

数值分析

主讲：徐尚进

(广西大学数学与信息科学学院)

第一章 绪 论

§1 对象与特点

数值分析也称 **计算方法**，**数值逼近**，是研究
用计算机解决数学问题的数值方法及理论。

内容主要有：函数的数值逼近，数值微积分，常微分方程数值解等，
方程求根，线性方程组的求解，等等。

事实上，实际应用中，**近似计算**(或者说 **近似值**) 无处不在，因为我们想得到的 **准确值** 其实是不存在的。

而 **近似值** 只要我们能够 **接受**，就可以拿来使用。

四个特点：

1. 面向计算机，运算只能是加、减、乘、除和逻辑运算；
2. 有可靠的理论基础，能任意逼近并达到精度要求；
3. 要有好的计算复杂性；
4. 要经过数值实验。

§2 误差

常见的误差有 4 种：

1. 模型误差：

实际问题抽象，简化后产生的误差。

例如放射性物体衰减的速度与该物体的质量成正比，于是得常微分方程

$$M = -\lambda \frac{dM}{dt}, \text{ 容易解得 } M(t) = M_0 e^{-\lambda t};$$

2. 观测误差：

观测值与实际值的误差.

例如观测这间教室的长是 15 米, 但实际值往往不是 15 米;

3. 截断误差:

近似解与准确解之间的误差;

例如 $\frac{2}{3} \approx 0.6666$.

4. 舍入误差:

由于计算机字长有限, 四舍五入后产生的误差.

例如 $\frac{2}{3} \approx 0.6667$.

在数值分析中, 我们主要讨论后两种误差, 即截断误差与舍入误差.

下面的例子说明误差是存在的, 但也是可以控制的:

例 1 计算 $I_n = e^{-1} \int_0^1 x^n e^x dx$, 并估计误差.

注: 计算这个积分需要对 n 进行降阶, 为此我们先复习分部积分公式.

大家知道, 积分是导数的逆运算, 即

由 $F'(x) = f(x)$, 得 $\int f(x)dx = F(x) + C$ 或 $\int_a^b f(x)dx = [F(x)]_a^b = F(b) - F(a)$.

称 $F(x)$ 是被积函数 $f(x)$ 的原函数. 求 $f(x)$ 的积分实际上就是求 $f(x)$ 的原函数.

但如果 $f(x)$ 的原函数 $F(x) = u(x)v(x) = uv$ 是两个函数乘积, 则计算这样的积分往往需要用分部积分公式:

由 $(uv)' = u'v + uv'$, 两边对 x 求积分, 得

$$\int (uv)' dx = \int u'v dx + \int uv' dx = \int v du + \int u dv.$$

移项后得 $\int u dv = \int (uv)' dx - \int v du = uv - \int v du$, 即得分部积分公式:

$$\int u dv = uv - \int v du. \text{ 如果是定积分, 则 } \int_a^b u dv = [uv]_a^b - \int_a^b v du.$$

分部积分公式还有一个用法是把求积转化为求导, 如

$$\int \ln x dx = x \ln x - \int x d \ln x = x \ln x - \int x \frac{1}{x} dx = x \ln x - x + C.$$

请注意, 原函数果然有一项是两个函数的乘积.

解 $I_n = e^{-1} \int_0^1 x^n de^x = e^{-1} [x^n e^x]_0^1 - ne^{-1} \int_0^1 x^{n-1} e^x dx = e^{-1} [x^n e^x]_0^1 - nI_{n-1} = 1 - nI_{n-1}.$

已得迭代关系, 于是只需计算 $I_0 = e^{-1} \int_0^1 e^x dx = 1 - e^{-1}$;

先计算 $e^{-1} = 1 + (-1) + \frac{(-1)^2}{2!} + \cdots + \frac{(-1)^k}{k!} + \cdots$.

取前 8 项 (即 $k = 7$), 再保留 4 位小数计算, 得

$e^{-1} \approx 0.3679$. (分别产生截断误差与舍入误差.)

即 $I_0 = 1 - e^{-1} \approx 0.6321$.

于是得迭代计算公式: (A) $\begin{cases} \overline{I}_0 = 0.6321 \\ \overline{I}_n = 1 - n\overline{I}_{n-1} \end{cases} (n = 1, 2, 3, \cdots)$

计算结果参见下表 (课本 P3 表 1-1 第 2、5 栏, 即用 (A) 公式计算).

表 1-1(P3)

n	$\overline{I}_n$	n	$\overline{I}_n$
0	0.6321	5	0.1480
1	0.3679	6	0.1120
2	0.2642	7	0.2160
3	0.2074	8	-0.728
4	0.1704	9	7.5520

当 $n = 8$ 时出现负值, 说明本计算方法有问题.

实际上, 由 $1 = e^0 \leq e^x \leq e (x \in [0, 1])$, 得 $e^{-1} \int_0^1 x^n dx \leq e^{-1} \int_0^1 x^n e^x dx = I_n \leq e^{-1} e \int_0^1 x^n dx$,
即 $\frac{e^{-1}}{n+1} \leq e^{-1} \int_0^1 x^n e^x dx = I_n \leq \frac{1}{n+1}$.

误差分析:

记 $E_0 = I_0 - \overline{I}_0$,

$E_1 = I_1 - \overline{I}_1 = (1 - I_0) - (1 - \overline{I}_0) = -E_0$,

$E_2 = I_2 - \overline{I}_2 = (1 - 2I_1) - (1 - 2\overline{I}_1) = -2E_1 = 2 \cdot 1E_0$,

$\cdots$,

$E_n = I_n - \overline{I}_n = (1 - nI_{n-1}) - (1 - n\overline{I}_{n-1}) = -nE_{n-1} = (-1)^2 n(n-1)E_{n-2} = \cdots = (-1)^n n! E_0$.

即误差随 n 增大而增加.

若换另一种方法计算, 比如先估计 I_9 . 仍由 $\frac{e^{-1}}{n+1} \leq e^{-1} \int_0^1 x^n e^x dx = I_n \leq \frac{1}{n+1}$. 当 $n = 9$ 时, 得 $\frac{e^{-1}}{10} \leq I_9 \leq \frac{1}{10}$.

可取 $I_9 \approx \frac{1}{2}(\frac{1}{10} + \frac{e^{-1}}{10}) \approx 0.0684$. (很粗的估计).

于是得反迭代计算公式: (B)
$$\begin{cases} I_9^* = 0.0684 \\ I_{n-1}^* = \frac{1}{n}(1 - I_n^*) \end{cases} \quad (n = 9, 8, \dots, 2, 1.)$$

计算结果仍见课本 P3 表 1-1 第 3、6 栏, 即用 (B) 公式计算.

表 1-1(P3)

n	$\overline{I}_n$ (用 (A) 算)	I^* (用 (B) 算)	n	$\overline{I}_n$ (用 (A) 算)	I^* (用 (B) 算)
0	$\downarrow 0.6321$	0.6321	5	0.1480	0.1455
1	0.3679	0.3679	6	0.1120	0.1268
2	0.2642	0.2643	7	0.2160	0.1121
3	0.2074	0.2073	8	-0.728	0.1035
4	0.1704	0.1708	9	7.5520	$\uparrow 0.0684$

这时的误差: $|E_{n-1}^*| = |I_{n-1} - I_{n-1}^*| = \left| \frac{1}{n}(1 - I_n) - \frac{1}{n}(1 - I_n^*) \right| = \frac{1}{n} |(I_n - I_n^*)| = \frac{1}{n} |E_n^*|,$

同理

$$|E_{n-2}^*| = \frac{1}{n-1} |E_{n-1}^*| = \frac{1}{(n-1)n} |E_n^*|, \dots, |E_0^*| = \frac{1}{1} |E_1^*| = \frac{1}{1 \cdot 2} |E_2^*| = \frac{1}{1 \cdot 2 \cdot 3} |E_3^*| = \dots = \frac{1}{n!} |E_n^*|.$$

说明即使 E_9^* 可能较大, 但误差却可以逐渐缩小.

§3 误差的基本概念

1. 误差与误差限

定义 1: 设 x^* 为准确值 x 的一个近似值. 记 $e^* = x^* - x$, 称为准确值 x 与近似值 x^* 的 **绝对误差**, 简称 **误差**. 特别, 如果 $e^* > 0$, 则称 x^* 为 x 的 **强近似值**; 如果 $e^* < 0$, 则称 x^* 为 x 的 **弱近似值**.

事实上, 由于我们并不知道准确值 x , 所以误差只能是一个估计值. 一般可以根据有关技术指标得到误差的一个上界, 称为 **误差限**, 常用 ε^* 表示.

一旦知道近似值 x^* 及误差限 ε^* , 就可以估计准确值 x , 即由

$$|x^* - x| \leq \varepsilon^* \Rightarrow x^* - \varepsilon^* \leq x \leq x^* + \varepsilon^*. \quad \text{通常表示为: } x = x^* \pm \varepsilon^*.$$

注: (1) 误差限不唯一;

(2) 误差与误差限是有量纲的.

2. 相对误差与相对误差限

例 $\left. \begin{array}{l} x = 10 \pm 1, \varepsilon^* = 1 \\ y = 1000 \pm 4, \varepsilon^* = 4 \end{array} \right\}$ 谁更精确些?

即误差限的大小不能直接反映近似值的 **精确程度**.

