力，物力，财力等的消耗也不尽相同.《数值分析》课程的主要内容就是研究如何较好的处理数学模型问题.它是数学的一个重要分支，其内容不像纯数学那样只研究理论，而是着重研究求解的数值方法及相关的理论.这些理论包括方法的收敛性，稳定性及误差分析.

数值分析课程的特点：既有纯数学高度抽象性与严密科学性的特点，又有应用的广泛性与实际实验的高度技术性的特点，是一门与使用计算机密切结合的实用性很强的数学课程.

1.2 误差的来源及误差分析的重要性

先来考察一下用计算机解决实际问题的主要过程：

实际问题→数学模型→数值计算方法→程序设计→→上机求结果

在以上的过程中可以产生下列误差：

模型误差：由实际问题转化为数学模型时产生的误差.

观测误差：由观测产生的误差.

截断误差（方法误差）：近似解与精确解之间的误差.

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

今求e^2，则有 $e^2 = 1 + 2 + \frac{2^2}{2!} + \frac{2^3}{3!} + \cdots$ 由于不可能得到精确值，若取$n = 4$，则

$e^2 \approx 1 + 2 + \frac{2^2}{2!} + \frac{2^3}{3!} + \frac{2^4}{4!}$ 此时的截断误差为$\frac{2^5}{5!} + \frac{2^6}{6!} + \cdots$

另外，由于计算机在计算过程中并非是精确运算，它也是只对有限位数进行运算，对于超过位数的数字便自动施行四舍五入，这样在计算过程中又产生一定的误差，这种误差称为

舍入误差.

本课程主要研究截断误差和舍入误差.以下举例说明误差分析的重要性.

例 求 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} \mathrm{d}x \quad n = 0,1,\cdots,20$

解 容易求得，$I_n + 5I_{n-1} = \frac{1}{n} \quad n = 1,\cdots,20 \quad I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln\frac{6}{5}$

而 $\ln\frac{6}{5}$ 是个无理数，不可能取到精确值，今取 $I_0 \approx 0.18232155$，得到一个递推公式：

$$(A)\begin{cases} I_n = -5I_{n-1} + \frac{1}{n} & n = 1,\cdots,20 \\ I_0 = 0.18232155 \end{cases}$$

计算结果见下表：

i	I_i	i	I_i
0	0.18232155 ↓	0	0.18232155 ↑
1	0.088392216	1	0.088392216
2	0.058038918	2	0.058038919
3	0.043138742	3	0.043138734
4	0.03430208	4	0.03430633
5	0.02848958	5	0.02846835
6	0.02421875	6	0.02432491
7	0.02176339 ↓	7	0.02123260 ↑
8	0.01618305 ↓	8	0.01883699 ↑
9	0.03019588	9	0.01692617
10	-0.05097941	10	0.01536914
11	0.017324710	11	0.014071338
12	-0.003290219	12	0.012976641
13	-0.093374172	13	0.012039867
14	-0.39544229	14	0.0112229233
15	2.0438787 ↓	15	0.010520499 ↑
16	-10.156890	16	009897504
17	50.843276	17	0.009336007
18	-254.16082	18	0.008875522
19	1270.8567	19	0.0082539682
20	-6354.2338 ↓	20	0.0087301587 ↑

注：上表前两列是由公式 (A) 计算所得值，后两列是由以下的公式 (B) 计算所得值.

我们分析一下 I_n 的特性：

① $I_n > 0$ ② $I_n < I_{n-1}$；③ $I_n \xrightarrow{n\to\infty} 0$ ；④ $I_n < I_{n-1} < I_{n-2}$.

由此可知公式 (A) 计算的值是不可应用的.那么怎样计算才能使结果可靠呢？由公式 (A) 的递推公式及 $I_n < I_{n-1} < I_{n-2}$ 可知，$\frac{1}{6n} < I_{n-1} < \frac{1}{5n}$，所以 $\frac{1}{6\times 21} < I_{20} < \frac{1}{5\times 21}$，取 $I_{20} \approx \frac{1}{2}(\frac{1}{6\times 21} + \frac{1}{5\times 21})$，显然误差是比较大的.建立以下递推公式：

$$(B)\begin{cases} I_{n-1} = \dfrac{-1}{5} I_n + \dfrac{1}{5n} \\ I_{20} = 0.0087301587 \end{cases} \qquad n = 20, 19, \cdots, 2, 1 .$$

由 (B) 式重新计算 I_1 到 I_{20} 的值（上表的后两列）.可见尽管 I_{20} 的初值取的比较粗糙，但计算到 I_1 及 I_0 时还是比较精确的.以下我们来分析 (A) (B) 两式的区别.

由于计算机只能对有限位数进行计算，当取 I_0 用 (A) 式计算时，因为 I_0 带有的误差会一直传下去.具体传播过程为，设 I_n 为理论值；$\bar{I}_n$ 为实际计算值，则有

$$\left| I_n - \bar{I}_n \right| = 5\left| I_{n-1} - \bar{I}_{n-1} \right| = \cdots = 5^n \left| I_0 - \bar{I}_0 \right| \qquad (2\text{-}1)$$

尽管 误差很小，但是 5^n 却是很大的.而用 (B) 式时，有

$$\left| I_0 - \bar{I}_0 \right| = \frac{1}{5}\left| I_1 - \bar{I}_1 \right| = \cdots = \frac{1}{5^n}\left| I_n - \bar{I}_n \right| \qquad (2\text{-}2)$$

尽管 I_{20} 误差很大，但是 $\frac{1}{5^n}$ 却是很小的.由以上两式知，一个是误差在积累，一个误差在

缩小.我们称舍入误差积累的递推公式（比如 (A) ）为不稳定的，而称舍入误差缩小（至少不增）的递推公式（比如 (B) ）为稳定的计算公式.

1.3 误差的基本概念

1.3.1 误差与误差限

定义 1 设 x 为精确值，x^* 为 x 的一个近似值，称 $e^* = x^* - x$ 为近似值的**绝对误差**.（简称误差）.

由于精确值是不知道的，所以误差是不可计算的.通常只能估计，常用 $\left| x^* - x \right| = \left| e^* \right| \le \varepsilon^*$

来估计，我们称ε^*为误差限.

1.3.2 相对误差与相对误差限

定义 2 称$e_r^* = \dfrac{x^* - x}{x}$为$x^*$的**相对误差**.（$x$与$x^*$同上）

由于x是不知道的，所以通常取$e_r^* = \dfrac{x^* - x}{x^*} = \dfrac{e^*}{x^*}$作为$x^*$的相对误差.这时产生的误差可忽略不计.同样，我们把其绝对值的上界称为相对误差限.记作 $\varepsilon_r^* = \dfrac{\varepsilon^*}{\left|x^*\right|}$.

1.3.3 有效数字

当精确值x 有很多位数时，常按四舍五入的原则取其前几位数字作为其近似值.

例 $\pi = 3.1415926\cdots$ 若取$\pi^* = 3.14$,或取$\pi^* = 3.1416$ ，则它们分别具有误差为$\left|\pi - \pi^*\right| = 0.0015926\cdots < 0.005$ 及$\left|\pi - \pi^*\right| = 0.0000074\cdots < 0.00005$.

误差限分别为$\varepsilon^* \le \dfrac{1}{2}\times 10^{-2}$ 及$\varepsilon^* \le \dfrac{1}{2}\times 10^{-4}$.由此我们给出以下定义，

定义 3 若近似值x^*的误差限是某一位的半个单位，该位到x^*的左边第一位非零数字共有n位，则称x^***有n位有效数字**.

由此知，以上的 3.14 和 3.1416 作为π的近似值分别具有 3 位和 5 位有效数字.有n位有效数字的近似数x^*可以写成标准形式：

$$x^* = \pm 10^m \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n \qquad （3\text{-}1）$$

其中，a_i是 0—9 中的数（$i = 1,2,\cdots,n$），$a_1 \ne 0$.且$\left|x - x^*\right| \le \dfrac{1}{2}\times 10^{m-n}$

例如，用$x^* = 1.41421$作为$\sqrt{2}$的近似值，可以写成$x^* = 10^1 \times 0.141421$.且$\left|x - x^*\right| = \left|\sqrt{2} - 1.41421\right| = 0.0000036 \le 0.000005 = \dfrac{1}{2}\times 10^{1-6} = \dfrac{1}{2}\times 10^{-5}$,

$\therefore x^* = 1.41421$作为$\sqrt{2}$的近似值,它有 6 位有效数字.

例 以下数字都是经过四舍五入得到的数字，问它们各有几位有效数字？

$x_1^* = 0.0123$，$x_2^* = 7\times 10^4$，$x_3^* = 0.12130$

有效数字与相对误差限的关系有以下定理，

定理 1 由（3-1）表示的近似数 x^*，若 x^* 有 n 位有效数字，则其相对误差限为

$$\varepsilon_r^* \le \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} \tag{3-2}$$

反之，若 x^* 的相对误差限

$$\varepsilon_r^* \le \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)} \tag{3-3}$$

则 x^* 至少有 n 位有效数字.

定理说明，有效位数越多，相对误差限越小.

例 为使 $\sqrt{70}$ 的近似数的相对误差限小于 0.1％，问查开方表时，要取几位有效数字？

解 设查开方表时取 n 位有效数字，那么由（3-2）式并注意到 $8 \le \sqrt{70} \le 9$，所以，取 $a_1 = 8$，因此要使 $\sqrt{70}$ 的近似数的相对误差限小于 0.1％，只需取 n 满足

$$\frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} = \frac{1}{2\times 8} \times 10^{-(n-1)} < 0.1\%$$

解得 n=3.即取 $\sqrt{70} \approx 8.37$.

1.3.4 数值运算的误差估计

数值运算的误差估计一般是很复杂的.通常我们利用 Taylor 展开的方法来估计误差，假设要计算 $A = f(x_1, \cdots, x_n)$ 的值，已知 $x_1^*, \cdots, x_n^*$ 是 $x_1, \cdots, x_n$ 的近似值.此时 A 的近似值为 $A^* = f(x_1^*, \cdots, x_n^*)$，那么 A^* 作为 A 的近似值时的误差限

$$\varepsilon(A^*) = |\ e(A^*)\ | \approx \sum_{k=1}^{n} \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \right| \varepsilon(x_k^*) \tag{3-4}$$

而 A^* 的相对误差限为

$$\varepsilon_r(A^*) = \frac{\varepsilon(A^*)}{|A^*|} \approx \sum_{k=1}^{n} \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \right| \frac{\varepsilon(x_k^*)}{|A^*|} \tag{3-5}$$

例 要计算 $f = (\sqrt{2}-1)^6$，取 $\sqrt{2} \approx 1.41$.求 $\varepsilon(f)$

解 $\varepsilon(f) \approx 6(1.41-1)^5 \left|\sqrt{2} - 1.41\right| \le 6 \times 0.41^5 \times \frac{1}{2} \times 10^{-2}$

1.3.5 数值运算中误差分析的若干原则

一个工程技术问题的解决往往要经过若干次运算，若每一步都要分析误差的话那当然是最好的，但这是不可能的.为鉴别计算结果的可靠性，我们提出若干原则.

1.要使用稳定的计算公式.

2.要避免两相近数相减.

出现这种情况时，最好对公式进行处理.

（1） $x_1 \approx x_2$ 时，变换 $\lg x_1 - \lg x_2 = \lg \frac{x_1}{x_2}$

（2） $x \approx 0$ 时，变换 $\frac{1-\cos x}{\sin x} = \frac{\sin x}{1+\cos x}$

（3） x 充分大时，变换 $arctg(x+1) - arctgx = arctg\frac{1}{1+x(x+1)}$

3.防止大数“吃掉”小数

在计算机运算过程中，若两个数的数量级相差很大，那么数量级小的数往往被忽略.这就是所说的大数“吃掉”小数.

如：要计算 53480+ $\sum_{i=1}^{10000} a_i$， $a_i = 0.001$， $i = 1, \cdots, 10000$.就需要先计算 a_i 之和，然后再加上 53480.

