

数值分析复习

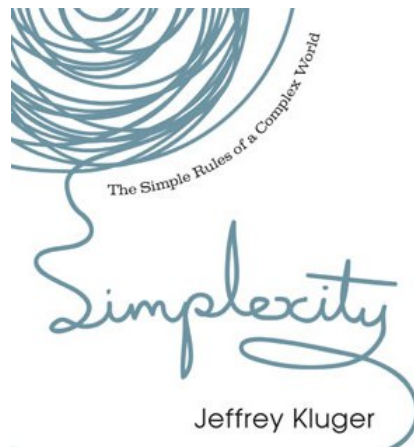
基础与前沿研究院

谭兵, bingtan72@stu.uestc.edu.cn

2019 年 1 月 3 日

声明: 此复习资料整理自老师课堂 PPT 和作业习题, 我只是搬运工, 其中如有书写错误, 还请见谅, 另, 此资料只作复习使用, 更多的知识在课堂之外。

——基础与前沿研究院: 谭兵

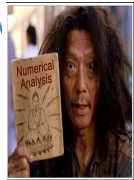


最重要的思想: 化 (近似), 化大为小, 化繁为简, 化难为易 ..., 关键在于如何平衡好的近似和易于计算的近似。

——赵熙乐老师

也许 N 年后, 你们都不会记得这些推导, 都不会记得这些定理, 但是希望计算思维方式会影响你们。

——赵熙乐老师



数值分析
赵照乐老师 (化)
基础与前沿研究院
谭兵

数据插值方法

$(n+1)$ 个互异的插值节点, 满足插值条件的 n 次多项式是存在且唯一的 **多项式插值的存在唯一性定理**

$P(x) = l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + l_2(x)y_2$

插值基函数: $l_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$ **拉格朗日插值**

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

高次多项式插值的震荡现象 **Runge现象**

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

牛顿插值

$R_n(x) = f[x, x_0, x_1, \dots, x_n]w_{n+1}(x)$ **误差**

$= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}(x)$

插值条件和函数连续条件 $2n$ 个

节点处的一阶导数连续条件共有 $n-1$ 个

节点处的二阶导数连续条件共有 $n-1$ 个

自然边界条件: $S''(x_0) = 0, S''(x_n) = 0$

最小二乘法拟合

★ 正规方程: $A^T A x = A^T b$ $\operatorname{argmin}_x \|Ax - b\|_2^2$

拟合系数 $c_0, c_1, \dots, c_n, y = c_0 + c_1 x + \cdots + c_n x^n$

★ 主特征向量 (幂法): $x_n = A^n x_0$

★ 主特征值: $\lambda = \frac{x^T A x}{x^T x}$

反幂法: 计算 A^{-1} 的最大特征值可以得到 A 的最小特征值

数值积分与数值微分

左 (右、中) 矩形积分公式

梯形积分公式: $\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$

★ Simpson积分公式: $\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} [1f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + 1f(b)]$

n 阶牛顿-柯特斯积分公式: $\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=0}^n A_j f(x_j), A_j = \int_a^b l_j(x) dx$

积分节点可以自由选择: $\int_a^b f(x) dx \approx A_0 f(x_0) + \cdots + A_n f(x_n)$

两点高斯-勒让德公式: $\int_{-1}^1 f(x) dx \approx f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}})$

三点高斯-勒让德公式: $\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \frac{8}{9} f(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{8}{9} f(\sqrt{\frac{3}{5}})$

① 注意: 如果积分区间不是 $[-1, 1]$, 需要先对区间做变量替换!

数值微分

对多项式 $P(x) = 1, x, \dots, x^n$ 积分公式都精确成立 $\int_a^b P(x) dx = \sum_{j=0}^n A_j P(x_j)$ **n 阶代数精度**

一阶向前 (后) 差分, 1 阶精度, 两点中心差分: 2 阶精度

松弛方法: $Q = (1-\omega)F_1 + \omega F_2$

常微分方程数值解

★ 数值微分角度: $\frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} \approx y'(x_n) = f(x_n, y(x_n))$

★ 数值积分角度: $\int_{x_n}^{x_{n+1}} y(x) dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx$

Euler公式: $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$

梯形公式: $y(x_{n+1}) - y(x_n) = \frac{h}{2} [f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))]$

预报-校正方法 (改进 Euler 公式):

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

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

★ 局部截断误差: $T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$, 若局部截断误差为 $O(h^{p+1})$, 则方法具有 p 阶精度

非线性方程迭代法

二分法 中点 x_n 满足 $|x_n - x^*| \leq \frac{b-a}{2^{n+1}}$

★ 迭代框架 $f(x^*) = 0 \Leftrightarrow x^* = \varphi(x^*) \Rightarrow x_{n+1} = \varphi(x_n)$

★ 收敛性 $|\varphi'(x^*)| < 1$

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

终止准则: $|x^* - x_n| \leq \frac{L}{1-L} |x_n - x_{n-1}|$

★ 收敛速度 $\varphi'(x^*) = \varphi''(x^*) = \cdots = \varphi^{(p-1)}(x^*) = 0, \varphi^{(p)}(x^*) \neq 0$ p 阶收敛

★ Newton迭代法

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

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

至少平方收敛

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

弦截法 $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})} (x_k - x_{k-1})$

线性方程组的迭代法

Jacobi迭代法 $x = D^{-1}[(L+U)x + b]$ $B = D^{-1}(L+U)$

G-S迭代法 $x = (D-L)^{-1}Ux + (D-L)^{-1}b$ $B = (D-L)^{-1}U$

★ 松弛技术

$x^{(k+1)} = (1-\omega)x^k + \omega \bar{x}^{(k+1)}$

松弛因子为 1 时迭代法是 GS 迭代法

★ 收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

★ 收敛性

收敛性 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k| < 1$, 均收敛

$\|B\| < 1$, 均收敛

$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, 严格对角占优, 均收敛

A 对称正定, G-S 收敛

终止准则: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{\|B\|}{1-\|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

初等变换原理 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 $x</$

1 非线性方程求根方法

1.1 二分法

设 x^* 为方程 $f(x) = 0$ 在区间 $[a, b]$ 内的唯一根, $f(x)$ 满足 $f(a)f(b) < 0$, 则二分法计算过程中第 n 个区间 $[a_n, b_n]$ 的中点 x_n 满足不等式

$$|x_n - x^*| \leq \frac{b-a}{2^{n+1}}$$

1.2 迭代法的一般理论

不动点迭代 $x_{n+1} = \varphi(x_n)$, 唯一性满足: $|\varphi'(x)| \leq L < 1$

Taylor' s Theorem:

$$\varphi(x) = \varphi(a) + \varphi'(a)(x-a) + \frac{\varphi''(a)}{2}(x-a)^2 + \cdots + \frac{\varphi^{(p-1)}(a)}{(p-1)!}(x-a)^{p-1} + \frac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!}(x-a)^p$$

Theorem 1. 设 x^* 是 $\varphi(x)$ 的不动点 ($\varphi(x^*) = x^*$), 且

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

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

误差估计

$$\begin{aligned} |x_n - x^*| &\leq \frac{1}{1-L} |x_{n+1} - x_n| \\ |x_n - x^*| &\leq \frac{L^n}{1-L} |x_1 - x_0| \end{aligned}$$

Example 1. 采用迭代法计算 $\sqrt{7}$, 取 $x_0 = 7$,

$$x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{7}{x_k} \right), (k = 0, 1, 2, \dots)$$

若 x_k 具有 n 位有效数字, 求证 x_{k+1} 具有 $2n$ 位有效数字。

证明. 根据平均不等式可以得

$$x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{7}{x_k} \right) \geq \frac{1}{2} \cdot 2\sqrt{7} = \sqrt{7}$$

又

$$|x_{k+1} - \sqrt{7}| = \frac{1}{2x_k} (x_k - \sqrt{7})^2 \leq \frac{1}{2\sqrt{7}} |x_k - \sqrt{7}|^2 \leq \frac{1}{2\sqrt{7}} \times \frac{1}{4} \times 10^{2-2n} \leq \frac{1}{2} \times 10^{1-2n}$$

因此 x_{k+1} 具有 $2n$ 位有效数字 □

1.3 牛顿迭代法

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

Newton 迭代法至少平方收敛。

Example 2. 设 x^* 是 $f(x) = 0$ 的二重根, 则牛顿迭代法只具有一阶收敛。

证明. x^* 是二重根, 可设 $f(x) = (x-x^*)^2g(x)$

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

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

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

$$\varphi'(x^*) = \frac{1}{2}$$

具有一阶收敛。 □

若 x^* 是 $f(x) = 0$ 的 m 重根, 修正的牛顿迭代法

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

为二阶收敛。

弦截法

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

Example 3. 确定参数使得计算 \sqrt{a} 的迭代格式的收敛速度尽可能高。

$$x_{k+1} = \lambda_0 x_k + \lambda_1 \frac{a}{x_k} + \lambda_2 \frac{a^2}{x_k^3}$$

Solution. 根据迭代法可以得到

$$\varphi(x) = \lambda_0 x + \lambda_1 \frac{a}{x} + \lambda_2 \frac{a^2}{x^3}$$

需要确定三个参数, 需要三个方程, 即

$$\varphi(\sqrt{a}) = \sqrt{a}, \varphi'(\sqrt{a}) = \varphi''(\sqrt{a}) = 0$$

可以解得

$$\lambda_0 = \frac{3}{8}, \lambda_1 = \frac{3}{4}, \lambda_2 = -\frac{1}{8}$$

经验证

$$\varphi'''(\sqrt{a}) \neq 0$$

因此,

$$x_{k+1} = \frac{3}{8}x_k + \frac{3}{4}\frac{a}{x_k} - \frac{1}{8}\frac{a^2}{x_k^3}$$