定义 2: 记 $e_r^* = \frac{e^*}{x} = \frac{x^* - x}{x}$, 称为 x^* 的 **相对误差**.

记 $\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon^*}{x}$, 称为 x^* 的 **相对误差限**.

注: (1) 实际中分母 x 常用 x^* 代替;

(2) 相对误差及相对误差限是无量纲的.

3. 有效数字

(1) 舍入误差与误差限的关系.

例 设下列数是四舍五入后得到的近似值:

0.000980, 980, 8.000, 241.853

试求相应的误差限.

先考虑近似值 $x^* = 0.000980$, 设误差限为 ε^* , 则准确值 x 应在如下范围:

$$0.000980 - \varepsilon^* \leq x \leq 0.000980 + \varepsilon^*, \quad \text{即 } 0.000979? \leq x < 0.000980?$$

根据四舍五入原则, 得:

$$0.0009795 \leq x < 0.0009805,$$

即 $x = x^* \pm 0.0000005$, 误差限为 $\varepsilon^* = 0.0000005 = \frac{1}{2} \times 10^{-6}$.

同理, 设 $x^* = 980$, 则准确值 x 应在如下范围:

$$979.5 \leq x < 980.5$$

即 $x = x^* \pm 0.5$, 误差限为 $\varepsilon^* = 0.5 = \frac{1}{2} \times 10^0$.

同理, 设 $x^* = 241.853$, 则准确值 x 应在如下范围:

$$241.8525 \leq x < 241.8535$$

即 $x = x^* \pm 0.0005$, 误差限为 $\varepsilon^* = 0.0005 = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$.

综之, 若某近似值是保留 n 位小数所得, 则它与准确值的误差限为:

$$\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-n}.$$

我们往往只关心从第 n 位到第一个非零数位之间的数字. 于是可以定义:

(2) 有效数字

定义 3: 若近似值 x^* 的误差限 ε^* 是 x^* 写成十进制的某一数位的半个单位 (即 $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-n}$), 则从该位 (即第 n 位) 到 x^* 的第一个非零数位之间的数字称为 x^* 的 **有效数字**, 也称 x^* 具有 n 位 **有效数字**.

比如, 0.000980 的误差限是第 6 位的半个单位, 则从该位到第一个非零数有 3 位有效数字.

这时 $0.000980 = 9.80 \times 10^{-4}$, 而 $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-6} = \frac{1}{2} \times 10^{-4-3+1}$;

同样, 241.853 的误差限是第 3 位的半个单位, 则从该位到第一个非零数有 6 位有效数字. 这时 $241.853 = 2.41853 \times 10^2$, 而 $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-3} = \frac{1}{2} \times 10^{2-6+1}$.

这说明, 若近似值 x^* 四舍五入后写成十进制的指数表达式:

$$x^* = \pm a_1.a_2 \cdots a_n \times 10^m = \pm 10^m \times (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}) \quad (a_1 \neq 0)$$
则误差限为: $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$, 有效数字为 $a_1, a_2, \cdots, a_n$.

定理 若 x 的近似值 x^* 的指数表示形如:

$x^* = \pm a_1.a_2 \cdots a_n \times 10^m$ ($a_1 \neq 0, a_2, \cdots, a_n$ 是 $0 \sim 9$ 之间的数字),
即 x^* 具有 n 位有效数字, 则 x^* 的相对误差限: $\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$.

反之, 若近似值 x^* 的相对误差限 ε_r^* 满足: $\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$,
则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证明 首先有 $|x^* - x| \leq \varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$, 再由 $x^* = \pm a_1.a_2 \cdots a_n \times 10^m$, 得 $a_1 \times 10^m \leq |x^*|$,

则相对误差限: $\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon^*}{|x^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}}{a_1 \times 10^m} \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$ (只与 n 有关).

反之, 设 $x^* = \pm a_1.a_2a_3 \cdots \times 10^m$, 则 $|x^*| \leq (a_1 + 1) \times 10^m$,

再由条件 $\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$, 得

$$|x^* - x| = |x^*| \cdot \varepsilon_r^* \leq (a_1 + 1) \times 10^m \cdot \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)} \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}.$$

即 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证毕

例 要使 $\sqrt{20}$ 的近似值的相对误差限小于 0.1%, 应取几位有效数字?

解 设应取 n 位有效数字. 由定理的证明, $\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$, 而 $\sqrt{20} = 4.???$.
即 $a_1 = 4$.

令 $\frac{1}{2 \cdot 4} \times 10^{-n+1} \leq 0.1\%$, 解得 $10^n \geq 1250$, 故取 $n = 4$ 即可.

4. 数值运算的误差估计

(1) 设两个近似值 x_1^* 和 x_2^* 及其误差限分别为 $\varepsilon(x_1^*)$ 和 $\varepsilon(x_2^*)$, 则四则运算后:

$$\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) \approx \varepsilon(x_1^*) + \varepsilon(x_2^*) \text{ (注意不能取 “-” 号, 教材有误);}$$

$$\varepsilon(x_1^* \cdot x_2^*) \approx |x_1^*| \varepsilon(x_2^*) + |x_2^*| \varepsilon(x_1^*);$$

$$\varepsilon(x_1^*/x_2^*) \approx \frac{|x_1^*| \varepsilon(x_2^*) + |x_2^*| \varepsilon(x_1^*)}{|x_2^*|^2} = \frac{\varepsilon(x_1^* \cdot x_2^*)}{|x_2^*|^2};$$

(证明类似于导数的四则运算)

(2) 设 $f(x)$ 是一元函数. 若 x^* 是 x 的近似值, 则 $f(x^*)$ 就是 $f(x)$ 的近似值, 其误差限记 $\varepsilon(f(x^*))$. 由拉格朗日中值定理, 有

$$f(x) - f(x^*) = f'(\xi)(x - x^*), \quad \xi \text{ 介于 } x \text{ 与 } x^* \text{ 之间.}$$

则

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)| \varepsilon(x^*).$$

(3) 设 $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 是 n 元函数, $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的近似值记为 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$, 则利用多元函数泰勒级数展开, 得

$$\varepsilon(f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)) \approx \sum_{i=1}^n |f'_{x_i}(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)| \varepsilon(x_i^*).$$

例 某矩形场地长 $l = 110$ 米, 宽 $d = 80$ 米, 设 l, d 的误差限分别为 0.2 米和 0.1 米, 求面积 $s = ld$ 的绝对误差限和相对误差限.

解 设 $s = f(l, d) = ld$, 则 $f'_l(l, d) = d$, $f'_d(l, d) = l$, 于是

$$\varepsilon(s^*) \approx |d^*| \varepsilon(l^*) + |l^*| \varepsilon(d^*) = 80 \times 0.2 + 110 \times 0.1 = 27m^2.$$

$$\varepsilon_r(s^*) = \frac{\varepsilon(s^*)}{|s^*|} = \frac{\varepsilon(s^*)}{|l^* d^*|} \approx \frac{27}{8800} = 0.31\%.$$

§4 数值运算中误差分析和方法与原则

1. 问题的提出

近似值 x^* 的误差和相对误差分别记为 $e(x^*)$ 和 $e_r(x^*)$.

其函数 $f(x^*)$ 的误差和相对误差分别记为 $e(f(x^*))$ 和 $e_r(f(x^*))$.

$$\text{则 } e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x^*}, \quad e_r(f(x^*)) = \frac{e(f(x^*))}{f(x^*)}.$$

并且, 函数 $f(x^*)$ 的误差仍然有 $e(f(x^*)) \approx |f'(x^*)|e(x^*)$.

1. 直接得 $e(\ln x^*) \approx |(\ln x^*)'|e(x^*) = \frac{1}{|x^*|}e(x^*) = e_r(x^*) = \delta$.

2. 由 $e((x^*)^n) \approx |((x^*)^n)'|e(x^*) = n(x^*)^{n-1}e(x^*)$, 得

$$e_r((x^*)^n) = \frac{e((x^*)^n)}{(x^*)^n} = \frac{n(x^*)^{n-1}e(x^*)}{(x^*)^n} = \frac{ne(x^*)}{x^*} = ne_r(x^*) = 0.02n.$$

3. $x_1^*=1.1021$ 有 5 位有效数字; $x_2^*=0.031$ 有 2 位有效数字;

$x_3^*=385.6$ 有 4 位有效数字; $x_4^*=56.430$ 有 5 位有效数字;

$x_5^*=7 \times 1.0$ 有 1 位有效数字, 这是因为:

$$\varepsilon(x_5^*) = \varepsilon(7 \times 1.0) = 7\varepsilon(1.0) + 1.0\varepsilon(7) = 7 \times 0.05 + 1.0 \times 0.5 = 0.35 + 0.5 \approx 0.5.$$

5. 已知球体积 V 与其半径 R 的函数关系是: $V(R) = \frac{4}{3}\pi R^3$, 则

$$\varepsilon_r(V(R^*)) = \frac{\varepsilon(V(R^*))}{V(R)} \approx \frac{|V'(R^*)|\varepsilon(R^*)}{V(R)} = \frac{4\pi(R^*)^2\varepsilon(R^*)}{\frac{4}{3}\pi R^3} \approx 3\frac{\varepsilon(R^*)}{R} = 3\varepsilon_r(R^*) = 1\% \Rightarrow \varepsilon_r(R^*) = \frac{1}{300}.$$

8. 如果用牛顿-莱布尼兹公式计算, 即

$$\int_N^{N+1} \frac{1}{1+x^2} dx = [\arctan x]_N^{N+1} = \arctan(N+1) - \arctan N.$$

不妥! 因为当 N 充分大时, $\arctan(N+1)$ 和 $\arctan N$ 是两很相近的近似数, 必须避免直接相减.

