计算方法复习

典型概念例题

零 绪论

- 误差及算法
  - 误差
    - 分类
      - 舍入
      - 截断
    - 度量
      - 绝对
      - 相对
      - 有效数字
    - 传播
      - 一元函数
      - n元函数
  - 算法

若以x=1.414代替$x^*=\sqrt{2}$ 求 $y^*=(\sqrt{2}-1)^4$

的近似值，以下哪个算法更好？

$$y^*=(\sqrt{2}-1)^4 \quad y^*=(3-2\sqrt{2})^2 \quad y^*=\left(\frac{1}{\sqrt{2}+1}\right)^4$$

解 $y=(x-1)^4 \qquad y^*=(x^*-1)^4$

$$y-y^*=4(\xi-1)^3(x-x^*)$$

$$\approx 4(x-1)^3(x-x^*)$$

$$|4(x-1)^3|=4*(1.414-1)^3\approx 0.2838$$

$$\max_{1.414\le\xi\le\sqrt{2}}|4(\xi-1)^3|=4(\sqrt{2}-1)^3$$

$$\approx 4*0.414^3$$

若以x=1.414代替$x^*=\sqrt{2}$ 求 $y^*=(\sqrt{2}-1)^4$

的近似值，以下哪个算法更好？

$$y^*=(\sqrt{2}-1)^4 \quad y^*=(3-2\sqrt{2})^2 \quad y^*=(\frac{1}{\sqrt{2}+1})^4$$

解 $y=(3-2x)^2 \quad y^*=(3-2x^*)^2$

$$y-y^*=-4(3-2\xi)(x-x^*)$$

$$\approx -4(3-2x)(x-x^*)$$

$$|-4(3-2*1.414)| \approx 0.0204$$

$$\max_{1.414\le\xi\le\sqrt{2}} |-4(3-2\xi)| = 4(3-2*1.414)^3$$

$$\approx 4*0.172^3$$

$y^*=(\sqrt{2}-1)^4 \quad y^*=(3-2\sqrt{2})^2 \quad y^*=(\frac{1}{\sqrt{2}+1})^4$

解 $\quad y=(\frac{1}{x+1})^4 \qquad y^*=(\frac{1}{x^*+1})^4$

$$y-y^*=-4(1+\xi)^{-5}(x-x^*)$$

$$\approx -4(1+x)^{-5}(x-x^*)$$

$$|-4(1+1.414)^{-5}|\approx 0.0488$$

$$\max_{1.414\le\xi\le\sqrt{2}}|-4(1+\xi)^{-5}|=4(1+1.414)^{-5}$$

$$\approx 4*2.414^{-5}$$

一 插值与逼近

- 插值法
  - 工具
    - 差商
    - 差分
    - 插值基函数
  - 多项式插值
    - 存在唯一性
    - 误差估计
    - 插值公式
    - **Hermite**插值
  - 分段多项式插值
    - 分段线性
    - 分段三次**Hermite**插值
    - 三次样条插值

函数逼近

预备知识

范数

内积

正交多项式

函数逼近方法

最佳一致逼近

最佳平方逼近

最小二乘拟合

三角函数逼近

帕德逼近

例1 求$g(x)=\sqrt{x}$在$P_1[0,1]$中的最佳平方逼近元

解法一

这是C[0,1]上的最佳平方逼近问题.

取$\varphi_0 = 1, \varphi_1 = x, P_1[0,1] = span\{1,x\}$

记 $p_1(x)=a_0 + a_1 x$

$(\varphi_0,\varphi_0)=1$，$(\varphi_0,\varphi_1)=1/2$，

$(\varphi_1,\varphi_1)=1/3$，

$(\varphi_0,g)=2/3$，$(\varphi_1,g)=2/5$.

所以，关于a_0，a_1为未知数的法方程组为

$$\begin{cases} a_0 + \frac{1}{2}a_1 = \frac{2}{3} \\ \frac{1}{2}a_0 + \frac{1}{3}a_1 = \frac{2}{5} \end{cases}$$

解得a_0=4/15，a_1 = 4/5

即$p_1(x)$=4/5x+4/15

为$P_1[0,1]$中对$g(x)=\sqrt{x}$的最佳平方逼近元.

例1 观测物体过原点的直线运动,得到所示数据,求运动方程.

时间t/s	0	0.9	1.9	3.0	3.9	5.0
距离s/m	0	10	30	50	80	110

解 作直线模型: $at+s=0$

n为观测点数

定义残差向量: $V=(at_1+s_1, at_2+s_2, \cdots, at_n+s_n)^{\mathrm{T}}$

$$I(a)=\|V\|_2^2=\sum_{i=1}^{n}(at_i+s_i)^2$$

$$\frac{dI}{da} = 2\sum_{i=1}^{n}(at_i + s_i)t_i = 2a\sum_{i=1}^{n}t_i^2 + 2\sum_{i=1}^{n}t_i s_i$$