是 3 阶收敛。

Example 4. 设 a 为正数, 试建立求 $\frac{1}{a}$ 的牛顿迭代公式, 要求在迭代公式中不含有除法运算, 并讨论迭代公式的收敛。

Solution. 建立方程

$$f(x) = \frac{1}{x} - a = 0$$

牛顿迭代格式

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

整理得

$$1-ax_{n+1} = (1-ax_n)^2$$

即

$$\begin{aligned} 1 - ax_k &= (1 - ax_0)^{2^k} \\ x_k &= \frac{1}{a}[1 - (1 - ax_0)^{2^k}] \end{aligned}$$

所以, 当 $|1-ax_0| < 1$ 时, 迭代公式收敛。

Example 5. 用牛顿迭代法求解非线性方程组

$$\begin{cases} x^2 - y - 1 = 0 \\ (x - 2)^2 + (y - 0.5)^2 - 1 = 0 \end{cases}$$

Solution. 令

$$\begin{aligned} f_1(x, y) &= x^2 - y - 1 \\ f_2(x, y) &= (x - 2)^2 + (y - 0.5)^2 - 1 \end{aligned}$$

那么

$$G = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x & -1 \\ 2x - 4 & 2y - 1 \end{bmatrix}$$

则牛顿迭代格式为

$$\begin{bmatrix} x_{n+1} \\ y_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_n \\ y_n \end{bmatrix} - G_{(x_n, y_n)}^{-1} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix}_{(x_n, y_n)}$$

2 解线性方程组的直接法

2.1 高斯消元法

$$Ax = b, A = LU, Ly = b, Ux = y$$

$Ax = b$ 有唯一解的充分必要条件是 $|A| \neq 0$

Example 6. 用高斯消元法解下列方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 + 5x_3 = 5 \\ 3x_1 + 4x_2 + 7x_3 = 6 \\ x_1 + 3x_2 + 3x_3 = 5 \end{cases}$$

Solution. 约化增广矩阵

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & 5 & 5 \\ 3 & 4 & 7 & 6 \\ 1 & 3 & 3 & 5 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 3 & 5 & 5 \\ -1/2 & -1/2 & -3/2 & \\ 3/2 & 1/2 & 5/2 & \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 3 & 5 & 5 \\ -1/2 & -1/2 & -3/2 & \\ -1 & -2 & & \end{bmatrix}$$

得上三角方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 + 5x_3 = 5 \\ -0.5x_2 - 0.5x_3 = -1.5 \\ -x_3 = -2 \end{cases}$$

回代求解得,

$$x_1 = -4, x_2 = 1, x_3 = 2$$

Example 7. 利用矩阵 A 的 LU 分解法求解方程组 $Ax = b$, 其中

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & -2 \\ 2 & 5 & 3 & -2 \\ -2 & -2 & 3 & 5 \\ 1 & 3 & 2 & 3 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 4 \\ 7 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Solution. 用高斯消元法分解矩阵 A

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & -2 \\ 2 & 5 & 3 & -2 \\ -2 & -2 & 3 & 5 \\ 1 & 3 & 2 & 3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & -2 \\ 2 & 1 & 1 & 2 \\ -2 & 2 & 3 & -3 \\ 1 & 1 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

由此得矩阵 A 的 LU 分解

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & -2 \\ 2 & 5 & 3 & -2 \\ -2 & -2 & 3 & 5 \\ 1 & 3 & 2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ -2 & 2 & 1 & \\ 1 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & -2 \\ & 1 & 1 & 2 \\ & & 3 & -3 \\ & & & 3 \end{bmatrix}$$

第一步, 顺代过程求解下三角方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ -2 & 2 & 1 & \\ 1 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 7 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

得: $y_1 = 4, y_2 = -1, y_3 = 9, y_4 = -3$

第二步, 回代过程求解上三角方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & -2 \\ & 1 & 1 & 2 \\ & & 3 & -3 \\ & & & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ -1 \\ 9 \\ -3 \end{bmatrix}$$

得: $x_1 = 2, x_2 = -1, x_3 = 2, x_4 = -1$

2.2 直接三角分解法

矩阵的 Doolittle 分解 $A = LU$, L 为单位下三角矩阵, U 为上三角矩阵.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Doolittle 分解法则:

- 更新顺序: 先行后列
- 列除行不除
- 旧元素减去其所在行和列前 $k-1$ 个元素的对应乘积然后求和

Example 8. 求矩阵的 Doolittle 分解

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3 & 3 & 12 & 6 \\ 2 & 4 & -1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Solution.

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

因此,

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

矩阵 Crout 分解: $A = LU$, L 为下三角矩阵, U 为单位上三角矩阵.

$$A = LU = \begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

Crout 分解法则:

- 更新顺序: 先列后行
- 行除列不除

- 旧元素减去其所在行和列前 $k-1$ 个元素的对应乘积然后求和

Example 9. 求矩阵的 *Crout* 分解

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3 & 3 & 12 & 6 \\ 2 & 4 & -1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Solution.

$$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 & 1 \\ 3 & 3 & 12 & 6 \\ 2 & 4 & -1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 & 1 \\ 3 & -3 & -2 & -1 \\ 2 & 0 & -1 & 2 \\ 4 & -6 & 1 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 & 1 \\ 3 & -3 & -2 & -1 \\ 2 & 0 & -5 & 0 \\ 4 & -6 & -19 & -9 \end{bmatrix}$$

由此分解出

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

三对角方程组的追赶法

三角矩阵的 LU 分解:

$$\begin{bmatrix} \blacksquare & & & \\ \blacksquare & \blacksquare & & \\ & \blacksquare & \blacksquare & \\ & & \blacksquare & \blacksquare & \\ & & & \blacksquare & \blacksquare \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \blacksquare & & & \\ \blacksquare & \blacksquare & & \\ & \blacksquare & \blacksquare & \\ & & \blacksquare & \blacksquare & \\ & & & \blacksquare & \blacksquare \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \blacksquare & & & \\ & \blacksquare & & \\ & & \blacksquare & \\ & & & \blacksquare & \blacksquare \end{bmatrix}$$

三对角矩阵 单位下三角阵 上三角阵

Example 10. 三对角矩阵分解

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 3 & -2 & \\ & -2 & 4 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{bmatrix}$$

Solution.

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 3 & -2 & \\ & -2 & 4 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1/2 & 5/2 & -2 & \\ & -4/5 & 12/5 & -2 \\ & & -5/4 & 5/2 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -1/2 & 1 & & \\ & -4/5 & 1 & \\ & & -5/4 & 1 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ & 5/2 & -2 & \\ & & 12/5 & -2 \\ & & & 5/2 \end{bmatrix}$$

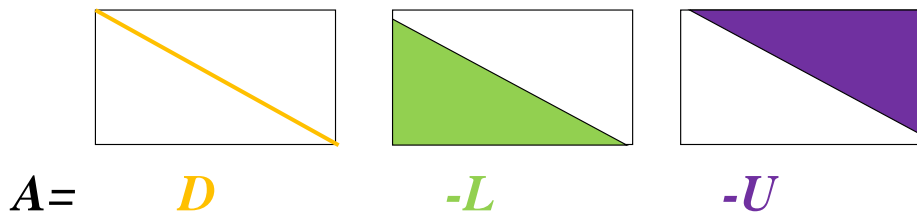
3 线性方程组的迭代法

Jacobi 迭代法

$$\begin{cases} 9x_1 - x_2 - x_3 = 7 \\ -x_1 + 10x_2 - x_3 = 8 \\ -x_1 - x_2 + 15x_3 = 13 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} x_1^{(k+1)} = (7 + x_2^{(k)} + x_3^{(k)})/9 \\ x_2^{(k+1)} = (8 + x_1^{(k)} + x_3^{(k)})/10 \\ x_3^{(k+1)} = (13 + x_1^{(k)} + x_2^{(k)})/15 \end{cases}$$

Gauss-Seidel 迭代法

$$\begin{cases} 9x_1 - x_2 - x_3 = 7 \\ -x_1 + 10x_2 - x_3 = 8 \\ -x_1 - x_2 + 15x_3 = 13 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} x_1^{(k+1)} = (7 + x_2^{(k)} + x_3^{(k)})/9 \\ x_2^{(k+1)} = (8 + x_1^{(k+1)} + x_3^{(k)})/10 \\ x_3^{(k+1)} = (13 + x_1^{(k+1)} + x_2^{(k+1)})/15 \end{cases}$$



Jacobi 迭代矩阵

$$\begin{aligned} (D - L - U)x = b &\rightarrow Dx = (L + U)x + b \\ \rightarrow x &= D^{-1}[(L + U)x + b] \\ \varphi(x) &= Bx + f, B = D^{-1}(L + U) \end{aligned}$$

Gauss-Seidel 迭代矩阵

$$\begin{aligned} (D - L - U)x = b &\rightarrow (D - L)x = Ux + b \\ \rightarrow x &= (D - L)^{-1}Ux + (D - L)^{-1}b \\ \varphi(x) &= Bx + f, B = (D - L)^{-1}U \end{aligned}$$

Theorem 2. 对任意的 f 和任意的初始向量 $x^{(0)}$, 迭代法 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 收敛的充分必要条件是