可利用定积分中值定理: $\int_a^b f(x)dx = f(\xi)(b-a), \quad \xi \in [a, b]$

得 $\int_N^{N+1} \frac{1}{1+x^2} dx = \frac{1}{1+\xi^2}[(N+1) - N] \approx \frac{1}{N^2}.$

12. 如果取准确值 $x = \sqrt{2}$, 则 $(\sqrt{2}-1)^6$ 与 $\frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6}$ 完全相等.

记 $f_1(x) = (x-1)^6$, $f_2(x) = \frac{1}{(x+1)^6}$, 则

$$f_1(\sqrt{2}) = (\sqrt{2}-1)^6, \quad f_2(\sqrt{2}) = \frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6}.$$

这时, 如果取近似值 $x^* = 1.4$, 则 $f_1(x^*)$ 的误差限为

$$\varepsilon(f_1(x^*)) \approx |f_1'(x^*)|\varepsilon(x^*) = |6(x^*-1)^5|\varepsilon(x^*).$$

而 $f_2(x^*)$ 的误差限为

$$\varepsilon(f_2(x^*)) \approx |f'_2(x^*)|\varepsilon(x^*) = \left| \frac{6}{(x^* - 1)^7} \right| \varepsilon(x^*).$$

至此，比较两个误差限 $\varepsilon(f_1(x^*))$ 与 $\varepsilon(f_2(x^*))$ 的大小，

事实上，只需比较 $|6(1.4 - 1)^5|$ 与 $\left| \frac{6}{(1.4 - 1)^7} \right|$ 的大小即可知道哪一个结果更好.

第二章 插值法

§1 引言

1. 问题提出

在实际应用中, 一个定义在区间 $[a, b]$ 上的函数 $y = f(x)$ 通常用来表示:

事物变化规律的某种内在的数量关系.

请大家注意, 这种内在的数量关系是客观存在的, 关键是我们能不能准确知道函数 $y = f(x)$ 的表达式!

一旦知道, 则 $\forall x \in [a, b]$, 就有唯一确定的值 $y = f(x)$ 与之对应.

然而, 在实际应用中, 我们往往并不知道 $y = f(x)$ 的 **准确** 表达式!

问题: (1) 如何 **近似** 地求出函数 $y = f(x)$?

(2) 可运用的条件有哪些?

通常, 我们可以知道函数 $y = f(x)$ 在某些孤立点上的值

$$y_i = f(x_i) \quad (x_i \in [a, b], \quad i = 0, 1, \cdots, n),$$

而其余点上的函数值 $y = f(x)$ 要通过数值计算才能近似得到.

2. 插值方法

已知函数 $y = f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上定义, 但只知道 $[a, b]$ 上 $n+1$ 个点:

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

及其函数值: $y_i = f(x_i) \quad (i = 0, 1, \cdots, n)$. 如何求 $f(x)$?

由于准确函数 $f(x)$ 是计算不出来的, 所以只能求一个近似函数来逼近 $f(x)$.

那么我们应该选择什么类型的函数作为近似函数呢?

指数函数 e^x , 或三角函数 $\sin x, \cos x$ 虽然简单, 但都不能担此重任.

这主要是因为这些函数的值都不是四则运算能计算的.

一般取 **多项式函数** $P(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n$ 作为近似函数, 并使

$$P(x_i) = y_i = f(x_i) \quad (i = 0, 1, \cdots, n) \quad (1.1)$$

这时称 $P(x)$ 为 **插值多项式**, 称 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为 **插值节点**, 称 $[a, b]$ 为 **插值区间**, 等式 (1.1) 称为 **插值条件**, 所用的方法称 **插值法**.

1. 插值多项式的存在性与唯一性

定理1 设 $y = f(x)$ 在 $[a, b]$ 上 $n+1$ 个不同点 x_i 的取值为 $y_i (i = 0, 1, 2, \dots, n)$, 则存在唯一的次数不超过 n 的插值多项式 $P(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$, 使

$$P(x_i) = y_i = f(x_i) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n).$$

证明 由 $P(x_i) = y_i (i = 0, 1, 2, \dots, n)$, 得

$$\begin{cases} a_0 + a_1x_0 + \dots + a_nx_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1x_1 + \dots + a_nx_1^n = y_1 \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ a_0 + a_1x_n + \dots + a_nx_n^n = y_n \end{cases} \quad (2.1)$$

这时, $1, x_i, x_i^2, \dots, x_i^n$ 与 $y_i (i = 0, 1, 2, \dots, n)$ 为已知, 所以 (2.1) 实际是一个关于 $a_0, a_1, \dots, a_n$ 的 $n+1$ 元线性方程组. 由于其系数行列式为

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{i < j} (x_i - x_j) \neq 0.$$

根据线性代数的克莱姆法则, 方程 (2.1) 存在唯一一组解 $a_0, a_1, \dots, a_n$, 证毕.

由于解方程组 (2.1) 不但复杂, 而且也难以得到 a_i 与 x_i, y_i 之间的直接关系, 所以定理 1 只能停留在理论上. 求系数 $a_0, a_1, \dots, a_n$ 还得寻找更简便的方法.

2. 线性插值与抛物插值

先考虑 n 比较小的情形:

(1) 当 $n = 1$ 时, 只有 2 个节点 x_0, x_1 . 这时插值多项式 $P(x) = a_0 + a_1x$ 是一条直线 (故也叫 **线性插值**), 满足 $P(x_0) = y_0, P(x_1) = y_1$. 则由 “**两点式**”, 得

$$\begin{aligned} y &= \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0) + y_0. \\ \Rightarrow a_1 &= \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}, \quad a_0 = \frac{y_0x_1 - y_1x_0}{x_1 - x_0}. \end{aligned}$$

(2) 当 $n = 2$ 时, 3 个节点 x_0, x_1, x_2 . 这时插值多项式 $P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 是一条抛物线 (故也叫 **抛物插值**), 满足 $P(x_0) = y_0, P(x_1) = y_1, P(x_2) = y_2$.

的确, 3 点可决定一条抛物线, 但计算相当烦琐. 即使费劲得到, 还有 $n = 3$ 和 $n = 4$, 等等, 所以必须另觅方法.

辅助知识: 设 $P(x)$ 是 n 次多项式, 若 x_0 是方程 $P(x) = 0$ 的根, 即 $P(x_0) = 0$, 则 $P(x) = (x - x_0)Q(x)$, 并且 $Q(x)$ 是 $n - 1$ 次多项式.

这时我们先回过头去研究 $n = 1$ 的情形, 希望能从中寻找新的方法.

针对 x_0, x_1 这两个节点, 我们设法构造两个一次函数 $l_0(x)$ 和 $l_1(x)$, 使得

$$l_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{当 } x = x_0 \\ 0 & \text{当 } x = x_1 \end{cases} \quad l_1(x) = \begin{cases} 0 & \text{当 } x = x_0 \\ 1 & \text{当 } x = x_1 \end{cases}$$

如果真有这样两个一次函数存在, 则取

$$P(x) = y_0l_0(x) + y_1l_1(x),$$

$P(x)$ 仍是一次函数, 并且容易知道 $P(x_0) = y_0, P(x_1) = y_1$.

再由插值多项式的唯一性, $P(x)$ 即为所求.

以下考虑两个一次函数 $l_0(x)$ 和 $l_1(x)$ 的构造:

先由 $l_0(x_1) = 0 \Rightarrow l_0(x) = (x - x_1)Q(x)$.

但 $l_0(x)$ 是一次函数, 所以 $Q(x)$ 只能是常数, 记为 c , 即 $l_0(x) = (x - x_1)c$.

再由 $l_0(x_0) = (x_0 - x_1)c = 1 \Rightarrow c = \frac{1}{x_0 - x_1} \Rightarrow l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}$.

同理 $l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$. 从而

$$P(x) = y_0l_0(x) + y_1l_1(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}.$$

请注意这两个函数 $l_0(x)$ 和 $l_1(x)$ 很关键, 我们称它们为 **基函数**. 其特点是:

在自己对应的节点上取值为 1, 在别的节点上取值为 0.

表面上看, 当 $n = 1$ 时用基函数计算 $P(x)$ 比 “两点式” 略烦琐些.