注意简化计算步骤，减少运算次数.

绝对值较小的数不宜做分母.

第2章 插值法

教学目的:使学生掌握插值的基本类型和基本方法

教学重点:lagrange 插值、牛顿插值

教学难点: lagrange 插值、牛顿插值

教学过程与内容:

2.1 引言

插值法是广泛应用于理论研究和工程实际的重要数值方法. 众所周知，反映自然规律的数量关系的函数有三种表示法：解析法. 图象法和表格法.大量实际问题中的函数关系是用表格法给出的，如测量或通过实验而得到的函数数据表格. 从提供的部分离散的函数值去进行理论分析和设计都是极不方便甚至是不可能的,因此需要设法寻找与已知函数值相符而形式简单的插值函数.另外一种情况是,函数表达式虽已给定,但计算复杂,因此也需要根据一些函数值找出既反映原函数特征,又便于计算的简单函数去近似原函数. 求这个简单函数的方法即称为插值法. 一般的提法是

设函数 $y=f(x)$ 在区间[a,b]上有定义,且已知在点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 上的函数值 $y_0, y_1, \cdots, y_n$,若存在一个简单的函数 p(x),使

$$p(x_i)=y_i, \quad i=0,1,2,\cdots,n \tag{1-1}$$

成立,就称 p(x)为 $f(x)$ 的插值函数,点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 称为插值节点,[a,b]称为插值区间,求 p(x)的方法称为插值法.若 p(x)是次数不超过 n 的多项式,即

$$p(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots a_nx^n \tag{1-2}$$

其中 a_i 为实数,就称 p(x) 为插值多项式, 求 p(x)的方法称为多项式插值.本章就是讨论多项式插值.共需要解决以下几个问题:

1. $p(x)$的存在性; 2. $p(x)$的唯一性;

3.如何求 $p(x)$? 4. $p(x)$与 $f(x)$ 的误差如何?

2.2 Lagrange 插值

2.2.1 插值多项式的存在性和唯一性

定理 1 满足插值条件 $p(x_i)=y_i$ （$i=0,1,2,\cdots,n$）的插值多项式 $p(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots a_nx^n$ 是存在且唯一的.

证明:由条件知,p(x)的系数 a_i 满足以下方程组

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

这是一个关于 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 的 n+1 元线性方程组.并注意到其系数行列式为一个范德蒙行列式,又由于 $i\neq j$ 时 $x_i\neq x_j$.于是,方程组有唯一解.

2.2.2 线性插值与抛物插值

以上定理的证明过程为我们提供了一个求 p(x)的方法,这就是解方程组.但当 n 较大时,这是很困难的.为了得到便于使用的简单的插值多项式 p(x),我们先从特殊情况开始.即 n=1 的情况,常称为线性插值.

设已知区间[x_0,x_1]的端点处的函数值 $y_0=f(x_0)$,及 $y_1=f(x_1)$,今求一个一次插值多项式(线性函数) $L_1(x)$,使其满足:

$$L_1(x_0)=f(x_0)=y_0 \quad L_1(x_1)=f(x_1)=y_1 \tag{2-1}$$

$y=L_1(x)$ 的几何意义就是过两点 (x_0,y_0) 和 (x_1,y_1) 的一条直线.由直线方程的两点式及点斜式得到:

$$L_1(x)=\frac{x_1-x}{x_1-x_0}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1 \tag{2-2}$$

$$L_1(x)=y_0+\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}(x-x_0) \tag{2-3}$$

为了将来能推广到一般情况下,我们改写(2-2)及（2-3）成

$$L_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1 \tag{2-4}$$

由(2-4)式知，$L_1(x)$ 是两个线性函数

$$l_0(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1},\quad l_1(x)=\frac{x-x_0}{x_1-x_0} \tag{2-5}$$

的线性组合,其系数为 y_0, y_1.即

$$L_1(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1 \tag{2-6}$$

显然 $l_0(x), l_1(x)$ 也是一次多项式,且满足

$$\begin{array}{ll} l_0(x_0)=1 & l_0(x_1)=0 \\ l_1(x_0)=0 & l_1(x_1)=1 \end{array} \tag{2-7}$$

将(2-7)式写成一个式子为

$$l_i(x_j)=\begin{cases}1 & i=j\\ 0 & i\neq j\end{cases}\ .\quad i,j=0,1. \tag{2-8}$$

称 $l_0(x), l_1(x)$ 为一次插值基函数.

以下考虑 n=2 时的情况,此时称为抛物插值.设节点为 x_0, x_1, x_2,且已知函数在节点上的函数值为 y_0, y_1, y_2.今求一个二次插值多项式 $L_2(x)$,使其满足:

$$L_2(x_j)=y_j.\qquad j=0,1,2.$$

其几何意义为过三点 (x_0, y_0),(x_1, y_1) 和 (x_2, y_2) 的抛物线,我们仍采用基函数的方法,为此设

$$L_2(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1+l_2(x)y_2. \tag{2-9}$$

这里的基函数 $l_0(x), l_1(x), l_2(x)$ 为二次函数,它们满足形如(2-7)或(2-8)的条件,即满足:

$$l_i(x_j)=\begin{cases}1 & i=j\\ 0 & i\neq j\end{cases}\qquad i,j=0,1,2. \tag{2-10}$$

显然,求出 $l_0(x), l_1(x), l_2(x)$ 后,二次插值多项式 $L_2(x)$ 即可求出.下面我们来求这三个插值基函数.考虑其中一个,比如 $l_1(x)$,由(2-10)式知, $l_1(x)$ 满足 $l_1(x_0)=0$, $l_1(x_2)=0$, $l_1(x_1)=1$,即 $x_0,\dots,x_2$ 为其两个零点,又知 $l_1(x)$ 为二次函数,所以可设 $l_1(x)=A(x-x_0)(x-x_2)$

再由 $l_1(x_1)=1$ 知, $1=A(x_1-x_0)(x_1-x_2)$,所以得

$$A = \frac{1}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \tag{2-11}$$

从而得,

$$l_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \tag{2-12}$$

同理有

$$l_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \tag{2-13}$$

$$l_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \tag{2-14}$$

∴二次插值多项式为

$$L_2(x) = l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + l_2(x)y_2 = \sum_{k=0}^{2} l_k(x)y_k \tag{2-15}$$

其中 $l_k(x)$ 由(2-12),(2-13)和(2-14)所确定.

2.2.3 Lagrange 插值多项式

以上我们就 n=1,n=2 的特殊情况进行了讨论，得到了一次及二次插值多项式 $L_1(x)$ 和 $L_2(x)$.现就这种用插值基函数表示插值多项式的方法推广到具有 n+1 个节点的情况中去.

假设给定 n+1 个插值节点 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$，及节点上的函数值 $y_0, y_1, \cdots, y_n$，求一个 n 次多项式 $L_n(x)$ 满足：

$$L_n(x_j) = y_j. \qquad j = 0,1,2,\cdots,n. \tag{2-16}$$

为构造 $L_n(x)$，首先给出 n 次插值基函数的定义.

定义 1 若 n 次多项式 $l_j(x)$， $j = 0,1,2,\cdots,n$ 在 n+1 个节点 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$ 上满足

$$l_i(x_j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}. \qquad i, j = 0,1,2,\cdots,n. \tag{2-17}$$

则称这 n+1 个 n 次多项式 $l_0(x), l_1(x), \cdots, l_n(x)$ 为节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 上的 n 次插值基函数.

仿照 n=1,n=2 的情况，可得到 n 次插值基函数

$$l_k(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)} \qquad (2\text{-}18)$$

$$k=0,1,2,\cdots,n$$

显然满足（2-17），于是得到满足插值条件（2-16）的插值多项式$L_n(x)$为

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n}l_k(x)y_k \qquad (2\text{-}19)$$

此即**称为 n 次 Lagrange 插值多项式.**

为便于应用改写（2-18）及（2-19）分别为

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

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\left\{\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right\}y_k \qquad (2\text{-}20)$$

用（2-20）式编制程序就方便多了.为书写方便还可用写成

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_k)\omega'_{n+1}(x_k)}y_k$$

其中

$$\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \qquad (2\text{-}21)$$

例 已知函数$f(x)$的三个点$(0,1)$，$(-1,5)$和$(2,-1)$，写出 Lagrange 插值基函数，并求出二次插值多项式$L_2(x)$.

解 这里 n=2,显然，$x_0=-1$，$x_1=0$，$x_2=2$，$y_0=5$， $y_1=1$，$y_2=-1$，

所以$l_0(x)=\dfrac{(x-0)(x-2)}{(-1-0)(-1-2)}=\dfrac{1}{3}x(x-2)$，同理，

$l_1(x)=\dfrac{(x+1)(x-2)}{(0+1)(0-2)}=\dfrac{-1}{2}(x+1)(x-2)$， $l_2(x)=\dfrac{1}{6}x(x+1)$， 代入（2-19）式得

$L_2(x)=x^2-3x+1$.

2.2.4 插值余项

本节的最后一个问题讨论用$L_n(x)$逼近 f(x)时其误差多大？这有下列定理给出.

定理 2 设 $f^{(n)}(x)$ 在 [a,b] 上连续，$f^{(n+1)}(x)$ 在 (a,b) 内存在，插值节点为 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$，$L_n(x)$ 为满足插值条件 $L_n(x_j) = y_j$，$j = 0,1,2,\cdots,n$ 的插值多项式，则对任意 $x \in [a,b]$，插值余项为

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \qquad (2\text{-}21)$$

其中，$\xi \in (a,b)$，且与 x 有关，$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$.

证明：由于 $L_n(x_j) = y_j = f(x_j)$.

$\therefore \quad R_n(x_j) = 0$. $\qquad j = 0,1,2,\cdots,n$.

从而 $R_n(x)$ 具有下列形式

$$R_n(x) = k(x)(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n).$$

其中，$k(x)$ 是与 x 有关的待定函数.我们暂时将 x 看成一个固定点，作辅助函数：

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

则 $\varphi(t)$ 满足 $\varphi(x_j) = 0$. $\quad j = 0,1,2,\cdots,n$.并且有

$$\varphi(x) = f(x) - L_n(x) - k(x)(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n) = 0.$$

这就是说 $\varphi(t)$ 在[a,b]区间内有 n+2 个零点，根据 Rolle 定理知，$\varphi'(t)$ 在 $\varphi(t)$ 的两个零点之间至少有一个零点，所以 $\varphi'(t)$ 在[a,b]内至少有 n+1 个零点，对 $\varphi'(t)$ 再用一次 Rolle 定理知，$\varphi''(t)$ 在[a,b]内至少有 n 个零点，…，依此类推知，$\varphi^{(n+1)}(t)$ 在(a,b) 内至少有一个零点.设为 ξ，即 $\varphi^{(n+1)}(\xi) = 0$，由 $\varphi(t)$ 得

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

$$\therefore k(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}. \qquad \xi \in (a,b) \text{ 与 } x \text{ 有关.得证}$$

注释：1^0 只有当 f(x)的高阶导数 $f^{(n+1)}(x)$ 存在时才能应用此定理.

2^0 若 f(x)是小于等于 n 的多项式时，$f^{(n+1)}(x) = 0$ 此时有 $R_n(x) = 0$，即

$f(x)=L_n(x)$.

3^0 若f(x)=1,则 $y(x_k)=1$. $k=0,1,2,\cdots,n$ 且 $R_n(x)=0$， $f(x)=L_n(x)=1$，

$\therefore \sum_{k=1}^{n} l_k(x)=1$.说明 n+1 个 n 次插值基函数的和等于 1.

4^0 由于 $\xi\in(a,b)$ 一般不可能具体求出，不过这并影响我们对 $|R_n(x)|$ 的估计.因为可设

$M_{n+1}=\max\limits_{a\le x\le b}\left|f^{(n+1)}(x)\right|$.

则得 $$|R_n(x)|\le\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega_{n+1}(x)|.$$

由上式知，$|R_n(x)|$ 的大小与 M_{n+1} 以及节点有关.