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

Theorem 3. 对任意的 f 和任意的初始向量 $x^{(0)}$, 迭代法 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 收敛的充分必要条件是

$$\rho(B) < 1$$

其中 $\rho(B) = \max_{1 \leq k \leq n} |\lambda_k|$ 表示迭代矩阵 B 的谱半径。

由性质 $\rho(B) \leq \|B\|$ ($\rho(B)\|xx^T\| = \|\lambda xx^T\| = \|Bxx^T\| \leq \|B\|\|xx^T\|$), 我们有如下推论

Lemma 1. 若 $\|B\| < 1$, 则对任意的 f 和任意的初始向量 $x^{(0)}$, 迭代法 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 收敛。

Definition 1. $A = (a_{ij})_{n \times n}$, $|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|$, 则称 A 为严格对角占优阵。

Theorem 4. 若 $Ax = b$ 的系数矩阵 A 是严格对角占优矩阵, 则 *Jacobi* 迭代和 *Gauss-Seidel* 迭代收敛。

Theorem 5. 方程组 $Ax = b$ 中, 若 A 是对称正定矩阵, 则 *Gauss-Seidel* 迭代法收敛。

Theorem 6. 设 x^* 为方程组 $Ax = b$ 的解, 若 $\|B\| < 1$, 则对迭代格式 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$, 有

$$\begin{aligned} \|x^{(k)} - x^*\| &\leq \frac{\|B\|}{1 - \|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \\ \|x^{(k)} - x^*\| &\leq \frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|} \|x^{(1)} - x^{(0)}\| \end{aligned}$$

Example 11. 方程组 $Ax = b$, 其中 A 是对称正定阵, 讨论迭代格式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \omega(b - Ax^{(k)})$$

收敛的 ω 取值范围。

Solution. 原式可写为

$$x^{(k+1)} = (I - \omega A)x^{(k)} + \omega b$$

迭代矩阵 $I - \omega A$ 的特征值为

$$Ax = \lambda x, (I - \omega A)x = (1 - \omega\lambda)x$$

迭代矩阵 $I - \omega A$ 所有的特征值模均小于 1, 即

$$|1 - \omega\lambda| < 1$$

解得

$$0 < \omega < \frac{2}{\lambda_{\max}}$$

Example 12. 研究当 a 满足什么条件时, 求解线性方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & a & a \\ a & 1 & a \\ a & a & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

的 *G-S* 迭代收敛。

Solution. 方法一: A 的各阶顺序主子式大于零, 则 A 为正定矩阵

$$\begin{cases} 1 - a^2 > 0 \\ (a - 1)^2(2a + 1) > 0 \end{cases}$$

解得 $-\frac{1}{2} < a < 1$

方法二: 根据迭代收敛条件 (迭代矩阵)

$$\rho(B) = 2|a| < 1$$

解得 $-\frac{1}{2} < a < 1$

Example 13. 设 A 是一个可逆矩阵, 矩阵序列满足

$$X_{k+1} = X_k(2I - AX_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

证明当 $\rho(I - AX_0) < 1$ 时, $\lim_{k \rightarrow \infty} X_k = A^{-1}$

证明. 由 $X_{k+1} = X_k(2I - AX_k)$ 得

$$I - AX_{k+1} = I - AX_k(2I - AX_k) = (I - AX_k)^2$$

于是

$$I - AX_k = (I - AX_{k-1})^2 = (I - AX_{k-2})^{2^2} = \dots = (I - AX_0)^{2^k}$$

即

$$X_k = A^{-1}[I - (I - AX_0)^{2^k}]$$

根据 $\rho(I - AX_0) < 1$ 可得 $\lim_{k \rightarrow \infty} (I - AX_0)^{2^k} = 0$, 因此

$$\lim_{k \rightarrow \infty} X_k = \lim_{k \rightarrow \infty} A^{-1}[I - (I - AX_0)^{2^k}] = A^{-1}$$

□

松弛技术

$$x^{(k+1)} = (1 - \omega)x^{(k)} + \omega\bar{x}^{(k+1)}$$

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

松弛因子 ω 为 1 时是 Gauss-Seidel 迭代法

Example 14. 用 SOR 迭代法解方程组

$$\begin{cases} 9x_1 - x_2 - x_3 = 7 \\ -x_1 + 10x_2 - x_3 = 8 \\ -x_1 - x_2 + 15x_3 = 13 \end{cases}$$

Solution. 迭代格式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (1 - \omega)x_1^{(k)} + \omega(7 + x_2^{(k)} + x_3^{(k)})/9 \\ x_2^{(k+1)} = (1 - \omega)x_2^{(k)} + \omega(8 + x_1^{(k+1)} + x_3^{(k)})/10 \\ x_3^{(k+1)} = (1 - \omega)x_3^{(k)} + \omega(13 + x_1^{(k+1)} + x_2^{(k+1)})/15 \end{cases}$$

4 矩阵范数

向量的“2-范数”

$$\|\mathbf{X}\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$$

向量的“ ∞ -范数”

$$\|\mathbf{X}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \{|x_i|\}.$$

向量的“1-范数”

$$\|X\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$$

矩阵 1 范数 (列和范数) $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$

矩阵无穷范数 (行和范数) $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$

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

矩阵的 F 范数: $\|A\|_F = \left(\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n a_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$

条件数:

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

Example 15. 设 X 是 n 维向量, A 是 $n \times n$ 阶矩阵。求证:

$$(1) \|X\|_\infty \leq \|X\|_1 \leq n\|X\|_\infty; (2) \frac{1}{\sqrt{n}}\|A\|_F \leq \|A\|_2 \leq \|A\|_F$$

证明. (1) 设 $X = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$, 则 $\|X\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n|$, 因为

$$\|X\|_1 \leq n \max_{1 \leq k \leq n} |x_k| = n\|X\|_\infty \quad \text{及} \quad \|X\|_1 \geq \max_{1 \leq k \leq n} |x_k| = \|X\|_\infty$$

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

(2) 设 $A = (a_{ij})_{n \times n}$, 则 $A^T A = (\sum_{k=1}^n a_{ki} a_{kj})_{n \times n}$, 该矩阵的迹 (主对角元之和) 为

$$\text{tr}(A^T A) = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a_{kj} a_{kj} = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a_{kj}^2 = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n a_{ij}^2 = \|A\|_F^2$$

根据矩阵特征值理论, n 阶方阵 $A^T A$ 的特征值之和等于 $A^T A$ 的迹, 即

$$\sum_{k=1}^n \lambda_k(A^T A) = \text{tr}(A^T A) = \|A\|_F^2$$

所以

$$\begin{aligned} \|A\|_2^2 &= \lambda_{\max}(A^T A) \leq \sum_{k=1}^n \lambda_k(A^T A) = \|A\|_F^2 \\ \|A\|_2^2 &= \lambda_{\max}(A^T A) \geq \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \lambda_k(A^T A) = \frac{1}{n} \|A\|_F^2 \end{aligned}$$

由上两式得

$$\frac{1}{\sqrt{n}}\|A\|_F \leq \|A\|_2 \leq \|A\|_F$$

□

Theorem 7. (初等变分原理) 设 A 为实对称矩阵, 则 x 使得二次函数 $f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x$ 取极小值的充分必要条件是 x 是线性方程组 $Ax = b$ 的解。

证明. **充分性.** 如果 u 是方程组 $Ax = b$ 的解, 则有 $Au = b$, 由矩阵 A 的正定性, 对任意的 $x \in R^n$, 令 $y = x - u$, 有 $y^T A y \geq 0$, 所以

$$f(x) = f(y + u) = \frac{1}{2}(y + u)^T A (y + u) - b^T (y + u)$$

将右边展开得

$$f(x) = \frac{1}{2}y^T Ay + f(u) + (Au - b)^T y$$

所以有 $f(x) \geq f(u)$ 成立。

必要性. 设 u 使二次函数 $f(x)$ 取极小值, 则取任意非零向量 $x \in R^n$, 对任意的 $t \in R$

$$\begin{aligned} f(u+tx) &= \frac{1}{2}(u+tx)^T A(u+tx) - b^T(u+tx) \\ &= \frac{1}{2}u^T Au - b^T u + tx^T(Au - b) + \frac{1}{2}t^2 x^T Ax \\ &= f(u) + tx^T(Au - b) + \frac{1}{2}t^2 x^T Ax \end{aligned}$$

令 $g(t) = f(u+tx)$, 由上式知, 当 $t=0$ 时, $g(0) = f(u)$ 达到极小值, 所以 $g'(0) = 0$, 即

$$x^T(Au - b) = 0$$

由 x 的任意性, 必有 $Au - b = 0$, 故 u 是 $Ax = b$ 的解。 □

最速下降法

第 $k+1$ 步的迭代点为

$$\mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{X}^k - \frac{(\mathbf{g}^k)^T \mathbf{g}^k}{(\mathbf{g}^k)^T \mathbf{H}^k \mathbf{g}^k} \mathbf{g}^k, \quad \mathbf{g}^k = \nabla f(x^k), \quad \mathbf{H} \text{ 为 Hesse 矩阵}$$

5 插值方法

Theorem 8. 若插值结点 x_0, x_1, \dots, x_n 是 $(n+1)$ 个互异点, 则满足插值条件 $P(x_k) = y_k (k = 0, 1, \dots, n)$ 的次数小于等于 n 次的插值多项式

$$P(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n$$

存在而且唯一。

拉格朗日方法

$$\begin{aligned} P(x) &= l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + l_2(x)y_2 \\ l_0(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}, l_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}, l_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \end{aligned}$$

牛顿差商方法

$$P(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \dots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})$$

n 次牛顿插值的误差:

$$R_n(x) = f[x, x_0, x_1, \dots, x_n]w_{n+1}(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}(x)$$

Example 16. 求插值于点 $(-2, -56), (-1, -16), (0, -2), (1, -2), (3, 4)$ 的次数小于等于 4 的牛顿插值多项式。

$$\begin{array}{r}
-2 \quad \underline{-56} \\
-1 \quad -16 \quad \underline{40} \\
0 \quad -2 \quad 27 \quad \underline{-13} \\
1 \quad -2 \quad 18 \quad -11 \quad \underline{2} \\
3 \quad 4 \quad 12 \quad -7 \quad 2 \quad \underline{0}
\end{array}$$

$$\begin{aligned}
P(x) &= -56 + 40(x+2) - 13(x+2)(x+1) + 2(x+2)(x+1)(x) \\
&= -56 + (x+2)(40 + (x+1)(-13 + 2x))
\end{aligned}$$

Solution.