再考虑 $n = 2$ 情形, 这时 $P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 是二次函数, 并且有三个节点 x_0, x_1, x_2 , 因此我们仍要构造三个二次基函数 $l_0(x), l_1(x), l_2(x)$, 并使它们在各自对应的节点上取值为 1, 而在别的节点上取值为 0, 即

$$l_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{当 } x = x_0 \\ 0 & \text{当 } x = x_1, x_2 \end{cases} \quad l_1(x) = \begin{cases} 1 & \text{当 } x = x_1 \\ 0 & \text{当 } x = x_0, x_2 \end{cases} \quad l_2(x) = \begin{cases} 1 & \text{当 } x = x_2 \\ 0 & \text{当 } x = x_0, x_1 \end{cases}$$

以下考虑这三个二次基函数 $l_0(x)$, $l_1(x)$ 和 $l_2(x)$ 的构造:

由于 $l_0(x_1) = l_0(x_2) = 0 \Rightarrow l_0(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdot c$. 再由

$$l_0(x_0) = (x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdot c = 1$$

$$\Rightarrow c = \frac{1}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \Rightarrow l_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}.$$

同理 $l_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}, l_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}.$

从而

$$P(x) = y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) + y_2 l_2(x) = \begin{cases} y_0 & \text{当 } x = x_0; \\ y_1 & \text{当 } x = x_1; \\ y_2 & \text{当 } x = x_2. \end{cases}$$

当 $n = 3, 4$ 的情形可类似地得到插值多项式.

下面我们直接对一般的 n 来计算.

3. 拉格朗日插值多项式

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

$$l_j(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{当 } i = j; \\ 0 & \text{当 } i \neq j. \end{cases}$$

则称 $l_0(x), l_1(x), \dots, l_n(x)$ 为节点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 上的 n 次插值基函数.

为求这些基函数, 可先考虑它们的零点. 事实上, 对于某个基函数 $l_j(x)$, 除 x_j 外, 其它节点 (共还有 n 个) 都是它的零点, 而它又是 n 次, 所以它应该形如:

$$l_j(x) = (x - x_0) \cdots (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \cdots (x - x_n) \cdot c.$$

再由 $l_j(x_j) = (x_j - x_0) \cdots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdots (x_j - x_n) \cdot c = 1$, 直接得

$$l_j(x) = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_j - x_0) \cdots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdots (x_j - x_n)}.$$

定义 2 $l_0(x), l_1(x), \dots, l_n(x)$ 的定义同上, 记 $L_n(x) = \sum_{j=0}^n y_j l_j(x)$.

称为 **拉格朗日插值多项式**. 这时 $L_n(x_i) = \sum_{j=0}^n y_j l_j(x_i) = y_i$.

即 $L_n(x)$ 满足插值条件.

注: n 次插值多项式 $L_n(x)$ 的次数可以小于 n . 例如, 当 $n=2$ 时, 如果三点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$ 共线, 则过这三点的插值多项式 $L_2(x)$ 是一次函数.

若引入记号 $\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$,

则

$$\begin{aligned}\omega'_{n+1}(x) &= \left[(x - x_0) \cdots (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \cdots (x - x_n) \right]' \cdot (x - x_j) \\ &\quad + \left[(x - x_0) \cdots (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \cdots (x - x_n) \right] \cdot (x - x_j)'.\end{aligned}$$

代 $x = x_j$ 入 $\omega'_{n+1}(x)$, 得

$$\omega'_{n+1}(x_j) = (x_j - x_0) \cdots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdots (x_j - x_n).$$

即

$$l_j(x) = \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_j)\omega'_{n+1}(x_j)}.$$

复习

目的是要近似计算 (也叫 **逼近**) 一个定义在区间 $[a, b]$ 上的未知函数 $f(x)$,

假设知道插值条件: $y_i = f(x_i)$ ($x_i \in [a, b]$, $i = 0, 1, \cdots, n$).

一般取 n **次多项式** $P(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n$ 作为逼近函数,

即 $f(x) \approx P(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n$.

由于 $P(x)$ 要满足插值条件: $P(x_i) = y_i = f(x_i)$ ($i = 0, 1, \cdots, n$)

则 $P(x)$ 唯一存在, 并可表示成拉格朗日插值多项式 $L_n(x) = \sum_{j=0}^n y_j l_j(x)$,

$$\begin{aligned}\text{其中 } l_j(x) &= \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_j - x_0) \cdots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdots (x_j - x_n)} \\ &= \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_j)\omega'_{n+1}(x_j)}, \quad \omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n).\end{aligned}$$

接下来的问题是要计算逼近的误差, 即 $f(x) = L_n(x) + ? R(x)$.

4. 插值余项

所谓插值余项是指用 $L_n(x)$ 逼近 $f(x)$ 时的误差, 记为 $R(x) = f(x) - L_n(x)$, 并有如下定理:

定理2 设 $f^{(n)}(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续, $f^{(n+1)}(x)$ 在 (a, b) 内存在, 节点

$$a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b,$$

$L_n(x)$ 是满足插值条件的插值函数, 即 $L_n(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j)l_j(x)$,

其中

$$l_j(x) = \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)} = \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_j)\omega'_{n+1}(x_j)}.$$

而

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

则插值余项:

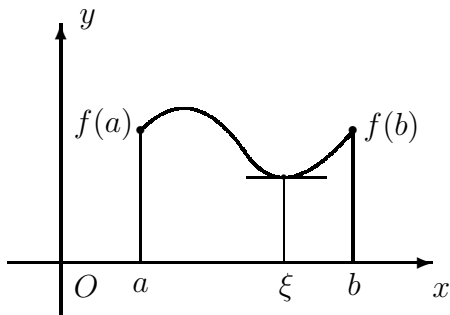
$$R(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x), \quad \text{其中 } \xi \in (a, b) \text{ 且依赖于 } x.$$

复习 “罗尔定理”

设 (1) $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续;

(2) $f(x)$ 在 (a, b) 内可导;

(3) $f(a) = f(b)$.



则存在 $\xi \in (a, b)$, 使 $f'(\xi) = 0$.

推论 1 假设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上具有 1 阶导数并有 2 个零点,

则 $f'(x)$ 在 (a, b) 内至少有 1 个零点.

证明 设 $x_0 < x_1$ 是 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的 2 个零点, 则 $f(x_0) = f(x_1) = 0$. 这时我们可以在小区间 $[x_0, x_1]$ 上用一次罗尔定理, 于是存在 $\xi \in (x_0, x_1)$, 使 $f'(\xi) = 0$, 说明 $f'(x)$ 在 $(x_0, x_1) \subseteq (a, b)$ 内至少有 1 个零点.

推论 2 假设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上具有 $n+1$ 阶导数并有 $n+2$ 个零点, 则

(1) $f'(x)$ 在 (a, b) 内至少有 $n+1$ 个零点;

(2) $f''(x)$ 在 (a, b) 内至少有 n 个零点;

(3) $f'''(x)$ 在 (a, b) 内至少有 $n-1$ 个零点;

.....

(n) $f^{(n)}(x)$ 在 (a, b) 内至少有 2 个零点;

(n+1) $f^{(n+1)}(x)$ 在 (a, b) 内至少有 1 个零点.

定理 2 的证明: 取定 x , 作 t 的函数 $\phi(t)$:

$$\phi(t) = f(t) - L_n(t) - \frac{f(x) - L_n(x)}{\omega_{n+1}(x)} \omega_{n+1}(t), \quad x \text{ 看成常数.}$$

则 $\phi(t)$ 有零点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 及 x , 共 $n+2$ 个.

由罗尔定理的推论, $\phi^{(n+1)}(t)$ 在 (a, b) 内至少有 1 个零点, 记为 ξ , 即

$$0 = \phi^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - L_n^{(n+1)}(\xi) - \frac{f(x) - L_n(x)}{\omega_{n+1}(x)} \omega_{n+1}^{(n+1)}(\xi).$$

但 $L_n(x)$ 是 n 次多项式函数, 所以 $L_n^{(n+1)}(\xi) = 0$.

而 $\omega_{n+1}(x)$ 是 $n+1$ 次多项式函数, 所以 $\omega_{n+1}^{(n+1)}(\xi) = (n+1)!$.

于是上式变为 $f^{(n+1)}(\xi) = \frac{f(x) - L_n(x)}{\omega_{n+1}(x)} (n+1)!$.

整理后, 得

$$R(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x),$$

证毕

特别, 当 $n=1$ 时, $R_1(x) = \frac{1}{2} f''(\xi)(x-x_0)(x-x_1)$, $\xi \in (x_0, x_1)$. (2.17)

当 $n=2$ 时, $R_2(x) = \frac{1}{6} f'''(\xi)(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$, $\xi \in (x_0, x_2)$. (2.18)

引理(余项估计) 若存在 $M_{n+1} > 0$, 使 $|f^{(n+1)}(x)| \leq M_{n+1}$, 则

$$|R_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\omega_{n+1}(x)|. \quad (2.16)$$

例 1 (P18) 已知 $\sin 0.32 = 0.314567$, $\sin 0.34 = 0.333487$, $\sin 0.36 = 0.352274$, 分别用线性插值及抛物插值计算 $\sin 0.3367$ 的值, 并估计相应的截断误差.

解 由题意, 得

$$\begin{cases} x_0 = 0.32, & x_1 = 0.34, & x_2 = 0.36, \\ y_0 = 0.314567, & y_1 = 0.333487, & y_2 = 0.352274. \end{cases}$$

(1) 用线性插值计算, 由 $x_0 = 0.32$, $x_1 = 0.34$, 得

$$\begin{aligned} \sin 0.3367 &\approx L_1(0.3367) = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} (0.3367 - x_0) \\ &= 0.314567 + \frac{0.01892}{0.02} (0.0167) = 0.330365. \end{aligned}$$

截断误差 $|R_1(x)| \leq \frac{M_2}{2} |(x-x_0)(x-x_1)|$.