所以: $\dfrac{dI}{da} = 2\times 53.63a + 2\times 1078$

令: $\dfrac{dI}{da} = 2\times 53.63a + 2\times 1078 = 0$

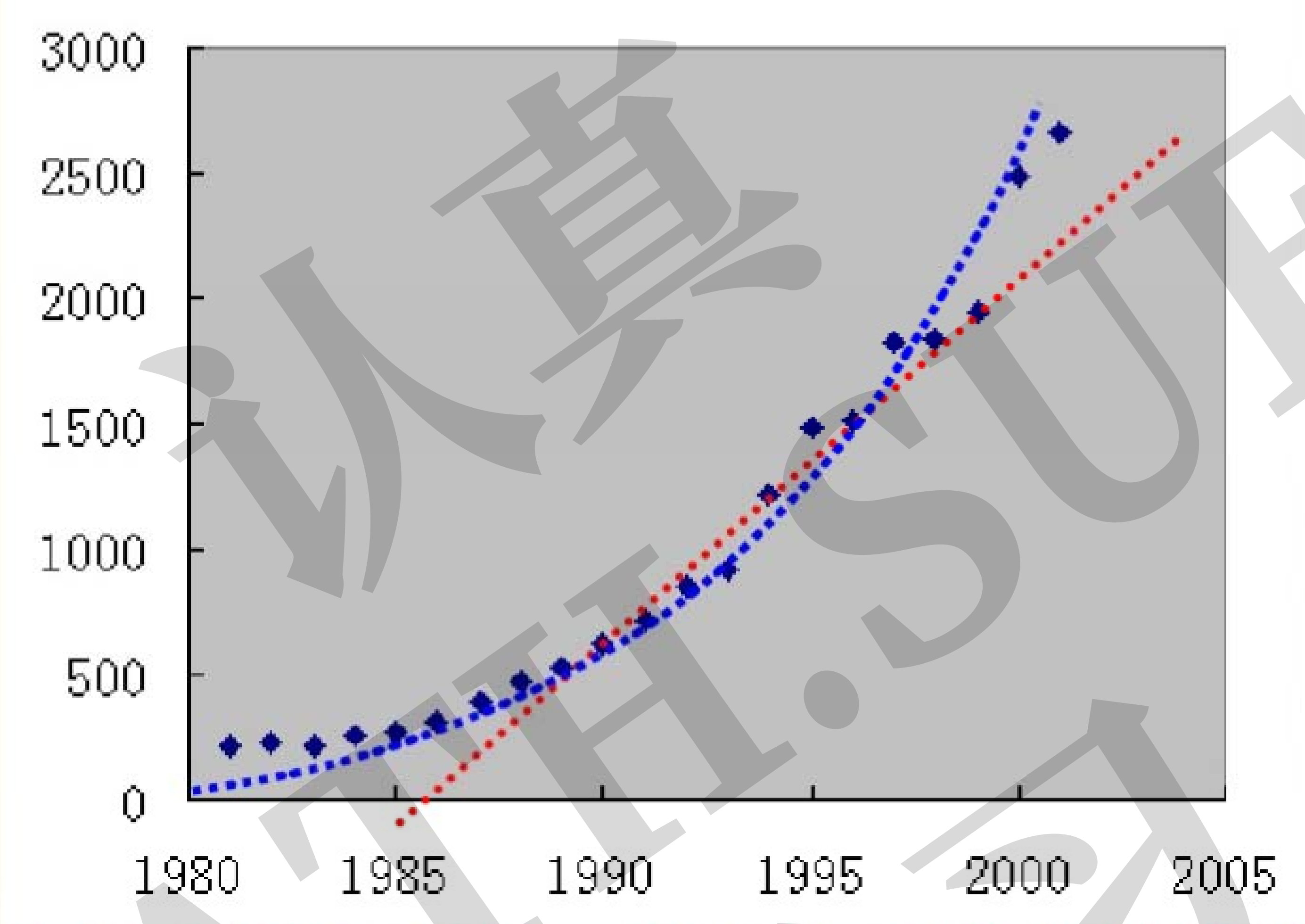
$$a = -20.1007$$

所求运动方程为: $-20.1007t + s = 0$

可线性化回归或拟合

下表按年份给出了1981~2001年我国出口贸易量（亿美元）的数据，根据此表你能预测2008年我国的出口贸易量么？

年份	1981	1982	1983	1984	1985	1986	1987
出口贸易量	220.1	223.2	222.3	261.4	273.5	309.4	394.4
年份	1988	1989	1990	1991	1992	1993	1994
出口贸易量	475.2	525.4	620.9	719.1	849.4	917.4	1210.1
年份	1995	1996	1997	1998	1999	2000	2001
出口贸易量	1487.8	1510.5	1827.9	1837.1	1949.3	2492.0	2661.0