Example 17. 证明

$$1^2 + 2^2 + 3^2 + \cdots + n^2 = n(n+1)(2n+1)/6$$

证明:

$$\begin{array}{r}
1 \quad \underline{1} \\
2 \quad 5 \quad \underline{4} \\
3 \quad 14 \quad 13/2 \quad \underline{5/2} \\
4 \quad 30 \quad 29/3 \quad 17/6 \quad \underline{1/3} \\
5 \quad 55 \quad 27/2 \quad 19/6 \quad 1/3 \quad \underline{0}
\end{array}$$

$$S(n) = 1 + 4(n-1) + 5/2(n-1)(n-2) + 1/3(n-1)(n-2)(n-3)$$

Solution.

n 阶多项式插值误差余项

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

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

三次样条插值方法 (略)

Example 18. 已知 $f(-1) = 1, f(0) = 0, f(1) = 1$ 。求函数在区间 $[-1, 1]$ 上的三次自然样条插值函数。

Solution.

$$S(x) = \begin{cases} a_1 + b_1x + c_1x^2 + d_1x^3, & x \in [-1, 0] \\ a_2 + b_2x + c_2x^2 + d_2x^3, & x \in [0, 1] \end{cases}$$

插值条件

$$a_1 - b_1 + c_1 - d_1 = 1, a_2 + b_2 + c_2 + d_2 = 1, a_1 = 0, a_2 = 0$$

一阶导数连续和二阶导数连续

$$b_1=b_2, c_1=c_2$$

自然边界条件 ($S''(x_0) = 0, S''(x_n) = 0$)

$$2c_1 - 6d_1 = 0, 2c_2 + 6d_2 = 0$$

故问题的解为

$$S(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}x^3 + \frac{3}{2}x^2, & x \in [-1, 0] \\ -\frac{1}{2}x^3 + \frac{3}{2}x^2, & x \in [0, 1] \end{cases}$$

三次埃尔米特插值

考虑两个插值结点的情形, 设 $a \leq x_0 < x_1 \leq b$, 函数 $f(x) \in C^1[a, b]$ 且已知

$$f(x_0) = y_0, f(x_1) = y_1, f'(x_0) = m_0, f'(x_1) = m_1$$

在区间 $[a, b]$ 上求三次插值函数

$$H(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$$

使其满足插值条件

$$H(x_j) = y_j, H'(x_j) = m_j \quad (j = 0, 1) \quad (*)$$

Theorem 9. $H(x)$ 满足插值条件 (*) 的三次埃尔米特插值函数, $H(x)$ 的插值余项为

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

证明. 由插值条件 (*) 知, $R(x_0) = 0, R(x_1) = 0, R'(x_0) = 0, R'(x_1) = 0$, 这表明两个插值结点都是误差余项 $R(x)$ 的二重零点, 故存在 $C(x)$ 使得

$$R(x) = C(x) [(x - x_0)(x - x_1)]^2$$

即

$$f(x) - H(x) = C(x) [(x - x_0)(x - x_1)]^2$$

取 $x \in [a, b]$, 且 x 异于 x_0, x_1 , 设 $t \in (a, b)$, 构造辅助函数

$$F(t) = f(t) - H(t) - C(x) [(t - x_0)(t - x_1)]^2$$

显然 $F(t)$ 有三个零点 x_0, x, x_1 , 其中 x_0, x_1 是二重零点. 由罗尔中值定理知, 存在 $F'(t)$ 的两个零点 t_0, t_1 满足 $x_0 < t_0 < t_1 < x_1$, 而 x_0 和 x_1 也是 $F'(x)$ 的零点, 故 $F'(x)$ 有四个相异零点. 再由罗尔中值定理知, $f''(t)$ 有三个相异零点. 依此类推可得, $F^{(3)}(t)$ 有两个相异零点, 有两个相异零点, $F^{(4)}(t)$ 至少有一个零点. 设 $F^{(4)}(t)$ 的一个零点为 ξ , 即

$$F^{(4)}(\xi) = f^{(4)}(\xi) - H^{(4)}(\xi) - C(x) [(t - x_0)^2(t - x_1)^2]^{(4)} \Big|_{t=\xi} = 0$$

显然 $[(t - x_0)^2(t - x_1)^2]^{(4)} = 4!$, 而 $H(x)$ 是三次多项式, 故 $H^{(4)}(\xi) = 0$,

$$f^{(4)}(\xi) - C(x)4! = 0$$

即

$$C(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}$$

所以

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

□

Example 19. 两次埃尔米特插值的适定性问题. 给定插值条件 $f(x_0) = y_0, f'(x_1) = m_1, f(x_2) = y_2$, 插值结点应满足什么条件能使插值问题有唯一解。

Solution. 设 $H(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$, 那么 $H'(x) = a_1 + 2a_2x$, 根据条件

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ 0 & 1 & 2x_1 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ m_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

上式方程组有唯一解的充分必要条件是行列式不等于零, 即

$$(x_0 - x_2)(2x_1 - x_0 - x_2) \neq 0$$

解得 $x_1 \neq \frac{x_0 + x_2}{2}$

6 数据拟合的最小二乘法

不相容方程 $Ax \neq b$, 最小二乘解:

$$\operatorname{argmin}_x \|Ax - b\|_2^2$$

正规方程:

$$A^T Ax = A^T b$$

离散数据的拟合

$$\begin{array}{cccccc} x & x_1 & x_2 & \cdots & x_m \\ y & y_1 & y_2 & \cdots & y_m \end{array}$$

求拟合函数:

$$y = c_0 + c_1x + \cdots + c_nx^n$$
$$\begin{pmatrix} 1 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \cdots & x_m^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

正规方程:

$$\begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ x_1^n & \cdots & x_m^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \cdots & x_m^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ x_1^n & \cdots & x_m^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

Definition 2. 设 A 为 $m \times m$ 矩阵, 若存在常量 λ 和 $m \times 1$ 阶非零向量 x 使得 $Ax = \lambda x$, 则称 λ 为特征值, x 为相应的特征向量。

特征值和特征向量满足如下关系

$$Ax = \lambda x$$

主特征值: 如果矩阵 A 的某个特征值的模大于其它所有的特征值, 则称此特征值是主特征值, 对应的特征向量是主特征向量。

主特征值如何计算: 假设最大特征向量为 x , 对应的特征值为 λ

$$Ax = \lambda x$$

应用最小二乘问题求解上述超定方程:

$$x^T Ax = \lambda x^T x$$

我们称

$$\lambda = \frac{x^T Ax}{x^T x}$$

Rayleigh 商。

主特征向量: 主特征值对应的特征向量称为主特征向量 (采用幂法计算主特征向量)。

Example 20.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

矩阵的特征多项式为

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} 1 - \lambda & 3 \\ 2 & 2 - \lambda \end{vmatrix} = (\lambda - 4)(\lambda + 1) = 0$$

特征值 4 和 -1 对应的特征向量分别 $[2, 2]$ 和 $[-3, 2]$ 。

矩阵有 n 个不同的特征值, 不同的特征向量线性无关。则特征向量张成整个空间, 任意随机的初始向量均可被特征向量线性表示。

$$x_0 = \begin{bmatrix} -5 \\ 5 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} + 2 \begin{bmatrix} -3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

迭代过程

$$\begin{aligned} x_1 &= Ax_0 = \frac{1}{2} \times 4 \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} -3 \\ 2 \end{bmatrix} \\ x_2 &= A^2 x_0 = \frac{1}{2} \times 4^2 \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} + 2 \begin{bmatrix} -3 \\ 2 \end{bmatrix} \\ x_3 &= A^3 x_0 = \frac{1}{2} \times 4^3 \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} -3 \\ 2 \end{bmatrix} \\ x_4 &= A^4 x_0 = \frac{1}{2} \times 4^4 \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} + 2 \begin{bmatrix} -3 \\ 2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

随着迭代的进行, 主特征向量很快就占统治地位。

【注】：幂法应用于计算模最大的特征值和相应的特征向量。如何计算模最小的特征值和相应的特征向量？

Lemma 2. 记矩阵 A 的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, 则逆矩阵 A^{-1} 的特征值 $1/\lambda_1, 1/\lambda_2, \dots, 1/\lambda_n$.