而 $M_2 = \max_{x_0 \leq x \leq x_1} |f''(x)| = \max_{x_0 \leq x \leq x_1} |\sin x| = \sin x_1 \leq 0.3335$, 则

$$|R_1(0.3367)| = |\sin 0.3367 - L_1(0.3367)| \leq \frac{1}{2} (0.3335)(0.0167)(0.0033) \leq 0.92 \times 10^{-5}.$$

(这个余项的值已非常小)

(2) 用抛物性插值计算, 由 $x_0 = 0.32, x_1 = 0.34, x_2 = 0.36$, 得

$$\begin{aligned} \sin 0.3367 &\approx L_2(0.3367) \\ &= y_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + y_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + y_2 \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \\ &= 0.314567 \times \frac{0.7689 \times 10^{-4}}{0.0008} + 0.333487 \times \frac{3.89 \times 10^{-4}}{0.0004} + 0.352274 \times \frac{-0.5511 \times 10^{-4}}{0.0008} = 0.330374. \end{aligned}$$

截断误差 $|R_2(x)| \leq \frac{M_3}{6} |(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)|$.

而 $M_3 = \max_{x_0 \leq x \leq x_2} |f'''(x)| = \max_{x_0 \leq x \leq x_1} |\cos x| = \cos x_0 \leq 0.828$, 则

$$|R_2(0.3367)| = |\sin 0.3367 - L_2(0.3367)| \leq \frac{0.828}{6} (0.0167)(0.0033)(0.0233) < 0.178 \times 10^{-6}.$$

§4 均差与牛顿插值公式

简单回顾一下插值多项式:

一个未知的函数 $f(x)$ 被一个已知的多项式函数逼近, 依据的是一些插值条件. 即

$$f(x) \approx P(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n, \quad \cdots \cdots (4.1)$$

或

$$f(x) \approx L_n(x) = \sum_{j=0}^n y_j l_j(x). \quad \cdots \cdots \cdots (4.2)$$

分析: (4.1) 式简单, 便于计算, 比如求微积分很容易. 但与节点 x_i 和插值 y_i 的关系不明显.

(4.2) 式与节点 x_i 和插值 y_i 的关系明显, 但却不利于计算, 比如求导就很麻烦.

问题: 有没有既简单, 便于微积分计算, 又与节点 x_i 和插值 y_i 的关系明显的插值多项式?

1. 均差及其性质

定义2 记 $f[x_0, x_k] = \frac{f(x_k) - f(x_0)}{x_k - x_0}$, 称为函数 $f(x)$ 在点 x_0, x_k 的 **一阶均差**.

记 $f[x_0, x_1, x_k] = \frac{f[x_0, x_k] - f[x_0, x_1]}{x_k - x_1}$, 称为函数 $f(x)$ 的 **二阶均差**.

一般地, 记 $f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x_k] = \frac{f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-2}, x_k] - f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-2}, x_{k-1}]}{x_k - x_{k-1}}$,

称为函数 $f(x)$ 的 **k 阶均差**.

注：均差是离散的，仅与插值节点及插值有关，且均差的阶数比节点的个数少 1.

均差的性质：

(1) k 阶均差 $f[x_0, x_1, \dots, x_k]$ 是 $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_k)$ 的线性组合，即

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \sum_{j=0}^k \frac{f(x_j)}{\omega'_{k+1}(x_j)},$$

其中 $\omega'_{k+1}(x_j) = (x_j - x_0) \cdots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdots (x_j - x_k)$.

证明 用归纳法证明，当 $k = 1$ 时，

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

即性质当 $k = 1$ 时成立. 假设性质对 $k - 1$ 阶均差成立，则 k 阶均差：

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \left(f[x_0, \dots, x_{k-2}, x_k] - f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}] \right) \frac{1}{x_k - x_{k-1}}.$$

$$\begin{aligned} \text{由归纳假设：} f[x_0, \dots, x_{k-2}, x_k] &= \sum_{j=0}^{k-2} \frac{f(x_j)}{(x_j - x_0) \cdots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdots (x_j - x_{k-2})(x_j - x_k)} \\ &+ \frac{f(x_k)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-2})} \triangleq \mathbf{A} + \mathbf{B}. \quad \text{而 } f[x_0, \dots, x_{k-1}] \\ &= \sum_{j=0}^{k-2} \frac{f(x_j)}{(x_j - x_0) \cdots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdots (x_j - x_{k-1})} + \frac{f(x_{k-1})}{(x_{k-1} - x_0) \cdots (x_{k-1} - x_{k-2})} \triangleq \\ &\mathbf{C} + \mathbf{D}. \end{aligned}$$

注意 $\mathbf{A}$ 中每一项的分母缺因子 $(x_j - x_{k-1})$ ，而 $\mathbf{C}$ 中每一项的分母缺因子 $(x_j - x_k)$ ，于是 $\mathbf{A} - \mathbf{C} =$

$$\begin{aligned} &\sum_{j=0}^{k-2} \frac{f(x_j)(x_j - x_{k-1})}{(x_j - x_0) \cdots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdots (x_j - x_k)} - \sum_{j=0}^{k-2} \frac{f(x_j)(x_j - x_k)}{(x_j - x_0) \cdots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdots (x_j - x_k)} \\ &= \sum_{j=0}^{k-2} \frac{f(x_j)(x_k - x_{k-1})}{(x_j - x_0) \cdots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdots (x_j - x_k)} = (x_k - x_{k-1}) \sum_{j=0}^{k-2} \frac{f(x_j)}{\omega'_{k+1}(x_j)}. \end{aligned}$$

又 $\mathbf{B}$ 的分母缺因子 $(x_k - x_{k-1})$ ，而 $\mathbf{D}$ 的分母缺因子 $(x_{k-1} - x_k)$ ，于是 $\frac{\mathbf{B} - \mathbf{D}}{x_k - x_{k-1}} =$

$$\begin{aligned} &\frac{f(x_k)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-2})(x_k - x_{k-1})} + \frac{f(x_{k-1})}{(x_{k-1} - x_0) \cdots (x_{k-1} - x_{k-2})(x_{k-1} - x_k)} = \frac{f(x_k)}{\omega'_{k+1}(x_k)} + \\ &\frac{f(x_{k-1})}{\omega'_{k+1}(x_{k-1})} \end{aligned}$$

综之，得

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = (\mathbf{A} - \mathbf{C} + \mathbf{B} - \mathbf{D}) \frac{1}{x_k - x_{k-1}} = \sum_{j=0}^k \frac{f(x_j)}{\omega'_{k+1}(x_j)}.$$

证毕

注：这个性质说明均差与插值节点的排列次序无关，称为均差的 **对称性**，即

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = f[x_1, x_0, \dots, x_k] = \dots = f[x_1, \dots, x_k, x_0].$$

(2) 既然均差与节点的排列次序无关，所以均差又可等价地定义为：

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f[x_1, \dots, x_k] - f[x_0, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}.$$

(3) 函数 $f(x)$ 的 k 阶均差与 k 阶导数的关系：

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}, \quad \xi \in [a, b].$$

注：这个性质的证明放后。

见下表，均差的计算可逐阶（表中是逐列）进行：

表 2-3(P23)

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

2. 牛顿插值公式

设节点为 $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ ，在区间 $[a, b]$ 中取定 x 。则由均差的定义，有

$$f(x) = f(x_0) + f[x, x_0](x - x_0); \quad \dots\dots\dots (1)$$

$$f[x, x_0] = f[x_0, x_1] + f[x, x_0, x_1](x - x_1); \quad \dots\dots\dots (2)$$

$$f[x, x_0, x_1] = f[x_0, x_1, x_2] + f[x, x_0, x_1, x_2](x - x_2); \quad \cdots \cdots (3)$$

.....

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

依次将后式代入前式, 比如 (2) 式代入 (1), 得

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + (f[x_0, x_1] + f[x, x_0, x_1](x - x_1))(x - x_0) \\ &= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x, x_0, x_1](x - x_0)(x - x_1); \end{aligned}$$

再将 (3) 式代入上式, 得

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + (f[x_0, x_1, x_2] + f[x, x_0, x_1, x_2](x - x_2))(x - x_0)(x - x_1) \\ &= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) \\ &\quad + f[x, x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2); \\ &\quad \cdots \cdots \cdots \\ &= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \cdots \\ &\quad + f[x_0, x_1, \cdots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}) + f[x, x_0, x_1, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x) \\ &\triangleq N_n(x) + R_n(x). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{其中 } N_n(x) &= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \cdots \\ &\quad + f[x_0, x_1, \cdots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}) \end{aligned}$$

为 n 次多项式, 称 **牛顿均差多项式**.

$$\begin{aligned} \text{这时 } N_n(x) &= a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + a_n(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}) \\ (a_k &= f[x_0, x_1, \cdots, x_k], \quad k = 0, 1, \cdots, n). \end{aligned}$$

而 $R_n(x) = f[x, x_0, x_1, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x) = f(x) - N_n(x)$ 是牛顿多项式的插值余项,

显然有 $n+1$ 个零点 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$, 即 $R_n(x_j) = f(x_j) - N_n(x_j) = 0$ ($j = 0, 1, \cdots, n$).

说明 $N_n(x)$ 也满足插值条件, 从而 $N_n(x) = L_n(x)$.