5^0 由上知，$|R_n(x)|$ 的大小还与点 x 有关. x 越靠近某一节点误差越小.因此，一般地，取节点时应使要计算的点含在节点之间.

例 已知函数表

x	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
$f(x)$	1.000	1.005	1.019	1.043	1.076	1.117	1.164	1.216	1.270

今要用 5 次插值多项式 $L_5(x)$ 计算 $f(0.24)$ 的近似值，问如何选择节点才能使误差最小？

解 由于无法估计 $f^{(6)}(x)$ 的值，故应选择节点使$|\omega_{n+1}(x)|$最小，由于 0.24 在 0.2 与 0.3 之间，故 0.24 前面取三个点及后面取三个点即可.所取点为 0.0，0.1，0.2，0.3，0.4，0.5 为最好.

注：若前面或后面点的个数不够应取的点个数时，可以从另一侧来补.

2.3 均差与 Newton 插值多项式

本节仍然讨论给定 n+1 个插值节点 $a\le x_0<x_1<\cdots<x_n\le b$，及节点上的函数值 $f(x_j)$(或记为 f_j) $j=0,1,\cdots,n$.求一个 n 次插值多项式 $P_n(x)$（这里将 $L_n(x)$ 记为 $P_n(x)$，以后还将记为 $N_n(x)$），满足插值条件

$$P_n(x_j)=f(x_j).\quad j=0,1,2,\cdots,n. \tag{3-1}$$

这里设

$$P_n(x)=a_0+a_1(x-x_0)+a_2(x-x_0)(x-x_1)+\cdots+a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}).$$

其中，$a_0,a_1,\cdots,a_n$ 为待定参数，可由插值条件（3-1）来确定.

$x=x_0$时，　$P_n(x_0)=a_0=f_0$.

$x=x_1$时，　$P_n(x_1)=a_0+a_1(x_1-x_0)=f_1$.　得　$a_1=\dfrac{f_1-f_0}{x_1-x_0}$.

$x=x_2$ 时，$P_n(x_2)=a_0+a_1(x_2-x_0)+a_2(x_2-x_0)(x_2-x_1)=f_2$. 得

$$a_2=\frac{\dfrac{f_2-f_0}{x_2-x_0}-\dfrac{f_1-f_0}{x_1-x_0}}{x_2-x_1}.$$

依次类推，可得a_4，…，a_n.为了写出系数a_k的一般表达式，我们引进均差的定义.

定义 2　称 $f[x_0,x_k]=\dfrac{f(x_k)-f(x_0)}{x_k-x_0}$为函数 $f(x)$ 关于点 x_0,x_k 的一阶均差.

$f[x_0,x_1,x_k]=\dfrac{f[x_0,x_k]-f[x_0,x_1]}{x_k-x_1}$称为函数 $f(x)$ 关于点 x_0,x_1,x_k 的二阶均差.一般地，**称** $f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\dfrac{f[x_0,\cdots,x_{k-2},x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_{k-1}}$ **为函数** $f(x)$ **关于点** $x_0,x_1,\cdots,x_k$ **的 k 阶均差(或称为 k 阶差商)**.

根据以上定义知，

$$a_k=f[x_0,x_1,\cdots,x_k]\quad k=1,2,\cdots,n. \tag{3-2}$$

均差有以下基本性质，

1^0　k 阶均差可表示为函数值 $f(x_0),\cdots,f(x_k)$ 的线性组合，即

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\sum_{j=0}^{k}\frac{f(x_j)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_k)}. \tag{3-3}$$

此性质说明均差与节点的排列次序无关.

2^0　由性质 1^0 知，k 阶均差也可由下式给出，

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\frac{f[x_1,\cdots,x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_0}. \tag{3-4}$$

3^0 若 f(x)在[a,b]上存在 n 阶导数，且节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n\in[a,b]$,则 n 阶均差与导数的关系如下，

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \qquad (3\text{-}5)$$

此性质的证明见 Newton 插值多项式的余项.

计算均差可按下表进行

x_k	$f(x_k)$	一阶均差	二阶均差	三阶均差	四阶均差
x_0	$f(x_0)$				
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0,x_1]$			
x_2	$f(x_2)$	$f[x_1,x_2]$	$f[x_0,x_1,x_2]$		
x_3	$f(x_3)$	$f[x_2,x_3]$	$f[x_1,x_2,x_3]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3]$	
x_4	$f(x_4)$	$f[x_3,x_4]$	$f[x_2,x_3,x_4]$	$f[x_1,x_2,x_3,x_4]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3,x_4]$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

以下讨论 Newton 插值公式

根据均差定义，显然以上多项式的系数

$$a_k=f[x_0,x_1,\cdots,x_k]\ . \quad k=1,2,\cdots,n\ .$$

代入 $P_n(x)$ 并记为 $N_n(x)$ 得到,

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

$$\cdots+f[x_0,x_1,\cdots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \qquad (3\text{-}6)$$

（3-6）称为 Newton 插值公式.

Newton 插值公式的余项

$$\because \quad f(x)=f(x_0)+f[x,x_0](x-x_0)$$

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

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

……………………………………

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

从最后一式开始依次代入前一式则得

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

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

$$+f[x,x_0,x_1,\cdots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

$$=N_n(x)+R_n(x)$$

其中，$N_n(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)+$

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

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

$$=f[x,x_0,\cdots,x_n]\omega_{n+1}(x) \qquad \text{（3-7）}$$

（3-7）即为 Newton 插值公式的余项.

注意：由于满足插值条件的插值多项式是唯一的，所以，必有

$$L_n(x)=N_n(x)\text{，从而，}\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)=f[x,x_0,\cdots,x_n]\omega_{n+1}(x)$$

所以得，

$$\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}=f[x,x_0,\cdots,x_n] \qquad \text{（3-8）}$$

这就证明了均差的性质 3.即，均差与导数之间的关系.

例 用 Newton 插值公式求 $f(x)$ 过三个点 $(0,1)$，$(-1,5)$ 和 $(2,-1)$ 的二次插值多项式 $N_2(x)$.

解

x_i	$f(x_i)$	一阶均差	二阶均差	三阶均差
-1	5			
0	1	-4		
2	-1	-1	1	

所以，$N_2(x)=5-4(x+1)+1\cdot(x+1)(x-0)=x^2-3x+1$

2.4 差分与等距节点插值公式

以上讨论的插值公式，所指的插值节点并非要求节点是等距的.当插值节点是等距时，插值多项式更为简单.这一节就讨论此情况下的插值多项式.先介绍差分的概念.

2.4.1 差分及其性质

设函数 y=f(x)在节点 $x_k=x_0+kh$ （$k=0,1,\cdots,n$）上的函数值 $f_k=f(x_k)$ 为已知.其中 h 为常数，称为步长.

定义 3 称函数 $f(x)$ 在 $[x_k,x_{k+1}]$ 上的变化 $f_{k+1}-f_k$ 为 $f(x)$ 在 x_k 上以 h 为步长的一阶

向前差分.记作 $\Delta f_k = f_{k+1} - f_k$.

同理，称 $\nabla f_k = f_k - f_{k-1}$ 为 $f(x)$ 在 x_k 上以 h 为步长的一阶向后差分.

称 $\delta f_k = f_{k+1/2} - f_{k-1/2}$ 为 $f(x)$ 在 x_k 上以 h 为步长的一阶中心差分.

利用一阶差分可以定义二阶及二阶以上的高阶差分.

$$\Delta^2 f_k = \Delta f_{k+1} - \Delta f_k \quad . \qquad \Delta^m f_k = \Delta^{m-1} f_{k+1} - \Delta^{m-1} f_k .$$

$$\nabla^2 f_k = \nabla f_k - \nabla f_{k-1} \quad . \qquad \nabla^m f_k = \nabla^{m-1} f_k - \nabla^{m-1} f_{k-1} .$$

$$\delta^2 f_k = \delta f_{k+1/2} - \delta f_{k-1/2} . \qquad \delta^m f_k = \delta^{m-1} f_{k+1/2} - \delta^{m-1} f_{k-1/2} .$$

除去以上这些差分算子外，为方便应用我们再引入另外两个算子，分别称为不变算子和移位算子.即

$If_k = f_k$，I 称为不变算子；$Ef_k = f_{k+1}$，E 称为移位算子

这样以来，

$$\Delta f_k = f_{k+1} - f_k = Ef_k - If_k = (E - I) f_k \quad \therefore \Delta = E - I \tag{4-1}$$

$$\nabla f_k = f_k - f_{k-1} = If_k - E^{-1} f_k = (I - E^{-1}) f_k \quad \therefore \nabla = I - E^{-1} \tag{4-2}$$

同理，由 $\delta f_k = f_{k+1/2} - f_{k-1/2}$ 得

$$\delta = E^{1/2} - E^{-1/2} \tag{4-3}$$

差分的基本性质

性质 1 各阶差分均可用函数值来表示.例如:

$$\Delta^n f_k = \sum_{j=0}^{n} (-1)^j \binom{n}{j} f_{n+k-j} , \qquad \nabla^n f_k = \sum_{j=0}^{n} (-1)^{n-j} \binom{n}{j} f_{k+j-n} .$$

其中，$\binom{n}{j} = \dfrac{n(n-1)\cdots(n-j+1)}{j!}$.

性质 2 函数值可用各阶差分来表示.例:

$$f_{n+k} = E^n f_k = (I + \Delta)^n f_k = \sum_{j=0}^{n} \binom{n}{j} I^{n-j} \Delta^j f_k = \sum_{j=0}^{n} \binom{n}{j} \Delta^j f_k \quad .$$

性质 3 均差与差分的关系:

$$f[x_k, x_{k+1}, \cdots, x_{k+m}] = \frac{1}{m!} \frac{1}{h^m} \Delta^m f_k \qquad k = 1,2,\cdots,n \tag{4-4}$$

$$f[x_k, x_{k-1}, \cdots, x_{k-m}] = \frac{1}{m!} \frac{1}{h^m} \nabla^m f_k \qquad k = 1,2,\cdots,n \tag{4-5}$$

性质 4 差分与导数的关系:

$$\Delta^n f_k = h^n f^{(n)}(\xi)\ , \qquad \xi \in (x_k, x_{k+1}). \tag{4-6}$$

这一关系由均差与导数的关系及差分与均差的关系可得.

可以通过列差分表的方法计算差分.以下是向前差分表.

$f(x_k)$	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4
f_0	Δf_0	$\Delta^2 f_0$	$\Delta^3 f_0$	$\Delta^4 f_0$
f_1	Δf_1	$\Delta^2 f_1$	$\Delta^3 f_1$	$\vdots$
f_2	Δf_2	$\Delta^2 f_2$	$\vdots$	
f_3	Δf_3	$\vdots$		
f_4	$\vdots$			
$\vdots$				

2.4.2 等距节点插值公式

今考虑 Newton 插值公式（3-6）

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

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

由于节点 $x_k = x_0 + kh$，$k = 0,1,\cdots,n$ 为等距节点，假设要计算 x_0 点附近某点的值，令 $x = x_0 + th$，显然有 $0 < t < 1$ 则得

$$w_{k+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_k) = t(t-1)\cdots(t-k)h^{k+1}$$

由均差与差分的关系（4-4），立得所求等距节点插值公式

$$N_n(x_0+th) = f_0 + t\Delta f_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f_0 + \cdots + \frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f_0 \tag{4-7}$$

称为 Newton 前插公式.由 Lagrange 插值余项得（4-7）式的余项为

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}t(t-1)\cdots(t-n)h^{n+1}, \qquad \xi \in (x_0, x_n).$$

反之，若要求 x_n 附近某点的值，先将 Newton 插值多项式按 $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1, x_0$ 次序改写为

$$N_n(x) = f(x_n) + f[x_n,x_{n-1}](x-x_n) + f[x_n,x_{n-1},x_{n-2}](x-x_n)(x-x_{n-1})$$

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

令 $x = x_n + th$，显然有 $-1 < t < 0$ ，由均差与差分的关系（4-5），得

$$N_n(x_n+th)=f_n+t\nabla f_n+\frac{t(t+1)}{2!}\nabla^2 f_n+\cdots+\frac{t(t+1)\cdots(t+n-1)}{n!}\nabla^n f_0 \qquad (4\text{-}8)$$

称为 Newton 后插公式.（4-8）式的余项为

$$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}t(t+1)\cdots(t+n)h^{n+1}, \qquad \xi\in(x_0,x_n).$$

若所求的点 x 既不在 x_0 附近又不在 x_n 附近，而是在某一点 x_k 附近，那么只需根据具体的点，取 x_k 或是 x_0 或是 x_n，再选择（4-7）或（4-8）式即可计算.