从散点图中观察，数据与直线的拟合性不好，若用直线来预测，误差将会很大。

而图像近似指数函数，呈现出非线性相关性。

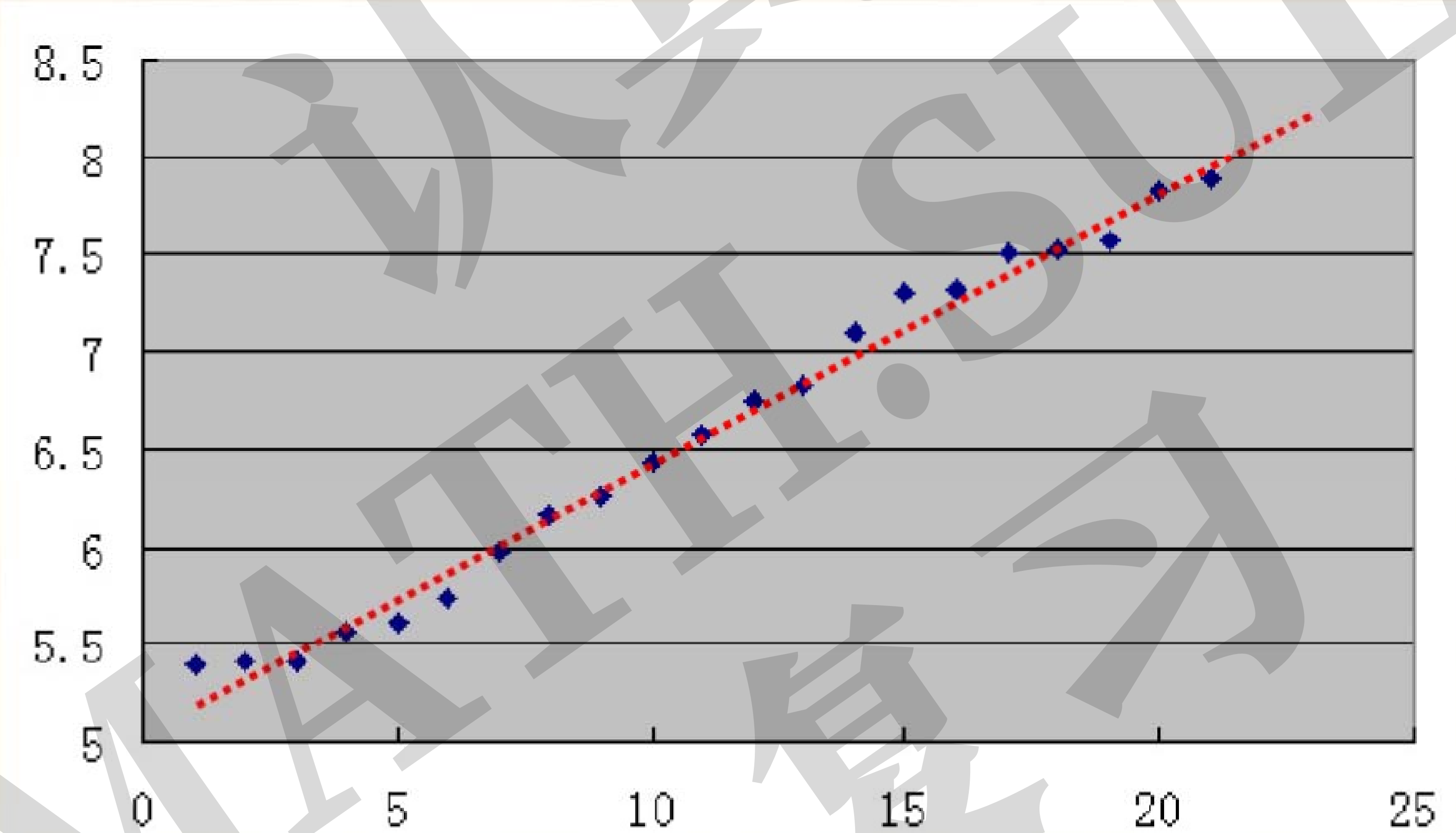
考虑函数 $y = ae^{bx}$ 来拟合数据的变化关系，将其转化成线性函数，两边取对数：$\ln y = \ln a + bx$

设 $u = \ln y, c = \ln a$，则上式变为 $u = c + bx$，即线性回归方程，记1981年为x=1，1982年为x=2，··变换后的数据如下表：

x	1	2	3	4	5	6	7
u	5.394	5.408	5.404	5.566	5.611	5.735	5.977
x	8	9	10	11	12	13	14
u	6.164	6.264	6.432	6.578	6.745	6.822	7.098
x	15	16	17	18	19	20	21
u	7.305	7.320	7.511	7.516	7.575	7.821	7.886

对上表数据求线性回归方程得：$c = 5.056$，$b = 0.138$，

即：$u = 5.056 + 0.138x$



二 数值积分

数值积分

- 基本概念
  - 数值求积思想
  - 代数精度
  - 插值型求积公式
    - 梯形公式
    - 辛普森公式
  - 收敛及稳定性
- N-C公式
- Romberg求积公式及外推加速
- Gauss求积公式

取 $$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\int_a^b l_k(x)dx$$

A_k

称为插值型求积公式

其中 $$A_k = \int_a^b \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} \frac{(x-x_i)}{x_k - x_i}dx$$

由节点决定，与$f(x)$ 无关。

Simpson 公式

$$\int_a^b f(x)dx = A_0 f(a) + A_1 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + A_2 f(b)$$

$$l_0(x) = \frac{\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b)}{\left(a - \frac{a+b}{2}\right)(a-b)} \qquad A_0 = \int_a^b l_0(x)dx = \frac{1}{6}(b-a)$$

$$l_1(x) = \frac{(x-a)(x-b)}{\left(\frac{a+b}{2} - a\right)\left(\frac{a+b}{2} - b\right)} \qquad A_1 = \int_a^b l_1(x)dx = \frac{4}{6}(b-a)$$

$$l_2(x) = \frac{(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)}{(b-a)\left(b - \frac{a+b}{2}\right)} \qquad A_2 = \int_a^b l_2(x)dx = \frac{1}{6}(b-a)$$

复化 Simpson 公式

$$h=\frac{b-a}{2n},\ x_j=a+jh\quad (j=0,1,\cdots,2n)$$

$$x_{2j-2}\qquad\qquad x_{2j-1}\qquad\qquad x_{2j}$$

$$I(f)\approx\sum_{j=1}^{n}\frac{h}{3}[f(x_{2j-2})+4f(x_{2j-1})+f(x_{2j})]$$

$$S_n(f)=\sum_{j=1}^{n}\frac{h}{3}[f(x_{2j-2})+4f(x_{2j-1})+f(x_{2j})]$$

$$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{h}{3}[f(a)+4\sum_{j=1}^{n}f(x_{2j-1})+2\sum_{j=1}^{n-1}f(x_{2j})+f(b)]$$

例2 试确定常数A,B,C及α,使求积公式:

$$\int_{-2}^{2} f(x)dx \approx Af(-\alpha)+Bf(0)+Cf(\alpha)$$

代数精确度尽可能高，并确定上述公式的代数精确度。是否为高斯型求积公式.