此外, 由罗尔定理推论, $R_n^{(n)}(\xi) = 0$, $\xi \in [a, b]$.

注意 $R_n(x) = f(x) - N_n(x)$, 因此

$$0 = R_n^{(n)}(\xi) = f^{(n)}(\xi) - N_n^{(n)}(\xi) = f^{(n)}(\xi) - f[x_0, x_1, \cdots, x_n] \cdot n!$$

即 n 阶均差

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}, \quad \xi \in [a, b].$$

这相当于证明了均差性质 3. 而 $n+1$ 阶均差

$$f[x, x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad \xi \in [a, b],$$

于是

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

§5 差分与等距节点插值公式

本节研究的是等距节点的插值公式. 由于是等距节点, 公式将可以得到简化.

1. 差分及其性质

(1) 设等距节点 $x_k = x_0 + kh \in [a, b]$ ($k = 0, 1, \dots, n$), 其中 $h > 0$ 称步长.

简记 $f_k = f(x_k)$.

定义 3 记 $\Delta f_k = f_{k+1} - f_k$, 称为 **向前差分**;

记 $\nabla f_k = f_k - f_{k-1}$, 称为 **向后差分**;

记 $\delta f_k = f(x_k + \frac{h}{2}) - f(x_k - \frac{h}{2}) = f_{k+\frac{1}{2}} - f_{k-\frac{1}{2}}$, 称为 **中心差分**.

Δ, ∇, δ 称为 **差分算子**.

(2) 二阶差分: $\Delta^2 f_k \triangleq \Delta(\Delta f_k) = \Delta f_{k+1} - \Delta f_k = f_{k+2} - 2f_{k+1} + f_k$.

一般, m 阶差分:
$$\begin{cases} \Delta^m f_k \triangleq \Delta^{m-1}(\Delta f_k) = \Delta^{m-1} f_{k+1} - \Delta^{m-1} f_k; \\ \nabla^m f_k \triangleq \nabla^{m-1}(\nabla f_k) = \nabla^{m-1} f_k - \nabla^{m-1} f_{k-1}; \\ \delta^m f_k \triangleq \delta^{m-1}(\delta f_k) = \delta^{m-1} f_{k+\frac{1}{2}} - \delta^{m-1} f_{k-\frac{1}{2}}. \end{cases}$$

(3) 不变算子与移位算子

定义算子 I , 使 $If_k = f_k$, 称 I 为 **不变算子**;

定义算子 E , 使 $Ef_k = f_{k+1}$, 称 E 为 **移位算子**.

算子可以做幂运算和逆运算, 即

$$E^i f_k = f_{k+i}; \quad E^{-1} f_k = f_{k-1}, \quad E^{\frac{1}{2}} f_k = f_{k+\frac{1}{2}}, \quad E^{-\frac{1}{2}} f_k = f_{k-\frac{1}{2}}.$$

$$E^{-1} E = E E^{-1} = I, \quad E^{\frac{1}{2}} E^{\frac{1}{2}} = E, \quad E^{-\frac{1}{2}} E^{-\frac{1}{2}} = E^{-1}.$$

于是, $\Delta f_k = E f_k - I f_k = (E - I) f_k$, 即 $\Delta = E - I$;

$\nabla f_k = If_k - E^{-1}f_k = (I - E^{-1})f_k$, 即 $\nabla = I - E^{-1}$;
 同样, $\delta = E^{\frac{1}{2}} - E^{-\frac{1}{2}}$.

算子还可以进行二项式展开, 即由

$$(a - b)^n = \sum_{j=0}^n (-1)^j \binom{n}{j} a^{n-j} b^j.$$

得

(4) 性质 1:

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

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

注: $\binom{n}{j} = \binom{n}{n-j} = \frac{n!}{j!(n-j)!}.$

性质 2: 利用各阶差分可以函数插值, 即

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

性质 3: 均差与差分有关系

$$f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+m}] = \frac{\Delta^m f_k}{m! h^m} \quad (m = 1, 2, \dots, n).$$

证明 当 $m = 1$ 时, $f[x_k, x_{k+1}] = \frac{f_{k+1} - f_k}{x_{k+1} - x_k} = \frac{\Delta f_k}{h}$, 性质成立.

设性质当 $m - 1$ 时成立, 则 m 时

$$\begin{aligned} f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+m}] &= \frac{f[x_{k+1}, \dots, x_{k+m}] - f[x_k, \dots, x_{k+m-1}]}{x_{k+m} - x_k} \\ &= \frac{\frac{\Delta^{m-1} f_{k+1}}{(m-1)! h^{m-1}} - \frac{\Delta^{m-1} f_k}{(m-1)! h^{m-1}}}{m \cdot h} = \frac{\Delta^{m-1} f_{k+1} - \Delta^{m-1} f_k}{m! h^m} = \frac{\Delta^m f_k}{m! h^m}. \end{aligned}$$

同样可得 $f[x_k, x_{k-1}] = \frac{f_k - f_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} = \frac{\nabla f_k}{h}$, 及一般地

$$f[x_k, x_{k-1}, \dots, x_{k-m}] = \frac{\nabla^m f_k}{m! h^m} \quad (m = 1, 2, \dots, n).$$

性质 4: 差分与导数的关系

由性质 3, 已有

$$f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+m}] = \frac{\Delta^m f_k}{m! h^m},$$

但

$$f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+m}] = \frac{f^{(m)}(\xi)}{m!},$$

则

$$\Delta^m f_k = h^m f^{(m)}(\xi), \quad m = 1, 2, \dots, n; \quad \xi \in (x_k, x_{k+n}).$$

同理

$$\nabla^m f_k = h^m f^{(m)}(\xi), \quad m = 1, 2, \dots, n; \quad \xi \in (x_k, x_{k+n}).$$

2. 等距节点的插值公式

根据牛顿均差插值公式, 已有 $f(x) = N_n(x) + R_n(x)$, 其中

$$N_n(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x-x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x-x_0)(x-x_1) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})$$

$$R_n(x) = f[x, x_0, \dots, x_n](x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n) = f[x, x_0, \dots, x_n]\omega_{n+1}(x).$$

由于节点等距, 即 $x_k = x_0 + kh$ ($k = 0, 1, \dots, n$).

又设 x 在 x_0 附近, 可取 $x = x_0 + th$ ($0 \leq t \leq 1$), 则 $(x - x_k) = (t - k)h$, 即

$$(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1}) = \overbrace{(t-0)(t-1)\cdots(t-k+1)}^k h^k.$$

$$\omega_{n+1}(x) = \overbrace{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}^{n+1} = (t-0)(t-1)\cdots(t-n)h^{n+1}.$$

另外

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{1}{k! h^k} \Delta^k f_0.$$

$$f[x, x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{1}{(n+1)! h^{n+1}} \Delta^{n+1} f_0 = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_n).$$

于是

$$N_n(x_0 + th) = f_0 + t \Delta f_0 + \frac{t(t-1)}{2!} \Delta^2 f_0 + \dots + \frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!} \Delta^n f_0 \quad (h^k \text{ 已被消去}).$$

称 **牛顿前插公式**. 余项

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

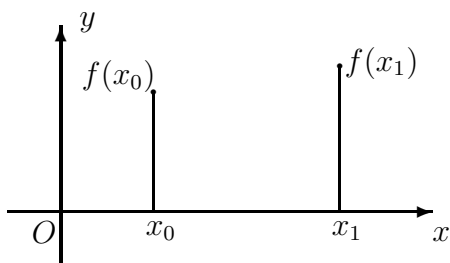
当 x 在 x_n 附近时, 同理可得 **牛顿后插公式** 及余项

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

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

§6 埃尔米特 (Hermite) 插值

前边我们所求的插值多项式只能保持在节点上与函数值相等, 有时还进一步要求导数值也相等. 满足这种要求的插值多项式称 **埃尔米特 (Hermite) 插值多项式**.



1. 埃尔米特插值多项式

(1) 先考虑 $n = 1$, 即 $n + 1 = 2$ 个节点的情形:

节点 x	x_0	x_1
函数 $f(x)$	y_0	y_1
导数 $f'(x)$	m_0	m_1

共有 4 个条件, 可确定一个 3 次多项式, 记为 $H(x)$, 满足

x	x_0	x_1
$H(x)$	y_0	y_1
$H'(x)$	m_0	m_1

为求 $H(x)$, 参考前边的方法, 先构造 4 个基函数 $\alpha_0(x), \alpha_1(x), \beta_0(x), \beta_1(x)$, 要求每个基函数次数不超过 3, 并且各在 **针对自己** 的一个条件上取值 1, 而在其它条件上取值 0, 即

x	x_0	x_1	x	x_0	x_1
$H(x)$	y_0	y_1	$H'(x)$	m_0	m_1
$\alpha_0(x)$	1	0	$\alpha'_0(x)$	0	0
$\alpha_1(x)$	0	1	$\alpha'_1(x)$	0	0
$\beta_0(x)$	0	0	$\beta'_0(x)$	1	0
$\beta_1(x)$	0	0	$\beta'_1(x)$	0	1

如果这 4 个基函数 $\alpha_0(x)$, $\alpha_1(x)$, $\beta_0(x)$, $\beta_1(x)$ 存在, 则取

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

即可. 事实上, 比如当 $x = x_1$ 时, 直接得

$$H(x_1) = y_0\alpha_0(x_1) + y_1\alpha_1(x_1) + m_0\beta_0(x_1) + m_1\beta_1(x_1) = y_0 \cdot 0 + y_1 \cdot 1 + m_0 \cdot 0 + m_1 \cdot 0 = y_1.$$

又因为

$$H'(x) = y_0\alpha'_0(x) + y_1\alpha'_1(x) + m_0\beta'_0(x) + m_1\beta'_1(x),$$

所以 $x = x_0$ 时, 也有

$$H'(x_0) = y_0\alpha'_0(x_0) + y_1\alpha'_1(x_0) + m_0\beta'_0(x_0) + m_1\beta'_1(x_0) = y_0 \cdot 0 + y_1 \cdot 0 + m_0 \cdot 1 + m_1 \cdot 0 = m_0.$$

从而 $H(x)$ 是 Hermite 插值多项式.