如果 $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n > 0$, 那么 $1/\lambda_1 < 1/\lambda_2 < \dots < 1/\lambda_n$, 因此计算逆矩阵 A^{-1} 的最大特征值可以得到原矩阵 A 的最小特征值。

7 数值积分与数值微分

7.1 插值型求积公式与代数精度

左矩形积分公式:

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

右矩形积分公式:

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)f(b) - \frac{f'(\eta)}{2}(b-a)^2$$

中矩形积分公式:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)(x - \frac{a+b}{2}) + \frac{f''(\xi)}{2}(x - \frac{a+b}{2})^2 dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{f''(\eta)}{24}(b-a)^3$$

取 $x_0 = a, x_1 = b$ 构造线性插值函数

$$f(x) = \frac{x-b}{a-b}f(a) + \frac{x-a}{b-a}f(b) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)$$

梯形积分公式:

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

误差

$$\begin{aligned} R[f] &\triangleq \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx \\ &= \frac{f''(\eta)}{2} \int_a^b (x-a)(x-b)dx \\ &= -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta) \end{aligned}$$

取 $x_0 = a, x_1 = \frac{a+b}{2}, x_2 = b$ 构造拉格朗日二次插值函数

$$f(x) = \sum_{j=0}^2 l_j(x)f(x_j) + \frac{f'''(\xi)}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$$

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \int_a^b l_0(x)dx f(x_0) + \int_a^b l_1(x)dx f(x_1) + \int_a^b l_2(x)dx f(x_2) \\ &+ \int_a^b \frac{f'''(\xi)}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)dx \\ &= A_0f(x_0) + A_1f(x_1) + A_2f(x_2) + R[f] \\ A_0 &= \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}dx = \frac{1}{6}(b-a) \\ A_1 &= \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}dx = \frac{4}{6}(b-a) \\ A_2 &= \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}dx = \frac{1}{6}(b-a) \end{aligned}$$

Simpson 积分公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0f(x_0) + A_1f(x_1) + A_2f(x_2) = \frac{b-a}{6}[1f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + 1f(b)]$$

基于等距节点 $x_j(j=0, 1, \dots, n)$ 构造的插值型求积公式称为 n 阶牛顿-柯茨积分公式

$$\text{Newton - Cotes } \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=0}^n A_j f(x_j), A_j = \int_a^b l_j(x)dx$$

Definition 3. 对多项式 $P(x) = 1, x, \dots, x^n$ 积分公式都精确成立

$$\int_a^b P(x)dx = \sum_{j=0}^n A_j P(x_j)$$

则称该数值积分公式具有 n 阶的代数精度。

【注】: 对多项式 $P(x) = 1, x, \dots, x^n$ 积分公式都精确成立, 则对任意 n 次多项式成立。

Example 21. 试设计积分公式

$$\int_0^1 f(x)dx = A_0f(0) + A_1f(\frac{1}{2}) + A_2f(1)$$

Solution. 令原式对于 $f(x) = 1, x, x^2$ 准确成立, 则满足

$$\begin{aligned} A_0 + A_1 + A_2 &= \int_0^1 1dx = 1 \\ 0A_0 + \frac{1}{2}A_1 + 1A_2 &= \int_0^1 xdx = \frac{1}{2} \\ 0A_0 + \frac{1}{4}A_1 + 1A_2 &= \int_0^1 x^2dx = \frac{1}{3} \end{aligned}$$

解得

$$A_0 = A_2 = \frac{1}{6}, A_1 = \frac{4}{6}$$

则所求公式为

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{6}[1f(0) + 4f(\frac{1}{2}) + 1f(1)]$$

Example 22. 研究 *Simpson* 积分公式的代数精度。

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

Solution.

$$\begin{aligned} \int_a^b 1dx &= \frac{b-a}{6}[1 + 4 + 1] \\ \int_a^b xdx &= \frac{b^2 - a^2}{2} = \frac{b-a}{6}[a + 4(\frac{a+b}{2}) + b] \\ \int_a^b x^2dx &= \frac{b^3 - a^3}{3} = \frac{b-a}{6}[a^2 + 4(\frac{a+b}{2})^2 + b^2] \\ \int_a^b x^3dx &= \frac{b^4 - a^4}{4} = \frac{b-a}{6}[a^3 + 4(\frac{a+b}{2})^3 + b^3] \end{aligned}$$

对 $f(x) = x^4$ 不成立, 则 *Simpson* 积分公式代数精度为 3。

Example 23. 试设计

$$\int_0^1 f(x)dx \approx A_0f(\frac{1}{4}) + A_1f(\frac{2}{4}) + A_2f(\frac{3}{4})$$

的积分公式, 使其代数精度尽可能高, 并指出其代数精度的阶。

Solution. 令原式对于 $f(x) = 1, x, x^2$ 准确成立, 则满足

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 1 \\ \frac{1}{4}A_0 + \frac{1}{2}A_1 + \frac{3}{4}A_2 = \frac{1}{2} \\ \frac{1}{16}A_0 + \frac{1}{4}A_1 + \frac{9}{16}A_2 = \frac{1}{3} \end{cases}$$

解得

$$A_0 = A_2 = \frac{2}{3}, A_1 = -\frac{1}{3}$$

积分公式为

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{2}{3}f(\frac{1}{4}) - \frac{1}{3}f(\frac{2}{4}) + \frac{2}{3}f(\frac{3}{4})$$

对 $f(x) = x^3$ 公式成立而对 $f(x) = x^4$ 公式不成立。

故设计的积分公式仅有三阶代数精度。

7.2 高斯型求积公式

如果积分节点可以自由选择

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0f(x_0) + \cdots + A_nf(x_n)$$

高斯型求积公式与普通插值型求积公式的区别主要在于求积节点的选取服从了使代数精度最大的原则。

插值型求积公式, 固定求积节点确定求积系数, 所得公式代数精度至少为 n 阶, 高斯型求积公式, 将求积节点也作为优化求积公式的参数, 通过选取最佳的求积节点, 使插值型求积公式的代数精度至少为 $2n + 1$ 阶。

Example 24. 构造代数精度为 3 的数值积分公式

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

Solution. 由于有 4 个待定系数, 按代数精度, 取 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 使所求数值求积公式对 $f(x)$ 的余项为零, 可以建立四个方程

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \frac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = 0 \end{cases}$$

解得

$$x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad A_0 = 1, \quad A_1 = 1$$

于是得到求积公式

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

【注】: 它至少有 3 次代数精度, 而同样有两个求积节点的梯形公式只有 1 次代数精度。

Definition 4. 选互异的求积结点 x_0, x_1, \dots, x_n , 使插值型求积公式的代数精度为 $2n+1$, 则称该求积公式为高斯型求积公式, 称这些求积结点为高斯点。

两点 Gauss 公式

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

三点 Gauss 公式

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

【注】: 对于 $[a, b]$ 区间上的定积分, 构造变换

$$x(t) = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}, \quad t \in [-1, 1]$$

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)dt$$

Example 25. 利用两点 Gauss 公式计算 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$

Solution. 因为积分区间是 $[0, 1]$, 先作变换 $x = 0.5(t+1)$, 把积分化为 $[-1, 1]$ 上的积分有

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx = \int_{-1}^1 \frac{\sin 0.5(t+1)}{t+1} dt$$

取 $t_0 = \frac{-1}{\sqrt{3}} \approx -0.57735$, $t_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0.57735$, 用两点高斯-勒让德求积公式有

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \approx \frac{1}{2} \left[\frac{\sin 0.5(t_0+1)}{0.5(t_0+1)} + \frac{\sin 0.5(t_1+1)}{0.5(t_1+1)} \right] \approx 0.946$$

7.3 数值微分

一阶导数近似：一阶前向差分公式

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

一阶导数近似：一阶后向差分公式

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

一阶导数近似：两点中心差分公式

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

【注】：向前差商和向后差商截断误差为 $O(h)$ ，通常称为具有一阶精度，中心差商截断误差为 $O(h^2)$ ，通常称为具有二阶精度。

松弛法：目标值 Q 有两个精度相当的近似值 F_1 和 F_2 ，改善精度的一种简便而有效的办法是，取两者的某种加权平均值作为改进值，即令

$$Q = (1 - \omega)F_1 + \omega F_2$$

Example 26.

$$F_1(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{h^2}{6} f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{5!} f^{(5)}(x) + \dots$$

用 $\frac{h}{2}$ 代替 h

$$F_1(h/2) = \frac{f(x+h/2) - f(x-h/2)}{h} = f'(x) + \frac{h^2}{6 \times 2^2} f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{5! \times 2^4} f^{(5)}(x) + \dots$$

可以得

$$F_2(h) = \frac{4F_1(\frac{h}{2}) - F_1(h)}{4-1} = f'(x) + O(h^4)$$

上式具有 4 阶精度。

8 常微分方程数值解

常微分方程指含有未知函数及其导数的方程

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

将 x_n 代入方程

$$y'(x_n) = f(x_n, y(x_n))$$

思路一：数值微分，用前向差分格式代替其中的导数项

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

若用 $y(x_n)$ 的近似值 y_n 代入上式，并记所得结果为 y_{n+1} 。

思路二：数值积分

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x) dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx$$
$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x) dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx$$

利用左矩形积分公式：

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \approx hf(x_n, y(x_n))$$

Euler 公式：

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

隐式 Euler 公式：

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

梯形公式：

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

综合使用这两种方法，先用 Euler 公式求得一个初步的近似值，称为预报值；预报值的精度不高，代入右端的 y_{n+1} 计算校正值。

预报-校正方法 (改进 Euler 公式)：

$$\begin{array}{ll} \text{预报} & \tilde{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ \text{校正} & y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \tilde{y}_{n+1})] \end{array}$$

Definition 5. 假定 x_n 之前的计算没有误差，即 $y_n = y(x_n)$ ，则从 x_n 到 x_{n+1} 的局部截断误差

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$$

若局部截断误差为 $O(h^{p+1})$ ，则方法具有 p 阶精度。

Example 27.