解

令:

$$f(x)=1 \quad \int_{-2}^{2} dx = 4 = A+B+C$$

$$f(x)=x \quad \int_{-2}^{2} xdx = 0 = -A\alpha+C\alpha$$

$$f(x)=x^2 \quad \int_{-2}^{2} x^2dx = \frac{16}{3} = A\alpha^2+C\alpha^2$$

$$f(x)=x^3 \quad \int_{-2}^{2} x^3dx = 0 = -A\alpha^3+C\alpha^3$$

整理得： $A=C$

$$2A+B=4$$

$$A\alpha^2=\frac{8}{3}$$

$$f(x)=x^4 \quad \int_{-2}^{2} x^4 dx=\frac{64}{5}=A\alpha^4+C\alpha^4$$

$$A\alpha^4=\frac{32}{5}$$

$$\frac{8}{3}\alpha^2=\frac{32}{5} \qquad \alpha=\pm\sqrt{\frac{12}{5}}$$

$$A=\frac{10}{9}\quad B=\frac{16}{9}\quad C=\frac{10}{9}$$

$$f(x)=x^5\quad \int_{-2}^{2}x^5dx=0=-A\alpha^5+C\alpha^5$$

$$f(x)=x^6$$

$$\int_{-2}^{2}x^6dx=\frac{128}{7}\neq A\alpha^6+C\alpha^6=2\times\frac{8}{3}\times\frac{12^2}{5^2}$$

所以代数精确度为**5**次.

因为代数精确度为**2×3=5**次,是高斯型求积公式.

一、Richardson外推法

外推法是一种精确度较低的近似公式组合成精确度较高的近似公式的方法.

设 $h\neq 0$是任意数, $F(h)$ 是关于步长h逼近 F^*的近似公式,它们的误差估计式为

$$F^* - F(h) = k_1 h + k_2 h^2 + k_3 h^3 + \cdots$$

这里,$k_1, k_2, k_3 \ldots$是一组常数.

称$F(h)$逼近F^*的误差为$O(h)$.

把h的幂次称为误差的阶,例如$O(h^2)$,称为二阶误差,等等.

我们希望找到一种简便的方法,用近似公式$F(h)$的组合,得到误差阶较高的近似公式$\tilde{F}(h)$,使

$$F^* - \tilde{F}(h) = k_2' h^2 + k_3' h^3 + \cdots$$

$\tilde{F}(h)$逼近F^*的误差为$O(h^2)$

类似地,用$\tilde{F}(h)$组合产生逼近F^*的误差$O(h^3)$的近似公式等

改写 $F^* - F(h) = k_1 h + k_2 h^2 + k_3 h^3 + \cdots$

为 $$F^* = F(h) + k_1 h + k_2 h^2 + k_3 h^3 + \cdots \qquad (1)$$

用h/2代替式中的h,得

$$F^* = F(\frac{h}{2}) + k_1 \frac{h}{2} + k_2 (\frac{h}{2})^2 + k_3 (\frac{h}{2})^3 + \cdots \qquad (2)$$

2×(2)-(1)得:

$$F^* = [F(\frac{h}{2}) + (F(\frac{h}{2}) - F(h))] + k_2 (\frac{h^2}{2} - h^2) + k_3 (\frac{h^3}{2} - h^3) + \ldots \qquad (3)$$

令 $F_1(h) = F(h)$

$$F_2(h) = F_1(\frac{h}{2}) + [F_1(\frac{h}{2}) - F_1(h)]$$

改写(3)式为$F^* = F_2(h) - \frac{1}{2}k_2h^2 - \frac{3}{4}k_3h^3 - ...$ (4)

这里，$F_2(h)$逼近F^*的误差为$O(h^2)$

再用 $h/2$ 代替 h，使(4)式变为

$$F^* = F_2(\frac{h}{2}) - \frac{1}{8}k_2h^2 - \frac{3}{32}k_3h^3 - \cdots \quad (5)$$

4×(5)-(4)得:

$$F^* = [F_2(\frac{h}{2}) + \frac{F_2(h/2) - F_2(h)}{3}] + \frac{1}{8}k_3h^3 + ... \quad (6)$$

记 $$F_3(h) = F_2(\frac{h}{2}) + \frac{F_2(h/2) - F_2(h)}{3}$$

(6)式可以写为 $F^* = F_3(h) + \frac{1}{8}k_3h^3 + \ldots$ **(7)**

这里，$F_3(h)$逼近F^*的误差为$O(h^3)$

还是用$h/2$代替h代入(7)式后,类似上述过程,可以得到误差为$O(h^3)$的$F_3(h)$

一般地,对$k=2,3,\ldots,n$,有逼近 F^* 的误差为$O(h^k)$的递推公式

$$F_k(h) = F_{k-1}\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{F_{k-1}\left(\frac{h}{2}\right) - F_{k-1}(h)}{2^{k-1} - 1}$$

称为关于步长h的外推公式.

三 线性方程组

直接法

- 选主元Gauss消去法
- 矩阵三角分解法
- 追赶法
- 向量和矩阵范数
- 矩阵条件数

三 线性方程组

迭代法
- 基本概念
  - 迭代格式
  - 收敛条件
- 雅可比迭代
- 高斯-塞德尔迭代
- **SOR**迭代
- 迭代收敛速度

求$A=\begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$的特征值和特征向量.

$$|\lambda E - A| = \begin{vmatrix} \lambda-3 & 1 \\ 1 & \lambda-3 \end{vmatrix}$$

$$= \lambda^2 - 6\lambda + 8 = (\lambda-2)(\lambda-4)$$

所以A的特征值为$\lambda_1 = 2, \lambda_2 = 4.$

当$\lambda_1 = 2$时，解$(2E-A)x = o$

$$2E - A = \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

例3 设线性方程组 $Ax=b$ 的系数矩阵为:

$$\begin{pmatrix} 2 & a & 1 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & a & 1 \end{pmatrix}$$