于是, 关键是求基函数 $\alpha_0(x)$, $\alpha_1(x)$, $\beta_0(x)$, $\beta_1(x)$.

辅助知识: 设 $P(x)$ 是 n 次多项式, 则

$P(x_0) = P'(x_0) = \cdots = P^{(k)}(x_0) = 0 \iff P(x) = (x - x_0)^{k+1}Q(x)$ ($Q(x)$ 是 $n - k - 1$ 次多项式).

只需证 “ $\Rightarrow$ ”: 由 $P(x_0) = 0 \Rightarrow P(x) = (x - x_0)Q_1(x) \Rightarrow P'(x) = Q_1(x) + (x - x_0)Q'_1(x)$

$\Rightarrow Q_1(x_0) = 0 \Rightarrow Q_1(x) = (x - x_0)Q_2(x) \Rightarrow P(x) = (x - x_0)Q_1(x) = (x - x_0)^2Q_2(x) = \cdots$

先计算 $\alpha_0(x)$. 由 $\alpha_0(x_1) = \alpha'_0(x_1) = 0$, 可知 $\alpha_0(x)$ 应含因式 $(x - x_1)^2$. 但 $\alpha_0(x)$ 是 3 次函数, 因此 $\alpha_0(x)$ 还应含另一个一次因式, 即

$$\alpha_0(x) = (kx + l)(x - x_1)^2$$

为方便计算, 可进一步假设

$$\alpha_0(x) = \left[a + b(x - x_0) \right] \left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \right)^2.$$

现在还剩 2 个条件 $\alpha_0(x_0) = 1$, $\alpha'_0(x_0) = 0$.

可决定常数 a 和 b .

事实上, 由 $\alpha_0(x_0) = 1$, 立即得 $a = 1$. 再由

$$0 = \alpha'_0(x_0) = b\left(\frac{x_0 - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2 + a\frac{2(x_0 - x_1)}{(x_0 - x_1)^2} = b + 1 \times \frac{2}{x_0 - x_1}.$$

得 $b = -\frac{2}{x_0 - x_1} = \frac{2}{x_1 - x_0}$.

从而 $\alpha_0(x) = \left[1 + 2\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right]\left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2$.

由对称性, 将 $0, 1$ 对调, 可得

$$\alpha_1(x) = \left[1 + 2\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right]\left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)^2.$$

再计算 $\beta_0(x)$. 由 $\beta_0(x_0) = \beta_0(x_1) = \beta'_0(x_1) = 0$,

可知 $\beta_0(x)$ 应含因式 $(x - x_0)$ 和 $(x - x_1)^2$.

但 $\beta_0(x)$ 是 3 次函数, 因此, 可设

$$\beta_0(x) = a(x - x_0)\left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2.$$

现在还剩 1 个条件 $\beta'_0(x_0) = 1$ 可决定常数 a .

事实上, $1 = \beta'_0(x_0) = a\left(\frac{x_0 - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2 + a(x_0 - x_0)\frac{2(x_0 - x_1)}{(x_0 - x_1)^2} = a + 0$. 得 $a = 1$. 于

是 $\beta_0(x) = (x - x_0)\left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2$.

同理 $\beta_1(x) = (x - x_1)\left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)^2$.

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

$$\begin{aligned} &= y_0\left[1 + 2\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right]\left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2 + y_1\left[1 + 2\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right]\left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)^2 \\ &\quad + m_0(x - x_0)\left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2 + m_1(x - x_1)\left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)^2. \end{aligned}$$

(2) 当 $n \geq 2$ 时, 仍是 $n + 1$ 个节点:

节点 x	x_0	x_1	$\cdots$	x_n
函数 $f(x)$	y_0	y_1	$\cdots$	y_n
导数 $f'(x)$	m_0	m_1	$\cdots$	m_n

共有 $2n+2$ 个条件, 可确定一个 $2n+1$ 次多项式, 记为 $H_{2n+1}(x)$. 为求 $H_{2n+1}(x)$,

仍先需要构造基函数, 共有 $2n + 2$ 个: $\alpha_j(x), \beta_j(x)$ ($j = 0, 1, \cdots, n$), 满足

$$\alpha_j(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{当 } i = j \\ 0 & \text{当 } i \neq j \end{cases}, \quad \beta'_j(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{当 } i = j \\ 0 & \text{当 } i \neq j \end{cases}, \quad \alpha'_j(x_i) = \beta_j(x_i) = 0 \quad (i = 0, 1, \cdots, n).$$

事实上, 根据前边关于 $n = 1$ 的计算分析和推广, 对一般的 n , 可取

$$\alpha_j(x) = \left[1 - 2(x - x_j) \sum_{k \neq j} \frac{1}{(x_j - x_k)} \right] l_j^2(x), \quad \beta_j(x) = (x - x_j) l_j^2(x).$$

$$\text{于是, } H_{2n+1}(x) = \sum_{j=0}^n [y_j \alpha_j(x) + m_j \beta_j(x)].$$

注: 埃尔米特插值多项式也是唯一的 (见 P29).

2. 埃尔米特插值余项

定理 埃尔米特插值余项

$$R(x) = f(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \omega_{n+1}^2(x), \quad \xi \in [a, b].$$

证明 取定 x , 作 t 的函数 $\phi(t)$:

$$\phi(t) = f(t) - H_{2n+1}(t) - \frac{f(x) - H_{2n+1}(x)}{\omega_{n+1}^2(x)} \omega_{n+1}^2(t), \quad x \text{ 看成常数}.$$

则 $\phi(t)$ 有零点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 及 x , 共 $n+2$ 个.

由罗尔定理, $\phi'(t)$ 在 (a, b) 内至少有 $n+1$ 个零点异于 $x_0, x_1, \dots, x_n$.

此外, $x_0, x_1, \dots, x_n$ 也是 $\phi'(t)$ 的零点, 即 $\phi'(t)$ 至少有 $2n+2$ 个零点,

于是由罗尔定理的推论, $\phi^{(2n+2)}(t)$ 至少有 1 个零点, 记为 ξ , 即

$$0 = \phi^{(2n+2)}(\xi) = f^{(2n+2)}(\xi) - H_{2n+1}^{(2n+2)}(\xi) - \frac{f(x) - H_{2n+1}(x)}{\omega_{n+1}^2(x)} (2n+2)!.$$

由于 $H_{2n+1}(x)$ 是 $2n+1$ 次多项式函数, 所以 $H_{2n+1}^{(2n+2)}(\xi) = 0$.

于是上式变为 $f^{(2n+2)}(\xi) = \frac{f(x) - H_{2n+1}(x)}{\omega_{n+1}^2(x)} (2n+2)!.$

整理后, 得 $R(x) = f(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \omega_{n+1}^2(x).$

证毕

§7 分段低次插值

1. 多项式插值的不足

当用一个 n 次多项式 $P(x)$ 逼近一个函数 $f(x)$, 根据对插值余项的理解, 感觉 n 越大, 逼近的精度越高.

但当 $f(x)$ 的高阶导函数无界时, 情况可能会相反.

例(P31) 求 $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$ 在 $[-5, 5]$ 的插值多项式.

解 若取等距节点 $x_k = -5 + 10\frac{k}{n} (k = 0, 1, \dots, n)$, 则相应的插值多项式

$$L_n(x) = \sum_{j=0}^n \frac{1}{1+x_j^2} \cdot \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_j)\omega_{n+1}(x_j)}.$$

可以证明, 当 $n \rightarrow \infty$ 时, $L_n(x)$ 在区间 $|x| > 3.63$

不能收敛于 $f(x)$. 比如取 $n = 10$ 时, $L_{10}(x)$ 与 $\frac{1}{1+x^2}$ 的图形明显偏

离.

在这种情况下, 有时用通过插值点的折线来逼近 $f(x)$ 可能更好.

2. 分段线性插值

所谓分段线性插值就是用通过插值点的折线来逼近 $f(x)$.

设 $f(x)$ 在节点 $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ 的取值依次为: $f_0, f_1, \dots, f_n$.

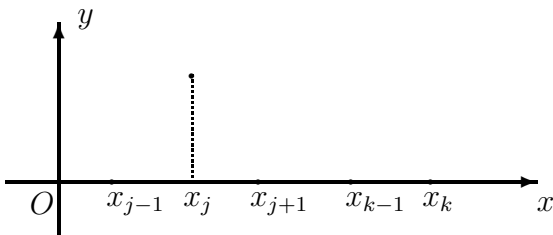
定义 设折线函数 $I(x)$ 满足:

- (1) $I(x) \in C[a, b]$ (连续);
- (2) $I(x_k) = f_k (k = 0, 1, \dots, n)$ (插值条件);
- (3) $I(x)$ 在 $[x_k, x_{k+1}]$ 上是线性函数.