3.4 曲线拟合的最小二乘法

3.4.1 一般最小二乘问题

设给定如下数据

x_i	x_0	x_1	x_2	……	x_m
y_i	y_0	y_1	y_2	……	y_m
w_i	w_0	w_1	w_2	……	w_m

其中，w_i 表示权，它可以表示此点的重要程度，也可以表示次点的重复次数.

今要求建立 x,y 之间的函数关系，这当然可以用插值法来实现.但由于这些数据往往是由实验得到的，当然会带有误差，而插值法要求过这些点，这就会将误差带入函数关系中；另外，这样的数据往往较多，就会使所求的插值多项式的次数较高，次数越高越会影响逼近效果.

因此，今要求所求函数关系 $y=F(x)$ 不过点 (x_i,y_i)，只要求在给定点 x_i 上的误差 $\delta_i=F(x_i)-y_i$ 按某种度量标准最小.若记 $\delta=(\delta_0,\delta_1,\cdots,\delta_m)^T$，常用 $\|\delta\|_2=\sqrt{\sum_{i=0}^{m}\delta_i^{\ 2}}$（称为2-范数）来度量误差的大小.故常称为最小二乘逼近.

问题的一般提法是：对给定的一组数据 (x_i,y_i)（$i=0,1,2,\cdots,m$）及权系数 w_i，在函数类 $\varphi=\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n)$ 中找一个函数 $y=S^*(x)=a_0^*\varphi_0+a_1^*\varphi_1+\cdots+a_n^*\varphi_n$，使误差平方

$$\|\delta\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}\delta_i^2=\sum_{i=0}^{m}w_i[S^*(x_i)-y_i]^2=\min_{S(x)\in\varphi}\sum_{i=0}^{m}w_i[S(x_i)-y_i]^2 \qquad (4\text{-}1)$$

问题等价于求 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 使

$$\|\delta\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}\delta_i^2=\min_{S(x)\in\varphi}\sum_{i=0}^{m}w_i[\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)-y_i]^2$$ 若令

$$I(a_0,a_1,\cdots,a_n)=\sum_{i=0}^{m}w_i[\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)-y_i]^2\,. \qquad (4\text{-}2)$$

即相当于求多元函数 $I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$ 的极小值问题.为此令

$$\frac{\partial I}{\partial a_k}=2\sum_{i=0}^{m}w_i\ [\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)-f(x_i)]\varphi_k(x_i)=0,\qquad k=0,1,\cdots,n\,. \qquad (4\text{-}3)$$

其中， $f(x_i)=y_i$ ，$i=0,1,\cdots,m$.

改写（4-3）式得

$$\sum_{i=0}^{m} w_i \sum_{j=0}^{n}[a_j\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)-f(x_i)\varphi_k(x_i)]=0\,.$$

即，
$$\sum_{i=0}^{m}\ \sum_{j=0}^{n}[w_i a_j\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)-w_i f(x_i)\varphi_k(x_i)]=0\,,$$

$$\sum_{j=0}^{n}\{[\sum_{i=0}^{m} w_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)]a_j-\sum_{i=0}^{m}\ w_i f(x_i)\varphi_k(x_i)\}=0\quad. \tag{4-4}$$

令
$$(\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m} w_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)$$

$$(f,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m} w_i f(x_i)\varphi_k(x_i)$$

则（4-4）式变为

$$\sum_{j=0}^{n}(\varphi_j,\varphi_k)a_j=(f,\varphi_k)\,,k=0,1,\cdots,n\,. \tag{4-5}$$

式（4-5）称为法方程.

由于 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 线性无关，所以（4-5）的系数行列式

$$\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n)\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{vmatrix}\neq 0\,,$$

从而保证了方程组有唯一解.

应注意的是，若 $\varphi_k(x)=x^k$，（$k=0,1,\cdots,n$），即用多项式作最小二乘法时，n 不宜太大，否则方程组往往是病态的.

例 观测物体的直线运动，得到以下数据

时间 t (sec.)	0	0.9	1.9	3.0	3.9	5.0
距离 S (m)	0	10	30	50	80	110
w_i	1	1	1	1	1	1

试求最小二乘曲线拟合.

解 作一草图可知，$S(t)$ 近似一个线性函数，为此选线性函数做曲线拟合.设

$S(t)=a_0+a_1 t$

这里　m=5,n=1, $\varphi_0(t)=1,\quad \varphi_1(t)=t,$ 故

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{5} w_i\varphi_0(t_i)\varphi_0(t_i)=6,$$

$$(\varphi_0,\varphi_1)=(\varphi_1,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{5} w_i\varphi_0(t_i)\varphi_1(t_i)=\sum_{i=0}^{5} w_i t_i=14.7$$

同理，$(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_i t_i^2=53.63$，$(\varphi_0,f)=\sum w_i y_i=280$，$(\varphi_1,f)=\sum w_i t_i y_i=1078$

得线性方程组

$$\begin{pmatrix} 6 & 14.7 \\ 14.7 & 53.63 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 28. \\ 1078 \end{pmatrix}.$$

解之，$a_0=-7.8550478$，$a_1=22.25376$

$$\therefore S(t)=22.25376t-7.8550478$$

例　设有一组实验数据如下表的第 2，3 列所示.试从这组数据出发，建立变量 x 与 y 之间的经验公式.

w_i	x_i	y_i	$Y_i=\lg y_i$	x_i^2	x_iY_i
1	1	15.3	1.1847	1	1.1847
1	2	20.5	1.3118	4	2.6236
1	3	27.4	1.4378	9	4.3134
1	4	36.6	1.5635	16	6.2540
1	5	49.1	1.6911	25	8.4555
1	6	65.6	1.8169	36	10.9014
1	7	87.8	1.9435	49	13.6045
1	8	117.6	2.0704	64	16.5632
$\sum_{i=0}^{7}$	36	419.9	13.0197	204	63.9003

解　画一草图可知，曲线接近一指数曲线，故取指数函数 $y=ae^{bx}$（a,b 为待定常数）作为拟合函数.然而，这并非是一个线性函数.因此需要先将 $y=ae^{bx}$ 线性化，对 $y=ae^{bx}$ 两边取以 10 为底的对数得 $\lg y=\lg a+bx\lg e$，令 $Y=\lg y$，$A_0=\lg a$，$A_1=b\lg e$，则问题变为线性函数问题　　$Y=A_0+A_1x$，相应的 $Y_i=\lg y_i$　　（$i=0,1,\cdots,7$）

这里 m=7,n=1, $\varphi_0(x)=1,\ \varphi_1(x)=x,$　　同上例，

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{7}w_i\varphi_0(x_i)\varphi_0(x_i)=8,$$

$$(\varphi_0,\varphi_1)=(\varphi_1,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{5}w_i\varphi_0(x_i)\varphi_1(x_i)=\sum_{i=0}^{5}w_ix_i=36.$$

同理，

$$(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{7}w_ix_i^2=204,\quad (\varphi_0,f)=\sum w_iY_i=13.0197,$$

$$(\varphi_1,f)=\sum w_ix_iY_i=63.9003.$$

得线性方程组

$$\begin{pmatrix}8 & 36\\ 36 & 204\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A_0\\ A_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}13.0197\\ 63.9003\end{pmatrix}$$

解之得

$$A_0=1.0583=\lg a,\quad A_1=0.1265=b\lg e\ .$$

所以得

$a=11.41$，$b=0.2913$.

最后得所求经验公式

$$y=11.44e^{0.2913x}$$

由此例可见，对于非线性函数可以先通过变换将其化为线性函数后再作曲线拟合.一般地，形如 $y=ae^{bx}$，$\frac{1}{y}=a+\frac{b}{x}$，$y=ae^{\frac{b}{x}}$，$y=a+b\ln x$，$y=ax^b$，$y=\frac{1}{a+be^{-x}}$，$y=a+bx^n$ 的函数均可以化为线性函数来做.

3.4.2　用正交函数作最小二乘拟合

上面已提到当用高次（大于等于 7 时）多项式作最小二乘拟合时，往往会使得法方程是病态方程组，这会使得方程组的解有较大的误差.但如果 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 是关于点 x_i，带权 $w_i=w(x_i)$（$i=0,1,2,\cdots,m$）正交时，即

$$(\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}w_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)=\begin{cases}0 & j\neq k\\ A_k>0 & j=k\end{cases}.$$

时，法方程（4-5）的解

$$a_k{}^*=\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}\ .\ k=0,1,2,\cdots,n.$$

所求解

$$S^*(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}\varphi_k(x). \qquad (4\text{-}6)$$

即为所求.此时的平方误差

$$\|\delta\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}\delta_i^2=\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}A_k(a_k^*)^2$$

现在根据给定节点 $x_0,x_1,\cdots,x_m$ 及权函数 $w(x)>0$，构造出带权正交的多项式 $\{p_n(x)\}$.注意这里 $n\le m$，用递推公式表示 $p_k(x)$，即

$$\begin{cases}p_0(x)=1\\ p_1(x)=(x-a_1)p_0(x)\\ p_{k+1}(x)=(x-a_{k+1})p_k(x)-b_kp_{k-1}(x)\end{cases}，(k=1,2,\cdots,n-1). \qquad (4\text{-}7)$$

这里 $p_k(x)$ 是首项系数为 1 的 k 次多项式.根据 $p_k(x)$ 的正交性，得系数 a_k,b_k 如下计算

$$\begin{cases}a_{k+1}=\dfrac{\sum\limits_{i=0}^{m}w(x_i)x_ip_k^2(x_i)}{\sum\limits_{i=0}^{m}w(x_i)p_k^2(x_i)}=\dfrac{(xp_k(x),p_k(x))}{(p_k(x),p_k(x))}=\dfrac{(xp_k,p_k)}{(p_k,p_k)}\\ b_k=\dfrac{\sum\limits_{i=0}^{m}w(x_i)p_k^2(x_i)}{\sum\limits_{i=0}^{m}w(x_i)p_{k-1}^2(x_i)}=\dfrac{(p_k,p_k)}{(p_{k-1},p_{k-1})}\end{cases}，(k=0,1,2,\cdots,n-1). \qquad (4\text{-}8)$$

利用归纳法可以证明这样构造的$\{p_k(x)\}$是正交的.

例 已知一组实验数据如下

x_i	-2	-1	0	1	2
y_i	-1	-1	0	1	1

并设权函数 $w(x)\equiv 1$，求函数 $y=f(x)$ 的 3 次拟合曲线.