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= y(x_{n+1}) - y_{n+1} \\ &= y(x_n + h) - (y_n + hf(x_n, y(x_n))) \\ &= y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2}y''(\xi) - y_n - hy'(x_n) \\ &= \frac{h^2}{2}y''(\xi) + O(h^3) \end{aligned}$$

Euler 公式的局部截断误差为 $O(h^2)$ ，则 Euler 公式具有 1 阶精度。

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= y(x_{n+1}) - y_{n+1} \\ &= y(x_n + h) - y(x_n) - \frac{h}{2}[y'(x_n) + y'(x_{n+1})] \\ &= hy'(x_n) + \frac{h^2}{2}y''(x_n) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_n) - \frac{h}{2}[y'(x_n) + y'(x_n) + hy''(x_n) + \frac{h^2}{2}y'''(x_n)] + O(h^4) \\ &= -\frac{h^3}{12}y'''(x_n) + O(h^4) \end{aligned}$$

梯形方法具有 2 阶精度

【注】：关于高阶微分方程的初值问题，原则上总可以归结为一阶方程组求解。

Example 28. 将高阶常微分方程 $y''' - y' = t$ 转换为常微分方程组，其中 $y(0) = y'(0) = y''(0) = 0$ ，并推导求解的 Euler 公式。

Solution.

$$\begin{cases} y' = p \\ y(0) = 0 \\ p' = q \\ p(0) = 0 \\ q' = p + t \\ q(0) = 0 \end{cases}$$

即高阶常微分方程问题化为微分方程组的初值问题。

9 部分课后题

9.1 非线性方程求解

Example 29. 证明方程 $1 - x - \sin x = 0$ 在区间 $[0, 1]$ 上有一根。使用二分法求误差不大于 $\frac{1}{2} \times 10^{-4}$ 根需二分多少次？

Solution. 令 $f(x) = 1 - x - \sin x$, $f(0) = 1, f(1) = -\sin 1$, 于是 $f(0)f(1) < 0$, 故所给方程在区间 $[0, 1]$ 上必有根。又因为

$$f'(x) = -1 - \cos x$$

所以，函数 $f(x)$ 在区间 $[0, 1]$ 内单调。故，方程在区间 $[0, 1]$ 内只有一个根。

利用二分法收敛定理，由

$$\frac{1-0}{2^{n+1}} \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

得 $2^n \geq 10^4$, 所以二分法求根至少需 14 次二分计算能满足误差要求。

Example 30. 给出求 $x_n = \sqrt{2 + \sqrt{2 + \cdots + \sqrt{2}}}$ 的迭代格式，并证明 $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = 2$ 。

Solution. 取初值： $x_1 = \sqrt{2}$ ，迭代格式： $x_{n+1} = \sqrt{2 + x_n}$ ($n = 1, 2, \dots$)

首先证明数列有上界。显然， $x_1 < 2$ ，设对 k ，有 $x_k < 2$ 成立，则对于 $(k+1)$ 有

$$x_{k+1} = \sqrt{2 + x_k} < \sqrt{2 + 2} = 2$$

由数学归纳法知，对任意 n 有 $x_n < 2$ 。故数列有上界。

现证明数列单调。由

$$\frac{x_{n+1}}{x_n} = \frac{\sqrt{2 + x_n}}{x_n} > \frac{\sqrt{x_n + x_n}}{x_n} = \sqrt{\frac{2}{x_n}} > 1$$

知，数列单调增加。由极限定理，该数列必有极限，设为 x^* ，由

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_{n+1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{2 + x_n}$$

得

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

化为二次方程，求出两个根分别为：-1 和 2，舍去负根，得 $x^* = 2$

Example 31. 应用牛顿迭代法于方程 $x^3 - a = 0$ ，导出求立方根 $\sqrt[3]{a}$ 的迭代公式，并讨论其收敛阶。

Solution. 令 $f(x) = x^3 - a$ ，则牛顿迭代公式

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

故迭代函数为

$$\varphi(x) = \frac{2}{3}x + \frac{a}{3x^2}$$

而

$$\varphi'(x) = \frac{2}{3} - \frac{2}{3} \frac{a}{x^3}, \quad \varphi''(x) = 2 \frac{a}{x^4}$$

将 $x^* = \sqrt[3]{a}$ 代入，得 $\varphi'(x^*) = 0$ ， $\varphi''(x^*) = 2/\sqrt[3]{a}$ ，二阶收敛。

Example 32. 证明由迭代格式 $x_{n+1} = \frac{x_n}{2} + \frac{1}{x_n}$ ， $(n = 0, 1, \dots)$ 产生的迭代序列 $\{x_n\}$ 对任意的 $x_0 > 0$ ，均收敛于 $\sqrt{2}$ 。

Solution. 对迭代格式，得 $x_{n+1} = \frac{1}{2x_n}(x_n^2 + 2)$ ，等式两端同减 $\sqrt{2}$ ，并进行配方，得

$$x_{n+1} - \sqrt{2} = \frac{1}{2x_n} (x_n - \sqrt{2})^2$$

同理可得

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

将上面两式相除，得

$$\frac{x_{n+1} - \sqrt{2}}{x_{n+1} + \sqrt{2}} = \frac{(x_n - \sqrt{2})^2}{(x_n + \sqrt{2})^2}$$

反复递推，得

$$\frac{x_{n+1} - \sqrt{2}}{x_{n+1} + \sqrt{2}} = \frac{(x_n - \sqrt{2})^2}{(x_n + \sqrt{2})^2} = \left[\frac{x_{n-1} - \sqrt{2}}{x_{n-1} + \sqrt{2}} \right]^{2^2} = \dots = \left[\frac{x_0 - \sqrt{2}}{x_0 + \sqrt{2}} \right]^{2^{n+1}}$$

令

$$q = \frac{x_0 - \sqrt{2}}{x_0 + \sqrt{2}}$$

则有

$$\frac{x_n - \sqrt{2}}{x_n + \sqrt{2}} = q^{2^n}$$

化简，得

$$x_n = \sqrt{2} \frac{1 + q^{2^n}}{1 - q^{2^n}}$$

对任意的 $x_0 > 0$ ，由于 $|q| < 1$ ，故迭代序列收敛于 $\sqrt{2}$ 。

Example 33. 设 x^* 是非线性方程 $f(x) = 0$ 的单根, 证明在牛顿迭代法中, 有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_{n+1} - x^*}{(x_n - x^*)^2} = \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}$$

Solution. 由于 x^* 是 $f(x) = 0$ 的单根, 故当 $x_n \approx x^*$ 时, $f'(x_n) \neq 0$, 利用 *Taylor* 展开式

$$f(x) = f(x_n) + (x - x_n)f'(x_n) + \frac{(x - x_n)^2}{2}f''(\xi_n)$$

其中, ξ_n 介于 x 和 x_n 之间, 上式中取 $x = x^*$ 时, 由牛顿迭代公式

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

得

$$x_{n+1} - x^* = (x^* - x_n)^2 \frac{f''(\xi_n)}{2f'(x_n)}$$

由于

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x^*, \lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = x^*$$

所以

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_{n+1} - x^*}{(x_n - x^*)^2} = \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}$$

上面这个式子展示了牛顿迭代法的二阶收敛性。

9.2 解线性方程组的直接法

Example 34. 设 $B \in R^{n \times n}$, I 是 n 阶单位矩阵, 如果 $\|B\| < 1$, 证明, $\|I - (I - B)^{-1}\| \leq \frac{\|B\|}{1 - \|B\|}$

证明. 首先证明不等式: $\|(I - B)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|B\|}$

由 $(I - B)(I - B)^{-1} = I$, 得

$$(I - B)^{-1} - B(I - B)^{-1} = I$$

移项, 得

$$(I - B)^{-1} = I + B(I - B)^{-1}$$

两边取范数, 得

$$\|(I - B)^{-1}\| \leq \|I\| + \|B\| \|(I - B)^{-1}\|$$

由于 $\|I\| = 1$, 整理上面不等式, 得

$$\|(I - B)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|B\|} \quad (*)$$

仍由 $(I - B)(I - B)^{-1} = I$, 得

$$(I - B)^{-1} - B(I - B)^{-1} = I$$

移项, 得

$$I - (I - B)^{-1} = -B(I - B)^{-1}$$

两边取范数，得

$$\|I - (I - B)^{-1}\| \leq \|B\| \|(I - B)^{-1}\|$$

由不等式 (*) 得

$$\|I - (I - B)^{-1}\| \leq \frac{\|B\|}{1 - \|B\|}$$

□

9.3 线性方程组的迭代解法

Example 35. 设 $A = (a_{ij})_{2 \times 2}$ 为二阶矩阵，且 $a_{11}a_{22} \neq 0$ ，试证明求解方程组 $Ax = b$ 的 Jacobi 迭代和 Gauss-Seidel 迭代法同时收敛或发散。

证明. 设 $A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$ ，则

$$B_J = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 \end{bmatrix}, \quad B_{G-S} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} \\ 0 & \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}a_{22}} \end{bmatrix}$$