(1)写出Jacobi 迭代法的迭代格式

(2)确定*a*的取值范围，使方程组对应的Gauss-Seidel迭代收敛。

解 **(1)** 线性方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + ax_2 + x_3 = b_1 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = b_2 \\ x_1 + ax_2 + x_3 = b_3 \end{cases}$$

Jacobi 迭代

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = & -\frac{a}{2}x_2^{(k)} - \frac{1}{2}x_3^{(k)} + \frac{b_1}{2} \\ x_2^{(k+1)} = -x_1^{(k)} & -2x_3^{(k)} + b_2 \\ x_3^{(k+1)} = -x_1^{(k)} - ax_2^{(k)} & + b_3 \end{cases}$$

(2) 线性方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & a & 1 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & a & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & a & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & a & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Gauss-Seidel迭代矩阵:

$$B_{G-S} = -\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & a & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 & a & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\left|\lambda I - B_{G-S}\right| =$$

$$\left|\begin{pmatrix}\lambda & & \\ & \lambda & \\ & & \lambda\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}2 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 0\\ 1 & a & 1\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}0 & a & 1\\ 0 & 0 & 2\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\right| = 0$$

$$\frac{1}{2}\left|\begin{pmatrix}2\lambda & & \\ \lambda & \lambda & \\ \lambda & a\lambda & \lambda\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & a & 1\\ 0 & 0 & 2\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\right| = 0$$

$$\frac{1}{2}\begin{vmatrix}2\lambda & a & 1\\ \lambda & \lambda & 2\\ \lambda & a\lambda & \lambda\end{vmatrix} = 0$$

令 $\left|\lambda I - B_{G-S}\right| = 0$

得 $\lambda_1 = 0 \quad \lambda_2 = \frac{1}{2} \quad \lambda_3 = 2a$

$$\left|2a\right| < 1$$

$$-\frac{1}{2} < a < \frac{1}{2}$$

例 7-11 设求解方程组 $Ax = b$ 的简单迭代法

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g,\ (k = 0,1,2,\cdots)$$

收敛 求证:对 $0 < \omega < 1$,迭代法

$$x^{(k+1)} = [(1 - \omega) I + \omega B] x^{(k)} + \omega g,\ (k = 0,1,2,\cdots)$$

收敛.

分析 由于已知 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g\ (k = 0,1,2,\cdots)$ 收敛,故谱半径 $\rho(B) < 1$,如果把第二个迭代法的迭代矩阵的特征值和 B 的特征值联系起来,则有可能完成证明.

证 设 $C = (1 - \omega) I + \omega B$, $\lambda(C)$, $\lambda(B)$ 分别为 C 和 B 的特征值,则显然

$$\lambda(C) = (1 - \omega) + \omega\lambda(B)$$

因为 $0 < \omega < 1$, $\lambda(C)$ 是 1 和 $\lambda(B)$ 的加权平均,故

$$|\lambda(B)| < |\lambda(C)| < 1$$

即迭代法 $x^{(k+1)} = Cx^{(k)} + \omega g\ (k = 0,1,2,\cdots)$ 收敛.

四 非线性方程求根

求根法
- 二分法
- 不动点迭代法及收敛性理论
- 牛顿迭代法
- 插值型迭代
  - 弦截法
  - 抛物线法

定理1　考虑方程 $x=g(x)$, $g(x)\in C[a,b]$, 若

(Ⅰ) 当 $x\in[a,b]$ 时，$g(x)\in[a,b]$；

(Ⅱ)在$[a,b]$上成立不等式: $|g(x_1)-g(x_2)|\le\alpha|x_1-x_2|$

则（1）g在$[a,b]$上存在惟一不动点x^*

（2）任取 $x_0\in[a,b]$, 由 $x_{k+1}=g(x_k)$ 得到的序列 $\{x_k\}$（$\subset[a,b]$）收敛于x^*

（3）k次迭代所得到的近似不动点x_k与精确不动点x^*有有误差估计式：

$$\left|x_k-x^*\right|\le\frac{\alpha}{1-\alpha}\left|x_k-x_{k-1}\right|$$

$$\left|x_k-x^*\right|\le\frac{\alpha^k}{1-\alpha}\left|x_1-x_0\right|$$

局部收敛性定理

定理2 设x^*为g的不动点，$g(x)$与$g'(x)$在包含x^*的某邻域$U(x^*)$ (即开区间)内连续，且$|g'(x^*)|<1$，则存在$\delta>0$，当$x_0\in[x^*-\delta, x^*+\delta]$时，迭代法产生的序列$\{x_k\}\subset[x^*-\delta, x^*+\delta]$且收敛于$x^*$.

定理3 设x^*为g的不动点，$p\geq 2$为正整数，g在x^*的某邻域$U(x^*)$内p阶连续可微，且

$$g'(x^*)=g''(x^*)=\ldots=g^{(p-1)}(x^*)=0，而g^{(p)}(x^*)\neq 0，$$

则存在$\delta>0$，当$x_0\in[x^*-\delta, x^*+\delta]$ $(x_0\neq x^*)$时，由迭代法产生的序列$\{x_k\}$以p阶收敛速度收敛于x^*.