解 由权函数 $w(x)\equiv 1$，$p_0(x)=1$，由公式(4-7)(4-8)得 $a_1=\dfrac{\sum\limits_{i=0}^{4}x_ip_0^2(x_i)}{\sum\limits_{i=0}^{4}p_0^2(x_i)}=0$，

∴所以 $p_1(x)=x$

$$a_2=\frac{\sum_{i=0}^{4}x_i p_1^2(x_i)}{\sum_{i=0}^{4}p_1^2(x_i)}=0,\quad b_1=\frac{\sum_{i=0}^{4}p_1^2(x_i)}{\sum_{i=0}^{4}p_0^2(x_i)}=\frac{10}{5}=2,$$

$$p_2(x)=(x-a_2)p_1(x)-b_1p_0(x)=x^2-2.$$

$$a_3=\frac{\sum_{i=0}^{4}x_i p_2^2(x_i)}{\sum_{i=0}^{4}p_2^2(x_i)}=0,\quad b_2=\frac{\sum_{i=0}^{4}p_2^2(x_i)}{\sum_{i=0}^{4}p_1^2(x_i)}=\frac{7}{5},$$

$$\therefore\ p_3(x)=(x-a_3)p_2(x)-b_2p_1(x)=x^3-\frac{17}{5}x.$$

由 $a_k{}^*=\dfrac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)},k=0,1,2,\cdots,n$.得

$$a_0^*=\frac{(f,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=\frac{\sum_{i=0}^{4}y_i}{\sum_{i=0}^{4}1^2}=0\ a_1^*=\frac{(f,\varphi_1)}{(\varphi_1,\varphi_1)}=\frac{\sum_{i=0}^{4}y_ix_i}{\sum_{i=0}^{4}x_i{}^2}=\frac{3}{5},$$

$$a_2^*=\frac{(f,\varphi_2)}{(\varphi_2,\varphi_2)}=\frac{\sum_{i=0}^{4}y_i(x_i^2-2)}{\sum_{i=0}^{4}(x_i{}^2-2)^2}=0.$$

同理得， $a_3^*=-\dfrac{1}{6}$，故得所求 3 次拟合曲线为

$$S^*(x)=\frac{1}{6}(7x-x^3).$$

第4章 数值积分

教学目的： 使学生掌握数值积分的常用公式，以及加速收敛技巧和 Romberg 求积以及不同的误差估计方法.

教学重点： 基本求积公式

教学难点： 误差估计

教学过程与内容：

4.1 引言

4.1.1 数值积分的基本思想

积分是实际问题中经常遇到的问题.由 Newton-Leibniz 公式

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$$

知，若 f(x)的原函数 F(x)能求出，那么积分是容易求出的.然而有相当一些函数的原函数是不能用初等函数来表示的.如，$\sqrt{1+x^3}$，$\dfrac{\sin(x)}{x}$，e^{-x^2} 等就属于这一类.有时甚至 F(x)能求出，但计算 F(a)和 F(b)时也可能得不到精确值.因此，数值积分就自然成为我们研究的课题.由积分中值定理知，对于积分 $\int_a^b f(x)dx$，总存在一点 $\xi \in [a,b]$ 使得

$$\int_a^b f(x)dx = f(\xi)(b-a). \qquad （1-1）$$

成立.（1-1）式的几何意义是很明显的.但是（1-1）中的 ξ 是不容易求出的，为此只能取近似值.如

左（下）矩形公式：$\int_a^b f(x)dx \approx f(a)(b-a)$，　取 $\xi \approx a$.

右（上）矩形公式：$\int_a^b f(x)dx \approx f(b)(b-a)$，　取 $\xi \approx b$.

中矩形公式：　$\int_a^b f(x)dx \approx f(\dfrac{a+b}{2})(b-a)$，　取 $\xi \approx \dfrac{b+a}{2}$.

以上都是对 ξ 取的近似值，如果取 $f(\xi)$ 的近似值当然也可以得到一些近似公式.比如，取

$f(\xi) \approx \dfrac{f(b)+f(a)}{2}$ 则得到

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]. \qquad (1\text{-}2)$$

（1-2）式称为梯形公式.其几何意义是，若 $f(x)\ge 0$，用梯形面积近似曲边梯形的面积.以后将证明，梯形公式比以上的矩形公式要好.矩形公式都是用了一个点上的函数值代替 $f(\xi)$，而梯形公式是用了 a, b 两个点上函数值的算术平均代替 $f(\xi)$.可以想象，多利用几个点上的函数值的算术（加权）平均来代替 $f(\xi)$ 可能会更好.

一般地，在积分区间[a,b]取节点 $a\le x_0<x_1<\cdots<x_n\le b$，然后用 $f(x_k)$ $(k=0,1,\cdots,n)$ 的加权平均作为 $f(\xi)$ 的近似值，则构造出以下公式

$$I=\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k). \qquad (1\text{-}3)$$

称为机械求积公式.其中，x_k（$k=0,1,\cdots,n$）为求积节点，A_k 为求积系数（也称伴随节点的权）.这样就避开了求原函数的问题了.

4.1.2　代数精度的概念

上面提到的求积公式都是近似的，那么它的近似程度如何？下面给出衡量近似程度“好坏”的一个量的概念.

定义　若某个求积公式对于次数 $\le m$ 的多项式均能准确成立，而对于 m+1 次多项式不一定准确成立，则称该求积公式具有 m 次代数精度.

显然，上面的梯形公式与中矩形公式对于一次多项式（即线性函数）能准确成立，而对于二次多项式不能准确成立.因此它们都具有一次代数精度.

一般地，要使机械求积公式有 m 次代数精度，只要它对于 $1,x,x^2,\cdots,x^m$ 都能准确成立而对于 x^{m+1} 不一定能准确成立即可.

插值型求积公式

由插值法知道，对于给定的函数 $f(x)$，我们可以取插值节点 $a\le x_0<x_1<\cdots<x_n\le b$ 作 $f(x)$ 的插值多项式，

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k).$$

今用（1-4）作为 $f(x)$ 的近似.把对 $L_n(x)$ 的积分作为对 $f(x)$ 积分的一种近似，即

$$I=\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b L_n(x)dx=\int_a^b \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)dx \;=\sum_{k=0}^{n}\left[\int_a^b l_k(x)dx\right] f(x_k).$$

令
$$I_n=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k). \qquad (1\text{-}4)$$

其中，
$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx，\quad k=0,1,\cdots,n\ . \qquad (1\text{-}5)$$

由（1-5）确定求积系数的求积公式（1-4）称为插值型求积公式.它的误差显然为

$$R(f)=I-I_n=\int_a^b [f(x)-L_n(x)]dx=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x)dx \qquad (1\text{-}6)$$

其中，ξ 与 x 有关.可见，若 $f(x)$ 是次数小于等于 n 的多项式时，$R(f)=I-I_n$=0.说明插值型求积公式至少具有 n 次代数精度.

反之，若已知某一求积公式 $I_n=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 至少具有 n 次代数精度，则它对 n 次插值基函数 $l_k(x)$ 应准确成立.从而有

$$\int_a^b l_k(x)dx \overset{\text{精确}}{=} \sum_{j=0}^{n} A_j l_k(x_j)=A_k.$$

由上知，此求积公式是插值型求积公式.由此得

定理 1 求积公式 $I_n=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 至少具有 n 次代数精度的充分必要条件是此公式是插值型的.

4.2 Newton-Cotes 求积公式

4.2.1 Cotes 系数

以下研究当求积节点 $x_k\ (k=0,1,\cdots,n)$ 在等距条件下，求积系数 $A_k\ (k=0,1,\cdots,n)$ 的求法.

将区间[a,b]分成 n 等份，此时节点 $x_k=a+kh$，$(k=0,1,\cdots,n)$.其中，$h=\dfrac{b-a}{n}$ 称为步长.

那么有

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx \;=\int_a^b \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}dx.$$

令 $x\ =a+th$ 作变换，得

$$A_k = h\int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)}{k!(-1)^{n-k}(n-k)!}dt = (b-a)\frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(t-j)dt$$

记 $$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(t-j)dt，\ (k=0,1,\cdots,n). \qquad （2-1）$$

称为 Cotes 系数.

$$\therefore \quad A_k = (b-a)C_k^{(n)}\ . \qquad （2-2）$$

此时插值型求积公式变为

$$I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k). \qquad （2-3）$$

称为 Newton-Cotes 求积公式.

特别地，n=1 时，两个求积系数分别为： $C_0^{(1)} = \frac{1}{2}$， $C_1^{(1)} = \frac{1}{2}$.

得求积公式为：

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

此即为梯形公式.
n=2 时，三个求积系数分别为

$C_0^{(2)} = \frac{1}{6}$， $C_1^{(2)} = \frac{4}{6}$， $C_2^{(2)} = \frac{1}{6}$.

得求积公式为：

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

此公式称为 Simpson 公式.
　　n=4 时称为 Cotes 求积公式.
真正建立求积公式时，不需要计算 Cotes 系数，只需查表即可.见教材第四章表 4-1.

由表 4-1 知：（1）对每一个 n 总有 n+1 个 Cotes 系数之和等于 1.即有，$\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = 1$.那么这一结论是否真的成立？事实上，这一结论的确是成立的.因为 Newton-Cotes 求积公式是插值型的，它至少有 n 次代数精度.当 $f(x)$=1 时，求积公式应准确成立.将 $f(x)$=1 代入公式即可证明这一结论.
（2）当 $n \geq 8$ 时，Cotes 系数有正有负，这会使得计算过程不稳定.一般我们不用高阶 Newton-Cotes 求积公式.

4.2.2 偶数阶求积公式的代数精度

由于 newton-Cotes 求积公式是插值型求积公式，那么它至少
有 n 次代数精度.然而，当 n 是偶数时有以下结论.

定理 2 当 n 为偶数时，Newton-Cotes 求积公式至少有 n+1 次代数精度.

证明 根据定义，只需证明当 n 是偶数时求积公式对 $f(x)=x^{n+1}$ 能准确成立即可，即证明此时的误差为零.由于 $f^{(n+1)}(x)=(n+)!$，所以有

$$R(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}(x)dx=\int_a^b \prod_{j=0}^{n}(x-x_j)dx$$

$$\overset{x=a+th}{=} h^{n+2}\int_0^n \prod_{j=0}^{n}(t-j)dt \overset{t=u+n/2}{=} h^{n+2}\int_{-n/2}^{n/2}\prod_{j=0}^{n}(u+\frac{n}{2}-j)du$$

$$=h^{n+2}\int_{-n/2}^{n/2}\prod_{j=-n/2}^{n/2}(u-j)du\,.$$

由于被积函数是奇函数，所以 $R(f)=0$.

4.2.3 几种低阶求积公式的余项

一般插值型求积公式的误差余项由

$$R(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}(x)dx\,. \qquad (2\text{-}5)$$

给出.但若当插值节点等距时，有以下余项定理.

定理 3 设插值节点距离为 $h=\dfrac{b-a}{n}$， $x_k=a+kh$，$(k=0,1,\cdots,n)$，则对于

$R(f)=I-I_n=\int_a^b [f(x)-L_n(x)]dx$ 有

(1).若 n 为偶数， $f\in C^{n+2}[a,b]$，则存在 $\xi\in(a,b)$，有

$$R(f)=\frac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)dt\,. \qquad (2\text{-}6)$$

(2).若 n 为奇数， $f\in C^{n+1}[a,b]$，则存在 $\xi\in(a,b)$，有

$$R(f)=\frac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_0^n t\ (t-1)\cdots(t-n)dt\,. \qquad (2\text{-}7)$$

对于(1)，定理的证明需要用到 Hermite 插值多项式.对于（2），要用高等数学中的积分广义（第二）中值定理.在此略.

由（2-7）知 n=1 时，

$$R_T(f)=\frac{(b-a)^3 f''(\xi)}{2}\int_0^1 t(t-1)dt=\frac{-f''(\xi)}{12}(b-a)^3. \tag{2-8}$$

此为梯形公式的误差余项.

由（2-6）知 n=2 时，$h=\dfrac{b-a}{2}$

$$R_S(f)=\frac{(b-a)^5 f^{(4)}(\xi)}{2^5 4!}\int_0^2 t^2(t-1)(t-2)dt=\frac{-b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi). \tag{2-9}$$

同理可求得 n=4（Cotes 求积公式）时的误差余项为

$$R_C(f)=\frac{-2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^4 f^{(6)}(\xi). \tag{2-10}$$

4.3 复化求积法

由 Cotes 系数表知，当$n\geq 8$时，Cotes 系数有正有负，这会使得计算过程不稳定.一般我们不用高阶 Newton-Cotes 求积公式.但 n 很小时，精度又往往较差.不过根据以上定理 3 知，误差余项与步长$h=\dfrac{b-a}{n}$有关，如果 n 固定，则与积分区间有关.为此，我们将[a,b]上的积分划分为有限个小区间$[x_k,x_{k+1}]$上的积分之和.这就是所说的复化求积法.