Jacobi 迭代法

$$|\lambda I - B_J| = \begin{vmatrix} \lambda & \frac{a_{12}}{a_{11}} \\ \frac{a_{21}}{a_{22}} & \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}a_{22}} \rightarrow \lambda^2 = \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}a_{22}}$$

所以

$$\rho(B_J) < 1 \Leftrightarrow \left| \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}a_{22}} \right| < 1$$

Gauss-Seidel 迭代法

$$|\lambda I - B_{G-S}| = \begin{vmatrix} \lambda & \frac{a_{12}}{a_{11}} \\ 0 & \lambda - \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}a_{22}} \end{vmatrix} = \lambda \left(\lambda - \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}a_{22}} \right) \rightarrow \lambda = 0 \text{ 或 } \lambda = \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}a_{22}}$$

所以

$$\rho(B_J) < 1 \Leftrightarrow \left| \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}a_{22}} \right| < 1$$

因此，两种迭代法同时收敛或同时发散。

□

Example 36. 设线性方程组 $Ax = b$ 的系数矩阵为

$$A = \begin{bmatrix} a & 1 & 3 \\ 1 & a & 2 \\ -3 & 2 & a \end{bmatrix}$$

试求能使 Jacobi 迭代收敛的 a 的取值范围。

Solution. 当 $a \neq 0$ 时 Jacobi 迭代矩阵为

$$B_J = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{a} & -\frac{3}{a} \\ -\frac{1}{a} & 0 & -\frac{2}{a} \\ \frac{3}{a} & -\frac{2}{a} & 0 \end{bmatrix}, \quad |\lambda I - B_J| = \begin{vmatrix} \lambda & \frac{1}{a} & \frac{3}{a} \\ \frac{1}{a} & \lambda & \frac{2}{a} \\ -\frac{3}{a} & \frac{2}{a} & \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 0, \lambda_{2,3} = \pm \frac{2i}{a}$$

当 $a < -2$ 或 $a > 2$ 时 Jacobi 迭代法收敛。

Example 37. 有方程组 $Ax = b$, 其中 A 为对称正定阵, 且有迭代公式

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} + \omega (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{X}^{(k)}) \quad (k = 1, 2, \dots)$$

讨论使迭代序列收敛的 ω 的取值范围.

Solution.

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

迭代矩阵为 $B = I - \omega A$, 设 A 的特征值为 λ , 因 A 对称正定, 故 $\lambda > 0$, 矩阵 B 的特征值为 $\mu = 1 - \omega\lambda$, 由 $|\mu| < 1$ 解得: $0 < \omega < 2/\rho(A)$

9.4 数据插值方法

Example 38. 已知函数 $y = f(x)$ 的数据如下表

x	-1	0	1
y	-1	0	1
y'		0	

求一个次数不超过三的埃尔米特插值多项式满足上面表格。

Solution. 由于 $x = 0$ 是二重零点, 令 $H_3(x) = x^2(ax + b)$, 又由 $H_3(-1) = -1, H_3(1) = 1$ 得方程组

$$\begin{cases} b - a = -1 \\ a + b = 1 \end{cases}$$

解得 $a = 1, b = 0$, 所以 $H_3(x) = x^3$

Example 39. 求一个次数不高于 4 次的多项式 $P(x)$, 使它满足: $P(0) = 0, P'(0) = 0, P(1) = 1, P'(1) = 1, P(2) = 1$, 并写出其余项表达式.

Solution. 由题意 $P(x) = x^2(ax^2 + bx + c)$, 由插值条件得方程组

$$\begin{cases} a + b + c = 1 \\ 4a + 3b + 2c = 1 \\ 4(4a + 2b + c) = 1 \end{cases}$$

解得 $a = 1/4, b = -3/2, c = 9/4$, 所以

$$P(x) = x^2 \left(\frac{1}{4}x^2 - \frac{3}{2}x + \frac{9}{4} \right)$$

插值余项为 $R(x) = \frac{1}{5!}f^{(5)}(\xi)x^2(x-1)^2(x-2)$

Example 40. 考虑二元函数的双线性插值. 已知二元函数 $u(x, y)$ 在四个点 $P_1(x_1, y_1), P_2(x_2, y_1), P_3(x_2, y_2), P_4(x_1, y_2)$ 的函数值为 u_1, u_2, u_3, u_4 , 试推导双线性插值函数

$$u_h(x, y) = a + bx + cy + dxy$$

的表达式。

Solution. 令 $w = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}, v = \frac{y - y_1}{y_2 - y_1}$, 则利用基函数得

$$u_h(w, v) = (1 - w)(1 - v)u_1 + w(1 - v)u_2 + wvu_3 + (1 - w)vu_4$$

所以, 有

$$\begin{aligned} u_h(x, y) &= \frac{(x_2 - x)(y_2 - y)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}u_1 + \frac{(x - x_1)(y_2 - y)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}u_2 \\ &\quad + \frac{(x - x_1)(y - y_1)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}u_3 + \frac{(x_2 - x)(y - y_1)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}u_4 \end{aligned}$$

Example 41. 考虑平面上三角形区域上的线性插值问题. 设已知平面三角形域三个顶点 P_1, P_2, P_3 处的函数值分别为 $Z_1 = f(x_1, y_1), Z_2 = f(x_2, y_2), Z_3 = f(x_3, y_3)$, 求线性函数 $P(x, y) = ax + by + c$ 使其满足条件:

$$P(x_1, y_1) = Z_1, P(x_2, y_2) = Z_2, P(x_3, y_3) = Z_3$$

Solution. 借用拉格朗日插值基函数的思想, 设

$$P(x, y) = \ell_1(x, y)Z_1 + \ell_2(x, y)Z_2 + \ell_3(x, y)Z_3$$

用行列式性质可构造出基函数如下

$$\ell_1(x, y) = \frac{1}{D} \begin{vmatrix} x & y & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{vmatrix}, \quad \ell_2(x, y) = \frac{1}{D} \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x & y & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{vmatrix}, \quad \ell_3(x, y) = \frac{1}{D} \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x & y & 1 \end{vmatrix}$$

显然, 三个基函数分别满足插值条件

$$\ell_1(x_1, y_1) = 1, \ell_1(x_2, y_2) = 0, \ell_1(x_3, y_3) = 0$$

$$\ell_2(x_1, y_1) = 0, \ell_2(x_2, y_2) = 1, \ell_2(x_3, y_3) = 0$$

$$\ell_3(x_1, y_1) = 0, \ell_3(x_2, y_2) = 0, \ell_3(x_3, y_3) = 1$$

Example 42. 利用牛顿插值公式推导 3 次幂和公式: $P(n) = \sum_{k=1}^n k^3$

Solution. 构造差商表

n	$P(n)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商	四阶差商	五阶差商
1	1					
2	9	8				
3	36	27	19/2			
4	100	64	37/2	3		
5	225	125	61/2	4	1/4	
6	441	216	91/2	5	1/4	0
7	784	343	127/2	6	1/4	0

由于五阶以上的差商全部为零, 根据牛顿插值公式, 得

$$\begin{aligned} P(n) &= 1 + 8(n - 1) + \frac{19}{2}(n - 1)(n - 2) + 3(n - 1)(n - 2)(n - 3) \\ &\quad + \frac{1}{4}(n - 1)(n - 2)(n - 3)(n - 4) \end{aligned}$$

整理, 得

$$p(n) = \left[\frac{n(n+1)}{2} \right]^2$$

9.5 数据拟合

Example 43. 用最小二乘法求解超定方程组

$$\begin{cases} 2x + 4y = 11 \\ 3x - 5y = 3 \\ x + 2y = 6 \\ 4x + 2y = 14 \end{cases}$$

Solution. 超定方程组的矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 3 & -5 \\ 1 & 2 \\ 4 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ 3 \\ 6 \\ 14 \end{bmatrix}$$

将方程两端同乘以系数矩阵的转置矩阵, 可得正规方程组

$$\begin{bmatrix} 30 & 3 \\ 3 & 49 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 93 \\ 69 \end{bmatrix}$$

解得 $x = 2.9774, y = 1.2259$.