例4 证明迭代公式 $x_{n+1}=\frac{1}{2}(x_n+\frac{a}{x_n})$

对于$x_0>0$，$a>0$迭代收敛，且以2阶收敛于$\sqrt{a}$。

证明： (1) 首先证明收敛性：

$$x_{n+1}=\frac{1}{2}(x_n+\frac{a}{x_n})\geq\sqrt{a}$$

迭代函数为： $g(x)=\frac{1}{2}(x+\frac{a}{x})$

$$g'(x)=\frac{1}{2}(1-\frac{a}{x^2})$$

$x\geq\sqrt{a}$ $\quad |g'(x)|=\frac{1}{2}(1-\frac{a}{x^2})\leq\frac{1}{2}$

所以迭代收敛。

(2) 证明收敛性于：$\sqrt{a}$

$$\lim_{n\to\infty} x_n = l \qquad l = \frac{1}{2}\left(l + \frac{a}{l}\right) \qquad l^2 = a$$

$$l = \pm\sqrt{a} \qquad x_{n+1} \geq \sqrt{a}$$

所以： $l = \sqrt{a}$

(3) 证明收敛阶为**2**：

$$g'(x) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{a}{x^2}\right) \qquad g'(\sqrt{a}) = 0$$

$$g''(x) = ax^{-3} \qquad g''(\sqrt{a}) \neq 0$$

所以 $x_{n+1} = \dfrac{1}{2}\left(x_n + \dfrac{a}{x_n}\right)$ 以**2**阶迭代收敛于$\sqrt{a}$

例5 用一般迭代法求方程$x\text{-}\ln x = 2$在区间$(2, \infty)$内的根，要求$|x_k-x_{k-1}|/|x_k|<=10^{-8}$

解 令$f(x)=x-\ln x-2$

$f(2)<0, f(4)>0$,故方程在$(2,4)$内至少有一个根

又 $f'(x)=1-\dfrac{1}{x}>0 \quad x\in(2,\infty)$

因此$f(x)=0$在$(2, \infty)$内仅有一个根x^*

将方程化为等价方程：$x = 2 + \ln x$

$$g(x)=2+\ln x \quad |g'(x)|=\left|\frac{1}{x}\right|<0.5 \quad x\in(2,4)$$

因此，$\forall\, x_0 \in (2, \infty)$, $x_{k+1} = 2 + \ln x_k$产生的序列$\{ x_k \}$收敛于x^*

取初值$x_0 = 3.0$,计算结果如下：

k	x_i				
0	3.000000000	5	3.145702209	10	3.146191628
1	3.098612289	6	3.146037143	11	3.146192714
2	3.130954362	7	3.146143611	12	3.146193060
3	3.141337866	8	3.146177452	13	3.146193169
4	3.144648781	9	3.146188209	14	3.146193204

另一种迭代格式

$$x_{k+1} = \frac{x_k(1 + \ln x_k)}{x_k - 1}$$

0	3.000000000	2	3.146193441
1	3.147918433	3	3.146193221

五 常微分方程数值解

- 数值解法
  - 重要概念
    - 局部截断误差
    - 方法精度
  - 重要构造方法
    - 差分构造
    - 积分构造
    - 泰勒展式构造
  - 单步法(Euler法, 改进Euler法)
  - 线性多步法
  - 方程组与高阶方程

例5 给定求解常微分方程初值问题 $\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$ 的线性多步公式

$$y_{n+1} = \alpha(y_n + y_{n-1}) + h(\beta_1 f_{n+1} + f_n + \beta_{-1} f_{n-1})$$

试确定系数 $\alpha, \beta_1, \beta_{-1}$，使它具有尽可能高的精度，并推导其局部截断误差主项。

解 $y(x_{n+1}) = y(x_n + h)$

$$= y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(x_n) + \frac{h^3}{6} y'''(x_n) + \frac{h^4}{24} y^{(4)}(x_n) + O(h^5)$$

$$y(x_{n-1}) = y(x_n - h)$$

$$= y(x_n) - hy'(x_n) + \frac{h^2}{2}y''(x_n) - \frac{h^3}{6}y'''(x_n) + \frac{h^4}{24}y^{(4)}(x_n) + O(h^5)$$

$$f(x_{n+1}, y(x_{n+1})) = y'(x_{n+1}) = y'(x_n + h)$$

$$= y'(x_n) + hy''(x_n) + \frac{h^2}{2}y'''(x_n) + \frac{h^3}{6}y^{(4)}(x_n) + O(h^4)$$

$$f(x_{n-1}, y(x_{n-1})) = y'(x_{n-1}) = y'(x_n - h)$$

$$= y'(x_n) - hy''(x_n) + \frac{h^2}{2}y'''(x_n) - \frac{h^3}{6}y^{(4)}(x_n) + O(h^4)$$

线性多步公式局部截断误差：

$$R(x_{n+1})=y(x_{n+1})-\alpha(y(x_n)+y(x_{n-1}))$$

$$-h(\beta_1 f(x_{n+1},y(x_{n+1}))+f(x_n,y(x_n))+\beta_{-1}f(x_{n-1},y(x_{n-1})))$$

$$=y(x_{n+1})-\alpha(y(x_n)+y(x_{n-1}))$$

$$-h(\beta_1 y'(x_{n+1})+y'(x_n)+\beta_{-1}y'(x_{n-1}))$$

$$= y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(x_n) + \frac{h^3}{6} y'''(x_n) + \frac{h^4}{24} y^{(4)}(x_n) + O(h^5)$$

$$-\alpha y(x_n)$$

$$-\alpha[y(x_n) - hy'(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(x_n) - \frac{h^3}{6} y'''(x_n) + \frac{h^4}{24} y^{(4)}(x_n) + O(h^5)]$$

$$-h\beta_1[y'(x_n) + hy''(x_n) + \frac{h^2}{2} y'''(x_n) + \frac{h^3}{6} y^{(4)}(x_n) + O(h^4)]$$

$$-hy'(x_n)$$

$$-h\beta_{-1}[y'(x_n) - hy''(x_n) + \frac{h^2}{2} y'''(x_n) - \frac{h^3}{6} y^{(4)}(x_n) + O(h^4)]$$

$$= (1-2\alpha)y(x_n)$$

$$+(1+\alpha-\beta_1-1-\beta_{-1})hy'(x_n)$$

$$+(\frac{1}{2}-\frac{\alpha}{2}-\beta_1+\beta_{-1})h^2y''(x_n)$$

$$+(\frac{1}{6}+\frac{\alpha}{6}-\frac{\beta_1}{2}-\frac{\beta_{-1}}{2})h^3y'''(x_n)$$

$$+(\frac{1}{24}-\frac{\alpha}{24}-\frac{\beta_1}{6}+\frac{\beta_{-1}}{6})h^4y^{(4)}(x_n)$$

$$+O(h^5)$$

令:
$$\begin{cases} 1-2\alpha=0 \\ \alpha-\beta_1-\beta_{-1}=0 \\ \dfrac{1}{2}-\dfrac{\alpha}{2}-\beta_1+\beta_{-1}=0 \end{cases}$$