设将[a,b]划分为 n 等份，步长$h=\dfrac{b-a}{n}$，节点为$x_k=a+kh$，$(k=0,1,\cdots,n)$.在每个小区间$[x_k,x_{k+1}]$上用 Newton-Cotes 求积公式，然后求和，则得复化求积公式.小区间上的积分用不同的公式则得不同的复化求积公式.

复化梯形公式：（小区间上积分用梯形公式）

$$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx\approx\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}\left[f(x_k)+f(x_{k+1})\right]$$

$$=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right]\overset{\text{记为}}{=}T_n\ . \tag{3-1}$$

其误差余项为

$$I-T_n=\sum_{k=0}^{n-1}\left[\frac{-h^3}{12}f''(\xi_k)\right]=-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)\ . \tag{3-2}$$

$\eta\in(a,b)$，上式的成立只需 $f''(x)$ 在[a,b]上连续即可.

复化 Simpson 公式：（小区间上积分用 Simpson 公式）

$$S_n=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}\left[f(x_k)+4f(x_{k+1/2})+f(x_{k+1})\right]$$

$$=\frac{h}{6}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+1/2})+f(b)\right].$$

这里的 $x_{k+1/2}=x_k+\frac{h}{2}$ 为区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 的中点.

同理可得复化 Cotes 求积公式 C_n.

不难得到，若 $f^{(4)}(x)$， $f^{(6)}(x)$ 在[a,b]上连续，则有

$$I-S_n=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta),\qquad \eta\in(a,b).\tag{3-3}$$

$$I-C_n=-\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta),\ \eta\in(a,b).\tag{3-4}$$

两个误差余项公式.

定理 4 若 $f(x)$在[a,b]上可积，则当分点无限增多时，即当 n→∞且 h→0 时，复化梯形公式 T_n 和复化 Simpson 公式 S_n 及复化 Cotes 公式 C_n 均收敛到积分 $I=\int_a^b f(x)dx$.

证明：将复化梯形公式改写成

$$T_n=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}\left[f(x_k)+f(x_{k+1})\right]=\frac{1}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_k)h+\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}f(x_k)h.$$

因为 $f(x)$ 在[a,b]上可积，所以

$$\lim_{n\to\infty}T_n=\frac{1}{2}\lim_{n\to\infty}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_k)h+\frac{1}{2}\lim_{n\to\infty}\sum_{k=1}^{n}f(x_k)h=\frac{1}{2}\int_a^b f(x)dx+\frac{1}{2}\int_a^b f(x)dx=\int_a^b f(x)dx.$$

关于复化 Simpson 公式 S_n 及复化 Cotes 公式 C_n 的收敛性同样可证.

注意到,由(2-12)知, $\frac{I-T_n}{h^2}=-\frac{1}{12}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\xi_k)h$

所以得， $\lim_{h\to 0}\frac{I-T_n}{h^2}=-\frac{1}{12}\lim_{h\to 0}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\xi_k)h=-\frac{1}{12}\int_a^b f''(x)dx=-\frac{1}{12}\left[f'(b)-f'(a)\right].$

同理可得, $\frac{I-S_n}{h^4}\xrightarrow{h\to 0}\frac{-1}{180\times 2^4}\ \left[f'''(b)-f'''(a)\right].$

$$\frac{I-C_n}{h^6}\xrightarrow{h\to 0}\frac{-2}{945\times 4^6}\left[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right].$$

定义 若某一种求积公式I_n当$h\to 0$时,有

$$\frac{I-I_n}{h^p}\xrightarrow{h\to 0}c,\qquad (c\neq 0).$$

则称I_n是 p 阶收敛的.

显然, 复化梯形公式T_n,复化 Simpson 公式S_n及复化 Cotes 公式C_n分别为 2 阶,4 阶及 6 阶收敛的.

从而当 h 很小时,它们分别有以下渐近式,

$$I-T_n\approx -\frac{h^2}{12}\left[f'(b)-f'(a)\right]. \tag{3-5}$$

$$I-S_n\approx \frac{-1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4\left[f'''(b)-f'''(a)\right]. \tag{3-6}$$

$$I-C_n\approx \frac{-2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6\left[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right]. \tag{3-7}$$

例 用复化 Simpson 公式S_n计算积分$\int_0^\pi \sin(x)dx$,要使误差不超过2×10^{-5},问应 n 取多少?

解 $\left|R_s(f)\right|=\left|-\frac{(b-a)h^4}{180\times 2^4}f^{(4)}(\eta)\right|\le\frac{\pi}{180\times 2^4}\frac{\pi^4}{n^4}\max_{0\le x\le\pi}\left|\sin(x)\right|\le\frac{\pi^5}{2880}\frac{1}{n^4}\le 2\times 10^{-5}.$

$\therefore n^4\ge\frac{\pi^5}{5760}\times 10^5.$ 解之得,$n\ge 9$.即将区间至少分成 9 等份.

4.4 Romberg(龙贝格)算法

4.4.1 梯形公式的递推化

由上知，复化求积法可以提高精度.步长 h 越小精度越高.但在实际计算以前，一般只给出误差限，这给选择步长带来不便.所以我们有必要采用一种变步长的方法，这通常采用每次平分步长的办法，直到所求积分值满足精度为止.具体方法如下.

设将积分区间[a,b]分成 n 等份，(步长$h=\frac{b-a}{n}$）按复化梯形公式计算出T_n，若精度达不到

要求，则将每个小区间$[x_k, x_{k+1}]$二分一次，即在这个小区间内增加一个节点$x_{k+1/2} = x_k + \frac{h}{2}$.

由复化梯形公式得到区间$[x_k, x_{k+1}]$上的积分值为，

$$\frac{h}{2\cdot 2}\left[f(x_k) + 2f(x_{k+1/2}) + f(x_{k+1})\right].$$

将每个小区间上的积分值加起来则得

$$T_{2n} = \frac{h}{4}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k) + 2f(x_{k+1/2}) + f(x_{k+1})\right].$$

整理得，

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2}). \qquad (4\text{-}1)$$

上式称为梯形公式的递推化公式.由此可见求T_{2n}时利用了T_n，这使得计算工作量减少了一半.

为便于编制程序，通常用以下公式，

$$\begin{cases} T_1 = \dfrac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right] \\ T_{2^k} = \dfrac{1}{2}T_{2^{k-1}} + \dfrac{b-a}{2^k}\displaystyle\sum_{i=0}^{2^{k-1}-1} f[a + (2i+1)\dfrac{b-a}{2^k}] \end{cases}, k = 1, 2, \cdots. \qquad (4\text{-}2)$$

直到$\left|T_{2^k} - T_{2^{k-1}}\right| \le \varepsilon$（所给精度）为止.

4.4.2 Romberg 公式

按以上（4-2）式计算时，算法简单，但收敛速度慢.为此由误差$I - T_n \approx -\frac{h^2}{12}\left[f'(b) - f'(a)\right]$

可知，

$$I - T_{2n} \approx -\frac{1}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2\left[f'(b) - f'(a)\right].$$

显然，二分一次后误差缩减为原来的$\frac{1}{4}$.即，$\frac{I - T_{2n}}{I - T_n} \approx \frac{1}{4}$ 由此可得到

$$I \approx \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n. \qquad (4\text{-}3)$$

可以证明，

$$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n \quad . \tag{4-4}$$

同样由（3-6）知，二分一次后，用复化 Simpson 公式时误差将缩减为原来的$\frac{1}{16}$.即，

$\frac{I - S_{2n}}{I - S_n} \approx \frac{1}{16}$.可得，$I \approx \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n$.可以证明，

$$C_n = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n \tag{4-5}$$

同理，由C_n和C_{2n}误差可构造出 Romberg 公式，

$$R_n = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n \tag{4-6}$$

根据（4-4）（4-5）（4-6）三式可以将精度并不太高的T_n逐步加工成精度较高的S_n，C_n，R_n.

通常我们按以下方法进行计算.先用（4-2），即下式

$$\begin{cases} T_1 = \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right] \\ T_{2^k} = \frac{1}{2}T_{2^{k-1}} + \frac{b-a}{2^k}\sum_{i=0}^{2^{k-1}-1} f[a + (2i+1)\frac{b-a}{2^k}] \end{cases}.$$

计算出T_1, T_2, T_4, T_8，然后用（4-4）分别取 n=1,n=2,n=4 计算出S_1, S_2, 及S_4，再由（4-5）取 n=1,n=2，求出C_1, C_2,最后用（4-6）得到R_1.见下表，

$$\begin{array}{llll} T_1 & & & \\ T_2 & S_1 & & \\ T_4 & S_2 & C_1 & \\ T_8 & S_4 & C_2 & R_1 \end{array}$$

第一列到第二列用（4-4），第二列到第三列用（4-5），第三列到第四列用（4-6）.

一般来说，求到R_1精度即可满足要求.通常不再继续下去.因为当 m 很大时，$\frac{4^m}{4^m - 1} \approx 1$，而

$\frac{1}{4^m - 1} \approx 0$，加工效果不再显著.

以上的迭代加速基于以下定理.

定理 4 设 $u_0(h)$ 是计算函数值 I 的近似公式，既

$$u_0(h) = I + a_1 h^2 + a_2 h^4 + \cdots + a_{2k} h^{2k} + \cdots$$

其中，a_i 与 h 无关.则由 $u_0(h)$ 通过步长 h 折半的方法可得求 I 的更高精度的近似公式.

事实上，$u_0\left(\frac{h}{2}\right) = I + a_1 \frac{h^2}{2^2} + a_2 \frac{h^4}{2^4} + \cdots + a_{2k} \frac{h^{2k}}{2^{2k}} + \cdots$

$$u_1(h) = \frac{4u_0\left(\frac{h}{2}\right) - u_0(h)}{3} = I + \beta_2 h^4 + \beta_3 h^6 + \cdots + \beta_k h^{2k} + \cdots$$

又有 $u_1\left(\frac{h}{2}\right) = I + \beta_2 \frac{h^4}{2^4} + \beta_3 \frac{h^6}{2^6} + \cdots + \beta_k \frac{h^{2k}}{2^{2k}} + \cdots$

得到，$u_2(h) = \dfrac{2^4 u_1\left(\frac{h}{2}\right) - u_1(h)}{2^4 - 1} = I + \gamma_3 h^6 + \cdots + \gamma_k h^{2k} + \cdots$

继续下去，通过此法可以得到精度更高的公式.

第7章 非线性方程的数值解法

教学目的：使学生掌握非线性方程和方程组得一些数值方法如对分区间方法、迭代法等.

教学重点：对分区间法、迭代法、牛顿法

教学难点：非线性方程组的迭代法

教学过程与内容：

7.1 根的搜索

在一些实际问题中，常常会遇到求解方程 $f(x)=0$ 的问题.这里的函数 f(x)可以是代数多项式，也可以是超越函数.相应的方程分别称为代数方程和超越方程.若 x^* 使得 $f(x^*)=0$，则称 x^* 为方程的根.若 f(x)在[a,b]上连续，且 $f(a)f(b)<0$,则 $f(x)=0$ 在[a,b]内至少有一个根.此时[a,b]区间称为有根区间.以后若无特殊说明，总假定 $f(x)=0$ 是有解的.

7.1.1 逐步搜索法

逐步搜索法的步骤为：先将[a,b]区间分成 n 等份，称 $h=\dfrac{b-a}{n}$ 为步长，并记 x_k （$k=0,1,\cdots,n$）为分点.从 $x_0=a$ 出发，逐个验证 $f(x_0)$，$f(x_1)$，$\cdots$, $f(x_k),\cdots$ 的符号，一旦发现 $f(x_k)$ 与 $f(x_{k+1})$ 符号相反，则断定在区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 内有 $f(x)=0$ 的一个根.用这种方法可以求出[a,b]区间内的所有 $f(x)=0$ 的根.如果要求精度不高的话，可以取 $x^*\approx\dfrac{x_k+x_{k+1}}{2}$ 作为近似根.但若要求精度较高的话，可以将区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 再分成 n 等份，用以上方法将有根区间逐步缩小，最后取有根区间的中点即可.也可以第一次就将[a,b]区间分的很细（即 n 取很大）.不管怎样，若要求精度较高的话，用这种方法来求 $f(x)=0$ 的根时，计算工作量是较大的，所以一般不单独使用它.