Example 44. 求 a, b 使 $\int_0^{\pi/2} [ax + b - \sin x]^2 dx$ 最小。

Solution. 令 $L(a, b) = \int_0^{\pi/2} [ax + b - \sin x]^2 dx$, 分别对 a, b 求偏导, 然后令偏导等于零, 即

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial a} &= 2 \int_0^{\pi/2} x [ax + b - \sin x] dx = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial b} &= 2 \int_0^{\pi/2} [ax + b - \sin x] dx = 0 \end{aligned}$$

解关于 a, b 的二元一次方程即可。

9.6 数值积分与数值微分

Example 45. 对给定的结点 x_0, x_1 , 插值型求积公式为

$$\int_a^b f(x) dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

试证明: 求积系数为

$$A_0 = \frac{b-a}{x_1-x_0} \left(x_1 - \frac{a+b}{2} \right), \quad A_1 = \frac{b-a}{x_1-x_0} \left(\frac{a+b}{2} - x_0 \right)$$

证明.

$$A_0 = \int_a^b \frac{x_1-x}{x_1-x_0} dx = \frac{1}{x_1-x_0} \left[(b-a)x_1 - \frac{1}{2}(b^2-a^2) \right] = \frac{b-a}{x_1-x_0} \left(x_1 - \frac{a+b}{2} \right)$$

$$A_1 = \int_a^b \frac{x-x_0}{x_1-x_0} dx = \frac{1}{x_1-x_0} \left[\frac{1}{2}(b^2-a^2) - (b-a)x_0 \right] = \frac{b-a}{x_1-x_0} \left(\frac{a+b}{2} - x_0 \right)$$

□

Example 46. 确定下列求积公式中的待定参数, 使其代数精度尽可能高, 并指明所构造出的求积公式所具有的代数精度。

$$\int_{-h}^h f(x) dx \approx A_{-1}f(-h) + A_0f(0) + A_1f(h)$$

Solution. 将 $f(x) = 1, x, x^2$, 分别代入求积公式, 并令其左、右相等

$$\begin{cases} A_{-1} + A_0 + A_1 = 2h \\ -h(A_{-1} - A_1) = 0 \\ h^2(A_{-1} + A_1) = 2h^2/3 \end{cases}$$

解得 $A_{-1} = A_1 = \frac{1}{3}h, A_0 = \frac{4}{3}h$, 所得求积公式至少具有 2 阶代数精度。又因为

$$\int_{-1}^1 x^3 dx = \frac{h}{3}(-h)^3 + \frac{h}{3}h^3, \int_{-1}^1 x^4 dx \neq \frac{h}{3}(-h)^4 + \frac{h}{3}h^4$$

故求积公式

$$\int_{-h}^h f(x) dx \approx \frac{h}{3}[f(-h) + 4f(0) + f(h)]$$

具有 3 阶代数精度。

Example 47. 推导下列三种矩形求积公式

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= (b-a)f(a) + \frac{f'(\eta)}{2}(b-a)^2 \\ \int_a^b f(x) dx &= (b-a)f(b) - \frac{f'(\eta)}{2}(b-a)^2 \\ \int_a^b f(x) dx &= (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{f''(\eta)}{24}(b-a)^3 \end{aligned}$$

Solution. 左矩形积分公式:

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

同理可得右矩形积分公式。

由泰勒中值定理

$$f(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \left(x - \frac{a+b}{2}\right) f'\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{2} \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 f''(\xi)$$

积分, 得

$$\int_a^b f(x) dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{2} \int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 f''(\xi) dx$$

由积分第二中值定理

$$\begin{aligned} \int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 f''(\xi) dx &= f''(\eta) \int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx = \frac{1}{12} f''(\eta)(b-a)^3 \\ \int_a^b f(x) dx &= (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{f''(\eta)}{24}(b-a)^3 \end{aligned}$$

Example 48. 证明求积公式

$$\int_1^3 f(x)dx \approx \frac{1}{9}[5f(2 - \sqrt{3/5}) + 8f(2) + 5f(2 + \sqrt{3/5})]$$

具有 5 次代数精度。

证明. 令 $x = t + 2$, 则

$$\int_1^3 f(x)dx = \int_{-1}^1 f(t+2)dt = \int_{-1}^1 f(x+2)dx$$

我们知道, 三点 Gauss 公式

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \frac{5}{9}f(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f(\sqrt{\frac{3}{5}})$$

具有 5 次代数精度, 因此

$$\int_1^3 f(x)dx = \int_{-1}^1 f(x+2)dx \approx \frac{1}{9}[5f(2 - \sqrt{3/5}) + 8f(2) + 5f(2 + \sqrt{3/5})]$$

也具有 5 次代数精度。 □

Example 49. 取 $h = (b - a)/2$, 令 $x_0 = a, x_1 = a + h, x_2 = a + 2h = b$ 。求证:

$$\int_a^b (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) dx = 0$$

Solution. 引入变换 $x = a + th$, 则

$$\int_a^b (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) dx = h^4 \int_0^2 t(t-1)(t-2)dt$$

令 $t = u + 1$, 由于奇函数在对称区间上积分为零, 故有

$$\int_0^2 t(t-1)(t-2)dt = \int_{-1}^1 (u+1)u(u-1)du = 0$$

所以 $\int_a^b (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) dx = 0$

Example 50. 推导数值求导公式

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{12h} [f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)]$$

的截断误差。

Solution. 由 Taylor 级数, 得

$$f(x_0 + h) = \sum_{k=0}^4 \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x_0) + O(h^5)$$
$$f(x_0 - h) = \sum_{k=0}^4 (-1)^k \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x_0) + O(h^5)$$

两式相减, 得

$$\frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} = f'(x_0) + \frac{h^2}{6}f^{(3)}(x_0) + O(h^4)$$

取 $2h$ 代替 h , 得

$$\frac{f(x_0+2h) - f(x_0-2h)}{4h} = f'(x_0) + \frac{4 \times h^2}{6}f^{(3)}(x_0) + O(h^4)$$

将前一式乘 4 减去第二式, 整理得

$$\frac{8}{4h}[f(x_0+h) - f(x_0-h)] - \frac{1}{4h}[f(x_0+2h) - f(x_0-2h)] = 3f'(x_0) + O(h^4)$$

所以

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}[f(x_0-2h) - 8f(x_0-h) + 8f(x_0+h) - f(x_0+2h)] + O(h^4)$$

即该数值求导公式的截断误差为: $O(h^4)$

9.7 常微分方程数值解

Example 51. 试建立求解初值问题

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = a \end{cases}$$

的如下差分格式:

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

Solution. 利用线性插值公式, 得

$$f(x, y) \approx \frac{1}{h}[(x_n - x)f_{n-1} + (x - x_{n-1})f_n]$$

积分, 得

$$\begin{aligned} \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx &\approx \frac{1}{h} \left[\int_{x_n}^{x_{n+1}} (x_n - x) dx f_{n-1} + \int_{x_n}^{x_{n+1}} (x - x_{n-1}) dx f_n \right] \\ &= h \left[-\frac{1}{2}f_{n-1} + \frac{3}{2}f_n \right] \end{aligned}$$

所以, 有

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

Example 52. 证明

$$y_{n+1} = \frac{1}{3}(4y_n - y_{n-1}) + \frac{2}{3}hy'_{n+1}$$

是一阶公式.

Solution. 由于 $y(x_{n+1}) - y_{n+1} = y(x_{n+1}) - \frac{1}{3}(4y_n - y_{n-1}) - \frac{2}{3}hy'_{n+1}$, 由 Taylor 展开式, 得

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

$$y(x_{n-1}) = y(x_n) - hy'(x_n) + \frac{1}{2}h^2y''(x_n) + O(h^3)$$

$$y'(x_{n+1}) = y'(x_n) + hy''(x_n) + O(h^2)$$

代入局部截断误差表达式, 得

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = \frac{2}{3}hy'(x_n) + \frac{2}{3}h^2y''(x_n) - \frac{2}{3}hy'_{n+1} + O(h^3)$$

显然 $T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1} = O(h^2)$, 所以是一阶公式。

Example 53. 就初值问题 $y' = ax + b$, $y(0) = 0$ 导出改进欧拉方法的近似解的表达式, 并与准确解 $y = \frac{1}{2}ax^2 + bx$ 相比较。

Solution. 由改进欧拉方法

$$y_{n+1} = y_n + 0.5h[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n))]$$

得

$$y_{n+1} = y_n + 0.5h[(ax_n + b) + (ax_{n+1} + b)]$$

将 $x_n = nh$ 代入, 得

$$y_{n+1} = y_n + 0.5a(2n+1)h^2 + bh$$

对上式两端做求和运算

$$\sum_{n=0}^{N-1} y_{n+1} = \sum_{n=0}^{N-1} y_n + 0.5ah^2 \sum_{n=0}^{N-1} (2n+1) + b(Nh)$$

化简, 并注意 $y(0) = 0$, 得

$$y_N = 0.5ah^2N^2 + b(Nh) = 0.5a(x_N)^2 + b(x_N)^2$$

即

$$y_n = \frac{1}{2}ax_n^2 + bx_n, \quad y(x_n) = \frac{1}{2}ax_n^2 + bx_n$$

所以, 改进欧拉公式所得数值解与原问题的解析解相同。

Example 54. 非线性微分方程

$$y'' + \mu(y^2 - 1)y' + y = 0$$

引入新变量

$$y_1 = y, \quad y_2 = y' + \mu\left(\frac{y^3}{3} - y\right)$$

试利用新变量推导一阶常微分方程组。

Solution. 对引入的新变量求导数, 得

$$y'_1 = y', \quad y'_2 = y'' + \mu(y^2 - 1)y'$$

代入原微分方程 $y'' + \mu(y^2 - 1)y' + y = 0$ 得

$$\begin{cases} y'_1 = y_2 - \mu(y_1^3/3 - y_1) \\ y'_2 = -y_1 \end{cases}$$

Example 55. 道森 (Dawson) 积分是一个积分上限函数

$$f(x) = \exp(-x^2) \int_0^x \exp(t^2) dt$$

试找出 $f'(x)$ 与 $f(x)$ 的关系, 将求该函数值的计算转化为一个常微分方程初值问题

Solution. 令 $y = f(x)$, 则将 $f(x) = \exp(-x^2) \int_0^x \exp(t^2) dt$ 两端对自变量求导数可得

$$\begin{aligned} f'(x) &= -2x \exp(-x^2) \int_0^x \exp(t^2) dt + \exp(-x^2) \exp(x^2) \\ &= -2xf(x) + 1 \end{aligned}$$

由定积分性质, 显然有 $f(0) = 0$ 。所以, 函数 $y = f(x)$ 满足常微分方程初值问题

$$\begin{cases} y' = 1 - 2xy \\ y(0) = 0 \end{cases}$$