得: $\alpha=\dfrac{1}{2} \quad \beta_1=\dfrac{3}{8} \quad \beta_{-1}=\dfrac{1}{8}$

此时: $\dfrac{1}{6}+\dfrac{\alpha}{6}-\dfrac{\beta_1}{2}-\dfrac{\beta_{-1}}{2}=0$

$$\frac{1}{24}-\frac{\alpha}{24}-\frac{\beta_1}{6}+\frac{\beta_{-1}}{6}=-\frac{1}{48}\neq 0$$

所以当: $\alpha=\dfrac{1}{2}\quad\beta_1=\dfrac{3}{8}\quad\beta_{-1}=\dfrac{1}{8}$

$$y_{n+1}=\frac{1}{2}(y_n+y_{n-1})+h(\frac{3}{8}f_{n+1}+f_n+\frac{1}{8}f_{n-1})$$

为三阶多步公式.

局部截断误差主项为: $-\dfrac{1}{48}h^4y^{(4)}(x_n)$

二、二级Runge-Kutta方法

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h(b_1 k_1 + b_2 k_2) \\ k_1 = f(x_i, y_i) \\ k_j = f(x_i + c_2 h, y_i + c_2 h k_1) \end{cases}$$

二级Runge-Kutta方法不超过二阶

记 $f = f(x_i, y_i)$ $f'_x = f'_x(x_i, y_i)$ $f'_y = f'_y(x_i, y_i)$

$f''_{xx} = f''_{xx}(x_i, y_i)$ $f''_{yy} = f''_{yy}(x_i, y_i)$ $f''_{xy} = f''_{xy}(x_i, y_i)$

由此得

$$k_1 = f$$

$$k_2 = f(x_i + c_2 h, y_i + c_2 h k_1)$$

$$= f(x_i, y_i) + c_2 h(f'_x + k_1 f'_y) + O(h^2))$$

$$y_{i+1} = y_i + (b_1 + b_2)hf + c_2 b_2 h^2 (f'_x + k_1 f'_y) + O(h^3)$$

另一方面

$$y' = f(x_i, y_i) = f \qquad y'' = f'_x + f'_y f$$

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

$$= y_i + hf + \frac{1}{2}h^2(f'_x + f'_y f) + O(h^3)$$

$$e_{i+1}=y(x_{i+1})-y_{i+1}=(1-b_1-b_2)hf+(\frac{1}{2}-c_2b_2)h^2(f_x'+k_1f_y')+O(h^3)$$

为使局部截断误差为$O(h^3)$，应取

$$\begin{cases} b_1+b_2=1 \\ c_2b_2=\frac{1}{2} \end{cases} \Longrightarrow e_{i+1}=O(h^3)$$

六 特征值特征向量

特征值及特征向量解法

- 重要概念
  - 特征值特征向量
  - 变换
    - 正交相似
    - 反射
    - 平面旋转
  - QR分解
- 迭代法
  - 幂法
  - 反幂法
- 变换法
  - Householder变换法
  - QR法

一、乘幂法

乘幂法是适用于求一般矩阵按模最大特征值及相应特征向量的算法.

设A是n阶矩阵, 其n个特征值按模从大到小排序为

$$|\lambda_1|>|\lambda_2|\geq\cdots\geq|\lambda_n|$$

又假设关于$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$的特征向量$v_1, v_2, \ldots, v_n$线性无关

任意取定初始向量x_0

$$x_0 = a_1 v_1 + a_2 v_2 + \cdots + a_n v_n \quad (a_1 \neq 0)$$

建立迭代公式 ： $x_k = A x_{k-1}$

$$x_1 = A x_0 = a_1 A v_1 + a_2 A v_2 + \cdots + a_n A v_n$$

$$= a_1 \lambda_1 v_1 + a_2 \lambda_2 v_2 + \cdots + a_n \lambda_n v_n$$

$$x_2 = A x_1 = A^2 x_0 = a_1 \lambda_1^2 v_1 + a_2 \lambda_2^2 v_2 + \cdots + a_n \lambda_n^2 v_n$$

$$x_k = A x_{k-1} = A^k x_0 = a_1 \lambda_1^k v_1 + a_2 \lambda_2^k v_2 + \cdots + a_n \lambda_n^k v_n$$

$$= \lambda_1^k [a_1 v_1 + a_2 (\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^k v_2 + \cdots + a_n (\frac{\lambda_n}{\lambda_1})^k v_n$$

因为 $\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right|<1 \quad i=2,\cdots,n$

故当$k\to\infty$时，$x_k\to\lambda_1^k a_1 v_1$.