由以上可知，总可以用上法使得有根区间内只含有 $f(x)=0$ 的一个根，因此以后总假定方程 $f(x)=0$ 在有根区间内只有一个根.

7.1.2 二分法

假设 $f(x)=0$ 在[a,b]内只有一个根.二分法的步骤如下：

取 $x_0=\dfrac{a+b}{2}$，计算 $f(x_0)$.若 $f(x_0)$ 与 $f(a)$ 同号，

则所求根一定在区间 $[x_0,b]$ 内，此时令 $a_1=x_0$，$b_1=b$.否则，令 $a_1=a$，$b_1=x_0$.从而得有根区间

$[a_1,b_1]$.显然有根区间 $[a_1,b_1]$ 的长度为原有根区间 $[a,b]$ 的长度的一半.

（2）取 $x_1=\dfrac{a_1+b_1}{2}$，计算 $f(x_1)$.若 $f(x_1)$ 与 $f(a_1)$ 同号，

则所求根一定在区间 $[x_1,b_1]$ 内，此时令 $a_2=x_1$，$b_2=b_1$.否则，令 $a_2=a_1$，$b_2=x_1$.从而得有根区间

$[a_2,b_2]$.显然有根区间 $[a_2,b_2]$ 的长度为 $[a_1,b_1]$ 的长度的一半，且为原有根区间 $[a,b]$ 的长度的 $1/4$.

继续以上过程，则得一系列有根区间

$[a,b]\supset[a_1,b_1]\supset\cdots\supset[a_k,b_k]\supset\cdots$

其中，每一个有根区间都是前一个有根区间的一半.当 $k\to\infty$ 时，有根区间必然缩为一点 x^*，而 x^* 即为所求的根.

若取有根区间的中点，$x_k=\dfrac{a_k+b_k}{2}$，（$k=0,1,\cdots$）则得一点列，$x_0,x_1,\cdots,x_k,\cdots$.显然有 $\lim\limits_{k\to\infty}x_k=x^*$，

所以，当 k 充分大时，可以取 $x^*\approx x_k=\dfrac{a_k+b_k}{2}$ 作为 $f(x)=0$ 的近似根.

实际计算时，常常用以下几种方法作为终止条件.

（A）给定精度 $\delta>0$，若对 $x_k=\dfrac{a_k+b_k}{2}$ 有 $|f(x_k)|\le\delta$，

则可停止二分，取 $x^*\approx x_k=\dfrac{a_k+b_k}{2}$.

（B）给定精度 $\varepsilon>0$，若有某个有根区间 $[a_k,b_k]$ 的长度满足

$b_k-a_k\le\varepsilon$，则可停止二分，取 $x^*\approx x_k=\dfrac{a_k+b_k}{2}$.

(C) 对于给定的精度 $\varepsilon>0$，若要求 $|x^*-x_k|<\varepsilon$，可以计算出所需二分的次数 k.

事实上，因为 $|x^*-x_k|\le\dfrac{b_k-a_k}{2}=\dfrac{b-a}{2^{k+1}}$，只需

$$\frac{b-a}{2^{k+1}}<\varepsilon. \tag{1-1}$$

就能保证$\left|x^{*}-x_k\right|<\varepsilon$，由（1-1）解之得$k>\ln\frac{b-a}{2\varepsilon}/\ln 2$.所以可以用二分次数$k$作为终止条件.

7.2 迭代法

7.2.1 迭代法及其收敛性

设给定方程 $f(x)=0$，首先将方程转化为与其等价形式$x=\varphi(x)$.其次，取一个近似值x_0代入$x=\varphi(x)$得，$x_1=\varphi(x_0)$，再将x_1代入得$x_2=\varphi(x_1)$，一般地，有

$$x_{k+1}=\varphi(x_k)\quad,\quad（k=0,1,2,\cdots）\qquad（2-1）$$

由（2-1）则得一迭代序列{x_k}，（$k=0,1,2,\cdots$）.如果这个下列收敛的话，则它的极限值就是所求方程的根.即有

$$\lim_{k\to\infty}x_k=x^{*}.$$

例　用迭代法求方程$x^3-x-1=0$在$x_0=1.5$附近的根.

解　将方程$x^3-x-1=0$转化为等价形式$x=\sqrt[3]{x+1}$，建立迭代公式　$x_{k+1}=\sqrt[3]{x_k+1}$　，（$k=0,1,2,\cdots$）.

取$x_0=1.5$迭代结果如下表：

k	x_k	k	x_k
0	1.5	5	1.32476
1	1.35721	6	1.32473
2	1.33086	7	1.32472
3	1.32588	8	1.32472
4	1.32494		

若取六位有效数字则知方程的根约为$x^{*}\approx 1.32472$.

显然，也可以将方程$x^3-x-1=0$转化为$x=x^3-1$，建立迭代公式　$x_{k+1}=x_k^3-1$，（$k=0,1,2,\cdots$）仍取$x_0=1.5$，迭代得，$x_1=2.375$，$x_2=12.39$.可见迭代产生的序列{x_k}是不能收敛的.

此例说明，方程$f(x)=0$的转化形式不同（即$\varphi(x)$不同，称其为迭代函数不同），用建立的迭代公式迭代后产生的序列的收敛性也不同.也就是说并非任意等价变换后所建立的迭代公式都是收敛的.

那么应该如何变换才能使所建立的迭代公式收敛呢？见以下定理.

定理 1　对于方程 $f(x)=0$ 的等价形式 $x=\varphi(x)$，若迭代函数 $\varphi(x)$ 满足：

ⅰ. $\varphi(x)\in C[a,b]$；

ⅱ. 对 $\forall x\in[a,b]$，有 $\varphi(x)\in[a,b]$.即，$a\le x\le b$ 时，$a\le\varphi(x)\le b$；

ⅲ. 对 $\forall x\in[a,b]$，有 $|\varphi'(x)|\le L<1$.

则有

⑴. $x=\varphi(x)$ 在[a,b]上有惟一解 x^*；

⑵. 对 $\forall x_0\in[a,b]$，迭代过程 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$（$k=0,1,\cdots$）收敛于方程 $x=\varphi(x)$ 的根 x^*；

⑶. $\left|x^*-x_k\right|\le\dfrac{1}{1-L}\left|x_{k+1}-x_k\right|$；

⑷. $\left|x^*-x_k\right|\le\dfrac{L^k}{1-L}\left|x_1-x_0\right|$.

证明. ⑴.存在性：令 $h(x)=\varphi(x)-x$，则 $h(x)\in C[a,b]$，且 $h(a)\ge 0$，$h(b)\le 0$.$\therefore$ 有连续函数性质知，至少有一个 $x^*\in[a,b]$ 使 $h(x^*)=\varphi(x^*)-x^*=0$.

惟一性：设两个解 $x^*,\bar{x}\in[a,b]$，使 $x^*=\varphi(x^*)$ 及 $\bar{x}=\varphi(\bar{x})$，由中值定理得，$x^*-\bar{x}=\varphi(x^*)-\varphi(\bar{x})=\varphi'(\xi)(x^*-\bar{x})$，其中 ξ 在 x^* 与 $\bar{x}$ 之间.

$\therefore(x^*-\bar{x})(1-\varphi'(\xi))=0$，由于 $1-\varphi'(\xi)>0$，所以 $x^*=\bar{x}$.

⑵. 由中值定理得

$x^*-x_{k+1}=\varphi(x^*)-\varphi(x_k)=\varphi'(\xi)(x^*-x_k)$ 取绝对值得

$$\left|x^*-x_{k+1}\right|\le L\left|x^*-x_k\right|. \qquad (2\text{-}2)$$

反复利用（2-2）式得

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

注意到，$L<1$，$\therefore\left|x^*-x_{k+1}\right|\xrightarrow{k\to\infty}0$.即 $x_k\xrightarrow{k\to\infty}x^*$.

⑶. 同样由中值定理得

$$\left|x_{k+1}-x_k\right|=\left|\varphi(x_k)-\varphi(x_{k-1})\right|=\left|\varphi'(\xi)(x_k-x_{k-1})\right|\le L\left|x_k-x_{k-1}\right| \qquad (2\text{-}3)$$

同时，$\left|x_{k+1}-x_k\right|=\left|(x^*-x_k)-(x^*-x_{k+1})\right|\ge\left|x^*-x_k\right|-\left|x^*-x_{k+1}\right|$　　（注意到（2-2）式）

$\geq \left|x^* - x_k\right| - L\left|x^* - x_k\right| = (1-L)\left|x^* - x_k\right|$

两边除以$(1-L)$结论得证.

⑷．由结论⑶及（2-3）式得

$$\left|x^* - x_k\right| \leq \frac{1}{1-L}\left|x_{k+1} - x_k\right| \leq \frac{L}{1-L}\left|x_k - x_{k-1}\right| \leq \cdots \leq \frac{L^k}{1-L}\left|x_1 - x_0\right|.$$

注释：由结论$\left|x^* - x_k\right| \leq \dfrac{1}{1-L}\left|x_{k+1} - x_k\right|$知，要使$\left|x^* - x_k\right| \leq \varepsilon$，只需$\left|x_k - x_{k-1}\right|$小于某一正数即可.

以下讨论迭代过程的局部收敛性.

定义 1 若存在x^*的某一邻域$R:\left|x - x^*\right| < \delta$，使得迭代过程$x_{k+1} = \varphi(x_k)$（$k = 0,1,\cdots$）对任意$x_0 \in R$都收敛，则称迭代过程$x_{k+1} = \varphi(x_k)$在$x^*$邻近具有局部收敛性.

定理 2 设x^*为$x = \varphi(x)$的根，$\varphi'(x)$在x^*的邻近连续，且$\left|\varphi'(x^*)\right| \leq L < 1$，则迭代过程$x_{k+1} = \varphi(x_k)$在$x^*$邻近具有局部收敛性.

证明 $\because \left|\varphi'(x^*)\right| \leq L < 1$，又$\varphi'(x)$在$x^*$的邻近连续，故存在$x^*$的某一邻域$R:\left|x - x^*\right| < \delta$，使对任意$x \in R$，有$\left|\varphi'(x)\right| \leq L < 1$，又对任意$x \in R$，

$$\left|\varphi(x) - x^*\right| = \left|\varphi(x) - \varphi(x^*)\right| \leq L\left|x - x^*\right| < \left|x - x^*\right| < \delta.$$

即对任意$x \in R$，有$\varphi(x) \in R$.由定理 1 知，$x_{k+1} = \varphi(x_k)$收敛.

例 求方程$x = e^{-x}$在$x_0 = 0.5$附近的一个根，要求精度满足$\left|x_{k+1} - x_k\right| < 10^{-5}$.

解 易知，在[0.5，0.6]区间内$\varphi'(x)$满足$\left|(e^{-x})'\right| \approx 0.6 < 1$.因此迭代公式$x_{k+1} = e^{-x_k}$对于 初值$x_0 = 0.5$是收敛的.计算结果见下表：

k	x_k	k	x_k	k	x_k	k	x_k
0	0.5	5	0.5711721	10	0.5669072	15	0.5671571
1	0.6065306	6	0.5648629	11	0.5672772	16	0.5671354
2	0.5452392	7	0.5684380	12	0.5670673	17	0.5671477
3	0.5797031	8	0.5664094	13	0.5671863	18	0.5671407
4	0.5600646	9	0.5675596	14	0.5671188		

从以上的迭代可见，收敛速度是较慢的.为此研究迭代公式的加工，以提高收敛速度.

7.2.2 迭代公式的加工

设 x_0 是 x^* 的某个近似值，迭代一次后得， $x_1=\varphi(x_0)$，由中值定理得，

$x_1-x^*=\varphi'(\xi)(x_0-x^*)$ 其中 ξ 在 x_0 与 x^* 之间.