因此，x_k可看成是关于特征值λ_1的近似特征向量

有一严重缺点，当$|\lambda_1|>1$（或$|\lambda_1|<1$时）$\{v_k\}$中不为零的分量将随k的增大而无限增大，计算机就可能出现上溢（或随k的增大而很快出现下溢）

因此，在实际计算时，须按规范法计算，每步先对向量x_k进行“规范化”。

迭代格式改为: $z_k=\dfrac{x_k}{\|x_k\|_\infty} \quad x_{k+1}=Az_k \quad k=0,1,2,\cdots$

例2 设 $x=(3,4,12)^T$ 试求**H**矩阵, 使 $Hx=y=(-13,0,0)^T$

$$u=x-y=(16,4,12)^T$$

$$H=I-2\frac{uu^T}{\|u\|_2^2}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}-\frac{2}{416}\begin{bmatrix}16\\4\\12\end{bmatrix}[16,4,12]$$

$$=\frac{1}{13}\begin{bmatrix}-3&-4&-12\\-4&12&-3\\-12&-3&4\end{bmatrix}$$

直接验证 $Hx=(-13,0,0)^T$

计算 $y = Hx = (-\sigma, 0, \ldots, 0)^T$ 的算法如下：

$$\sigma = \mathrm{sign}(x_1)\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$u = (x_1 + \sigma, x_2, \ldots, x_n)^T \underline{\underline{\Delta}} (u_1, u_2, \ldots, u_n)^T$$

$$\rho = \sigma(x_1 + \sigma) = \sigma u_1$$

$$y = x - u$$

例3 设矩阵 $A=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 2 & -1 & -1\\ 2 & -4 & 5\end{bmatrix}$ 试作矩阵A=QR分解。

(1) 求 H_1，作 $A_2 = H_1 A$。

$$1^\circ\ \sigma_1 = \text{sign}(a_{11})\left(\sum_{i=1}^{3} a_{i1}^2\right)^{\frac{1}{2}} = 3;$$

$$2^\circ\ u_1 = a_{11} + \sigma_1 = 4, u_2 = 2, u = (4,2,2)^T;$$

$$3^\circ\ \rho_1 = \sigma_1 u_1 = 3\times 4 = 12;$$

$$H_1 = I - \rho_1^{-1} u u^T = \frac{1}{3}\begin{bmatrix}-1 & -2 & -2\\ -2 & 2 & -1\\ -3 & -1 & 2\end{bmatrix}$$

4°

$$A_2 = H_1 A = \begin{bmatrix} -3 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & -3 \\ 0 & -3 & 3 \end{bmatrix}$$

(2)求 H_2，作 $A_3 = H_2 A_2 = R$

1° $\sigma_2 = \text{sign}(a_{22}^{(2)})(\sum_{i=2}^{2} a_{i2}^{(2)^2}) = 3$ (约定$\text{sign}(0) = 1$);

2° $u_1 = 0, u_2 = a_{22}^{(2)} + \sigma_2 = 3, u_3 = a_{32}^{(2)} = -3, u = (0,3,-3)^T$;

$$3^{\circ}\ \rho_2 = \sigma_2 u_2 = 9;$$

$$H_2 = I - \rho_2^{-1} u u^T = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$A_3 = H_2 A_2 = \begin{bmatrix} -3 & 3 & -3 \\ 0 & -3 & -3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} = R$$

4°

$$Q = H_1 H_2 = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} -1 & -2 & -2 \\ -2 & -1 & 2 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

由矩阵乘法可直接验证 $A = QR$ 。

例4 设矩阵 $A=\begin{bmatrix}2&2&1\\0&2&2\\2&1&2\end{bmatrix}$ 试作矩阵**A=QR**分解。

(1) 先将a_{31}=2变为0

$$A=\begin{bmatrix}2&2&1\\0&2&2\\2&1&2\end{bmatrix}$$

$$\cos\theta=\frac{2}{\sqrt{2^2+2^2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\sin\theta=\frac{2}{\sqrt{2^2+2^2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

旋转变换矩阵：

$$T_{31}=\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}&0&1/\sqrt{2}\\0&1&0\\-1/\sqrt{2}&0&1/\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

$$A_1 = T_{31}A = \begin{pmatrix} 4/\sqrt{2} & 3/\sqrt{2} & 3/\sqrt{2} \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

(2) 将A_1的 $a_{32} = -1/\sqrt{2}$ **变为0**

$$A_1 = \begin{pmatrix} 4/\sqrt{2} & 3/\sqrt{2} & 3/\sqrt{2} \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$\cos\theta = \frac{2}{\sqrt{2^2 + (-1/\sqrt{2})^2}} = \frac{2\sqrt{2}}{3}$$

$$\sin\theta = -1/3$$

旋转变换矩阵：

$$T_{32}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 2\sqrt{2}/3 & -1/3\\ 0 & 1/3 & 2\sqrt{2}/3\end{pmatrix}$$

$$A_2=T_{32}A_1=\begin{pmatrix}2/\sqrt{2} & 3/\sqrt{2} & 3/\sqrt{2}\\ 0 & 3/\sqrt{2} & 7/(3\sqrt{2})\\ 0 & 0 & 4/3\end{pmatrix}\overset{\Delta}{=}R$$

所以：$A_2=T_{32}A_1=T_{32}T_{31}A=R$

$$A=T_{31}^{-1}T_{32}^{-1}R=T_{31}^{\mathrm{T}}T_{32}^{\mathrm{T}}R=QR$$

$$Q = T_{31}^{\mathrm{T}} T_{32}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/(3\sqrt{2}) & -2/\sqrt{3} \\ 0 & 2\sqrt{2}/3 & 1/3 \\ 1/\sqrt{2} & -1/(3\sqrt{2}) & 2/3 \end{pmatrix}$$

$$R = \begin{pmatrix} 2/\sqrt{2} & 3/\sqrt{2} & 3/\sqrt{2} \\ 0 & 3/\sqrt{2} & 7/(3\sqrt{2}) \\ 0 & 0 & 4/3 \end{pmatrix}$$