假设 $\varphi'(x)$ 变化不大，可以近似地取某个近似值 L，则有

$$x_1-x^*\approx L(x_0-x^*). \qquad (2\text{-}4)$$

解（2-4）式得，$x^*\approx\dfrac{1}{1-L}x_1-\dfrac{L}{1-L}x_0=x_1+\dfrac{L}{1-L}(x_1-x_0)$.

所以，取

$$x_2=x_1+\frac{L}{1-L}(x_1-x_0). \qquad (2\text{-}5)$$

它应该更接近 x^*，将此 x_2 代入公式得到 $x_3=\varphi(x_2)$，而 x_4 再按（2-5）式取为 $x_4=x_3+\dfrac{L}{1-L}(x_3-x_2)$，……，继续下去便得一个加速公式：

$$\text{校正}\quad \bar{x}_{k+1}=\varphi(x_k)$$

$$\text{改进}\quad x_{k+1}=\bar{x}_{k+1}+\frac{L}{1-L}(\bar{x}_{k+1}-x_k),\ (k=0,1,2,\cdots) \qquad (2\text{-}6)$$

用（2-6）式时，关键是 $\varphi'(x)$ 的近似值 L 的选择.它直接关系到收敛与否以及收敛的速度.由教材之例可知，（2-6）式的确提高了速度.此法的缺点是 $\varphi'(x)$ 的近似值 L 的选择往往不是件容易的事，为克服这一缺点讨论另一个行之有效的加速公式，通常称为 Aitken 加速方法（或称 Steffensen 加速方法）.

设 x_0 是 x^* 的某个近似值，迭代一次后得，$x_1=\varphi(x_0)$，再迭代一次得 $x_2=\varphi(x_1)$，同上分别得到，

$$x_1-x^*\approx L(x_0-x^*)$$

及 $\quad x_2-x^*\approx L(x_1-x^*)\quad$ 两式相除得到 $\quad\dfrac{x_1-x^*}{x_2-x^*}\approx\dfrac{x_0-x^*}{x_1-x^*}$

解之得 $\quad x^*\approx x_2-\dfrac{(x_2-x_1)^2}{x_0-2x_1+x_2}$.

所以取 $\quad x_3=x_2-\dfrac{(x_2-x_1)^2}{x_0-2x_1+x_2}$.

继续下去，每迭代两次后，取一次.这样产生的迭代方法即称为 Aitken 加速方法（或 Steffensen 加速

方法）.具体迭代公式为：

校正 $y_k=\varphi(x_k)$

再校正 $z_k=\varphi(y_k)$

改进 $x_{k+1}=z_k-\dfrac{(z_k-y_k)^2}{z_k-2y_k+x_k}$，（$k=0,1,2,\cdots$） （2-7）

实际计算时也常用下列迭代公式：

校正 $y_k=\varphi(x_k)$

再校正 $z_k=\varphi(y_k)$

改进 $x_{k+1}=x_k-\dfrac{(y_k-x_k)^2}{z_k-2y_k+x_k}$，（$k=0,1,2,\cdots$） （2-8）

当一般迭代公式收敛速度较慢甚至不收敛时，用以上两种迭代公式可以大大提高收敛速度.

例 用迭代法求方程 $x^3-x-1=0$ 在 $x_0=1.5$ 附近的根.

前面将方程 $x^3-x-1=0$ 转化为 $x=x^3-1$ 后，建立迭代公式 $x_{k+1}=x_k^3-1$ （$k=0,1,2,\cdots$），取 $x_0=1.5$，迭代得，$x_1=2.375$，$x_2=12.39$.产生的序列{ x_k }是不收敛的.而当用 Aitken 加速方法（或 Steffensen 加速方法）处理这一迭代公式后，可以得到较好的收敛性.计算结果见下表.

k	y_k	z_k	x_k
0			5
1	2.37500	12.3945	1.41629
2	1.84092	5.23888	1.35565
3	1.49140	2.31728	1.32895
4	1.34710	1.44435	1.32480
5	1.32518	1.32714	1.32472

7.3 Newton 迭代法

7.3.1 Newton 迭代公式及其几何意义

设方程 $f(x)=0$ 的函数 $f(x)$ 连续可微, x^* 为方程 $f(x)=0$ 的实根, x_k 是其某个近似值.将 $f(x)$ 在 x_k 点作 Taylor 展开,

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

在上式中取 $$f(x_k)+f'(x_k)(x-x_k)=0. \quad (3\text{-}1)$$

的根作为方程 $f(x)=0$ 的根的一个近似.由(3-1)式得 $x^* \approx x_k - \dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)}$.

将这一近似值作为第 $k+1$ 次迭代,得到

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

此即称为 Newton 迭代法.

方程 $f(x)=0$ 的根从几何上讲,它是曲线 $y=f(x)$ 与直线 $y=0$ (x 轴)的交点的横坐标, 而 $f(x_k)+f'(x_k)(x-x_k)=0$,相当于直线 $y=f(x_k)+f'(x_k)(x-x_k)$ 与 $y=0$ (x 轴)的交点的横坐标.

而直线 $y=f(x_k)+f'(x_k)(x-x_k)$ 实际上是曲线 $y=f(x)$ 在($x_k, f(x_k)$)点的切线方程,所以 Newton 迭代法的几何意义是:用切线与 x 轴交点的横坐标作为曲线与 x 轴交点的横坐标的近似.(以切线代替曲线).故 Newton 法又常称为切线法.

7.3.2 Newton 法的局部收敛性

讨论 Newton 法的局部收敛性以前,给出一般收敛性的定义及其收敛定理.

定义 2 设迭代过程 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 收敛于方程 $x=\varphi(x)$ 的根 x^*,若迭代误差 $e_k=x_k-x^*$,当 $k\to\infty$ 时

$$\lim_{k\to\infty}\frac{x_{k+1}-x^*}{(x_k-x^*)^p}=\lim_{k\to\infty}\frac{e_{k+1}}{e_k^p}=c\neq 0 \quad (C\text{ 为一常数})$$

成立.则称该迭代过程是 p 阶收敛的.特别地,p=1 时称为线性收敛;p=2 时称为平方收敛;p>1 时称为超线性收敛.

定理 3 对于迭代过程 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$,若 $\varphi^{(p)}(x)$ 在 x^* 的附近连续,且 $\varphi'(x^*)=\varphi''(x^*)=\cdots=\varphi^{(p-1)}(x^*)=0$,而 $\varphi^{(p)}(x^*)\neq 0$.则该迭代过程在 x^* 的附近是 p 阶收敛的.

证明 首先由 $\varphi'(x^*)=0$ 知, 迭代过程 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 具有局部收敛性.其次,将 $\varphi(x_k)$ 在 x^* 点作 Taylor 展开得

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

$$+\frac{\varphi^{(p-1)}(x^*)}{(p-1)!}(x_k-x^*)^{p-1}+\frac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!}(x_k-x^*)^p$$

其中,ξ 在 x_k 与 x^* 之间.

由条件知，$\varphi(x_k)=\varphi(x^*)+\dfrac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!}(x_k-x^*)^p$

即，$x_{k+1}-x^*=\dfrac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!}(x_k-x^*)^p$

所以 $\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{x_{k+1}-x^*}{(x_k-x^*)^p}=\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!}$　由于 ξ 在 x_k 与 x^* 之间,又有收敛性知 $x_k\xrightarrow{k\to\infty}x^*$,

$$\therefore \lim_{k\to\infty}\frac{x_{k+1}-x^*}{(x_k-x^*)^p}=\frac{\varphi^{(p)}(x^*)}{p!}. \tag{3-3}$$

证毕.

作为以上定理的应用,考虑 Newton 迭代法.

例 设 x^* 为方程 $f(x)=0$ 的根,若 $f'(x^*)\neq 0$,且 $f''(x)$ 在 x^* 的附近连续,则 Newton 迭代法至少具有二阶局部收敛性.

证明　由于迭代函数 $\varphi(x)=x-\dfrac{f(x)}{f'(x)}$,则知 $\varphi'(x)=\dfrac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$,

$x=x^*$　代入得,$\varphi'(x^*)=0$,同理知 $\varphi''(x^*)=\dfrac{f''(x^*)}{f'(x^*)}$.

若 $f''(x^*)\neq 0$,则 $\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{x_{k+1}-x^*}{(x_k-x^*)^2}=\dfrac{\varphi''(x^*)}{2!}=\dfrac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}$.

若 $f''(x^*)=0$,则知至少三阶局部收敛.所以 Newton 迭代法至少具有二阶局部收敛性.

以上是在 $f'(x^*)\neq 0$ 的假设（即 $f(x)=0$ 有单根 x^* 的情况）下，得知 Newton 迭代法至少具有二阶局部收敛性.若 $f(x)=0$ 有 m($m>1$)重根 x^* 时，Newton 迭代法只有线性收敛，但若改用

$$x_{k+1}=x_k-m\frac{f(x_k)}{f'(x_k)},\ (k=0,1,2,\cdots). \tag{3-4}$$

则得（3-4）仍然具有二阶局部收敛性.关于这一结论的证明请自己完成.

7.3.3　Newton 法的改进

Ⅰ.*Newton* 下山法

Newton 迭代法是一种局部收敛方法，通常要求初始值 x_0 要选在 x^* 附近时 Newton 迭代法才收敛.为保证 Newton 迭代法收敛，可以引入参数，并将（3-2）式改为

$$x_{k+1}=x_k-\lambda\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}\text{，}(k=0,1,2,\cdots). \qquad (3\text{-}5)$$

其中，参数 $0<\lambda\le 1$，称为下山因子，通常称（3-5）为 Newton 下山法. λ 选择的标准是使得

$|f(x_{k+1})|<|f(x_k)|$.

成立，一般先取 $\lambda=1$，若上式不成立，可以依次取 $\lambda=\frac{1}{2},\frac{1}{4},\cdots$

直到下山条件 $|f(x_{k+1})|<|f(x_k)|$ 满足为止.但若 λ 取得很小时，下山条件仍不满足，这时应考虑另取一个初值了.可以证明（3-5）式只是线性收敛.

Ⅱ.弦截法

应用 Newton 迭代法时，需要用到函数 $f(x)$ 的导数.但若 $f(x)$ 在某点不可导或者 $f(x)$ 的导数较冗长时，会给 Newton 法的应用带来不便，为此用差商代替导数的办法，得到

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f(x_k)-f(x_{k-1})}(x_k-x_{k-1})\text{，}(k=1,2,3,\cdots). \qquad (3\text{-}6)$$

（3-6）称为弦截法.

与 Newton 法比较，可以看出它实际是在 Newton 法中用

$$f'(x_k)\approx\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}.$$

代替的结果.而过点（$x_k, f(x_k)$）斜率为 $\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}$ 的直线是曲线 $y=f(x)$ 的割线，它实际是用割线与 x 轴的交点之横坐标作为曲线与 x 轴交点横坐标的近似，所以通常称为割线法，又称为离散 Newton 法.应该注意的是用弦截法求方程的根时，应该取两个初始值.

例 试确定常数 p,q,r 使迭代公式

$$x_{k+1}=px_k+q\frac{a}{x_k^2}+r\frac{a^2}{x_k^5}.$$

产生的序列{x_k}收敛到 $\sqrt[3]{a}$，并使收敛阶尽量高.

解 因为迭代函数为 $\varphi(x)=px+q\frac{a}{x^2}+r\frac{a^2}{x^5}$，而 $x^*=\sqrt[3]{a}$.根据定理知，要使收敛阶尽量高，应有

$x^*=\varphi(x^*)$，$\varphi'(x^*)=0$，$\varphi''(x^*)=0$，由此三式即可得到 p,q,r 所满足的三个方程为：

$$p+q+r=1\text{，}\quad p-2q-5r=0\text{，}\quad q+5r=0.$$

解之得，$p=q=\frac{5}{9}, r=-\frac{1}{9}$，且 $\varphi'''(\sqrt[3]{a})\ne 0$，故迭代公式是三阶收敛的.