则称 $I(x)$ 为 **分段线性插值函数**.

为此, 在 $[a, b]$ 上构造 $n+1$ 个分段线性基函数: $\hat{l}_j(x) (j = 0, 1, \dots, n)$, 满足

$$\hat{l}_j(x_k) = \begin{cases} 1 & \text{当 } k = j; \\ 0 & \text{当 } k \neq j. \end{cases}$$



如图, 当 $x \in [x_{j-1}, x_j]$, $\hat{l}_j(x)$ 是过点 $(x_{j-1}, 0), (x_j, 1)$ 的直线,

当 $x \in [x_j, x_{j+1}]$, $\hat{l}_j(x)$ 是过点 $(x_j, 1), (x_{j+1}, 0)$ 的直线,

而当 $x \in [x_{k-1}, x_k]$, $[x_{k-1}, x_k] \cap [x_{j-1}, x_{j+1}] = \emptyset$,

这时 $\hat{l}_j(x)$ 是过点 $(x_{k-1}, 0), (x_k, 0)$ 的直线, 只能 $\hat{l}_j(x) = 0$.

所以 $\hat{l}_j(x)$ 的表达式为:

$$\hat{l}_j(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} & x \in [x_{j-1}, x_j]; \\ \frac{x - x_{j+1}}{x_j - x_{j+1}} & x \in [x_j, x_{j+1}]; \\ 0 & x \notin [x_{j-1}, x_{j+1}]. \end{cases}$$

这时称 $\hat{l}_j(x)$ 具有 **局部非零性**.

令 $I(x) = \sum_{j=0}^n f_j \hat{l}_j(x)$, 往证 $I(x)$ 是区间 $[a, b]$ 上的分段线性插值函数.

事实上, $I(x)$ 显然满足定义 (1) 和 (2), 只需证 $I(x)$ 在 $[x_k, x_{k+1}]$ 上是线性函数.

取 $x \in [x_k, x_{k+1}]$, 这时只有 $\hat{l}_k(x)$ 与 $\hat{l}_{k+1}(x)$ 非零, 于是

$I(x) = f_k \hat{l}_k(x) + f_{k+1} \hat{l}_{k+1}(x) = f_k \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} + f_{k+1} \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k}$ 是一次函数, 因此是直线.

性质: (1) $\sum_{j=0}^n \hat{l}_j(x) = 1$;

(2) 若 $f(x) \in C[a, b]$, 则 $\lim_{h \rightarrow 0} I(x) = f(x)$ (h 表示最大的节距).

证明 (1) 设 $x \in [x_k, x_{k+1}]$, 左边 $= \hat{l}_k(x) + \hat{l}_{k+1}(x) = \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} + \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k} = 1$.

(2) 证略.

习题选讲(P40)

6. 设 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 为互异节, 求证:

(1) $\sum_{j=0}^n x_j^k l_j(x) \equiv x^k \quad (k = 0, 1, \dots, n)$;

(2) $\sum_{j=0}^n (x_j - x)^k l_j(x) \equiv 0 \quad (k = 0, 1, \dots, n)$.

证明 (1) 令 $f(x) = x^k \quad (k \leq n)$, 则 $f^{(n+1)}(x) = 0$, 于是

右边 $= f(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j) l_j(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j) l_j(x) = \sum_{j=0}^n x_j^k l_j(x) =$

左边.

(2) 令 $f(t) = (t - x)^k \quad (k \leq n, x \text{ 看作常数})$, 则 $f^{(n+1)}(t) = 0, f(x) = 0$, 于是

$f(t) = \sum_{j=0}^n f(x_j) l_j(t) = \sum_{j=0}^n (x_j - x)^k l_j(t)$. 代入 $t = x$, 得 $0 = f(x) = \sum_{j=0}^n (x_j - x)^k l_j(x)$.

7. 设 $f(x) \in C^2[a, b]$ 且 $f(a) = f(b) = 0$, 求证 $\max_{a \leq x \leq b} |f(x)| \leq \frac{1}{8}(b-a)^2 \max_{a \leq x \leq b} |f''(x)|$.

证明 考虑 $n=1, n+1=2$ 个节点 $x_0=a, x_1=b$ 的拉格朗日插值多项式:

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

$|f(x)| \leq \frac{|f''(\xi)|}{2!}(x-a)(b-x) = \frac{|f''(\xi)|}{2!} [\sqrt{(x-a)(b-x)}]^2 \leq \frac{|f''(\xi)|}{2!} \left[\frac{(x-a) + (b-x)}{2} \right]^2 = \frac{|f''(\xi)|}{8} (b-a)^2.$

14. 若 $f(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n$ 有 n 个不同的实根 $x_1, x_2, \cdots, x_n$, 证明

$$\sum_{j=1}^n \frac{x_j^k}{f'(x_j)} = \begin{cases} 0, & 0 \leq k \leq n-2; \\ a_n^{-1}, & k=n-1. \end{cases}$$

证明 先由 $f(x) = a_n(x-x_1)\cdots(x-x_n) \Rightarrow f'(x_j) = a_n(x_j-x_1)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)$,

令 $g(x) = x^k$. 则上式左边

$$\sum_{j=1}^n \frac{g(x_j)}{a_n(x_j-x_1)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)} = a_n^{-1}g[x_1, x_2, \cdots, x_n] = a_n^{-1} \frac{g^{(n-1)}(\xi)}{(n-1)!} =$$

右边.

19. 求次数 ≤ 4 的多项式 $P(x)$, 满足

节点 x	0	1	2
函数 $P(x)$	0	1	1
导数 $P'(x)$	0	1	

解 构造 5 个基函数: $\alpha_0(x), \alpha_1(x), \alpha_2(x), \beta_0(x), \beta_1(x)$, 要求每个基函数次数不超过 4, 并且各在 **针对自己** 的一个条件上取值 1, 而在其它条件上取值 0, 即

x	0	1	2	x	0	1
$P(x)$	0	1	1	$P'(x)$	0	1
$\alpha_0(x)$	1	0	0	$\alpha'_0(x)$	0	0
$\alpha_1(x)$	0	1	0	$\alpha'_1(x)$	0	0
$\alpha_2(x)$	0	0	1	$\alpha'_2(x)$	0	0
$\beta_0(x)$	0	0	0	$\beta'_0(x)$	1	0
$\beta_1(x)$	0	0	0	$\beta'_1(x)$	0	1

如果这 5 个基函数 $\alpha_0(x), \alpha_1(x), \alpha_2(x), \beta_0(x), \beta_1(x)$ 存在, 则取

$$P(x) = 0\alpha_0(x) + 1\alpha_1(x) + 1\alpha_2(x) + 0\beta_0(x) + 1\beta_1(x).$$

于是, 只需求基函数 $\alpha_1(x), \alpha_2(x), \beta_1(x)$.

先求 $\alpha_1(x)$: 由 $\alpha_1(0) = \alpha_1(2) = \alpha'_1(0) = \alpha'_1(1) = 0$, 可知 $\alpha_1(x) = x^2(x-2)[a + b(x-1)]$.

由 $1 = \alpha_1(1) = 1^2(1-2)[a + b(1-1)] = -a \Rightarrow a = -1$. 由 $\alpha'_1(1) = 0 \Rightarrow b = 1$.

再计算 $\alpha_2(x)$: 由 $\alpha_2(0) = \alpha_2(1) = \alpha'_2(0) = \alpha'_2(1) = 0$, 可知 $\alpha_2(x) = x^2(x-1)^2a$.

由 $1 = \alpha_2(2) = 2^2(2-1)^2a = 4a \Rightarrow a = \frac{1}{4}$.

最后计算 $\beta_1(x)$: 由 $\beta_1(0) = \beta_1(1) = \beta_1(2) = \beta'_1(0) = 0$, $\beta_1(x) = x^2(x-1)(x-2)a$.

由 $1 = \beta'_1(1) = [x^2(x-2)a]_{x=1} \Rightarrow a = -1$.

于是,得 $P(x)=\alpha_1(x)+\alpha_2(x)+\beta_1(x)=x^2(x-2)^2+\frac{1}{4}x^2(x-1)^2-x^2(x-1)(x-2)=\frac{1}{4}x^2(x-3)^2$.

余项为 $R(x)=\frac{f^{(5)}(\xi)}{5!}x^2(x-1)^2(x-2)$, $\xi \in (0,2)$.

20. 设 $f(x) \in C[a,b]$, 把 $[a,b]$ 分为 n 等分, 试构造台阶形零次分段插值函数 $\varphi(x)$, 并证明当 $n \rightarrow \infty$ 时, $\varphi(x)$ 在 $[a,b]$ 上一致收敛于 $f(x)$.

解 等距节点为 $x_j = a + j\frac{b-a}{n}$ ($j = 0, 1, \dots, n$). 先构造台阶形零次分段插值基函数:

$$\bar{l}_j(x) = \begin{cases} 1, & x_j \leq x < x_{j+1}; \\ 0, & \text{其它}. \end{cases} \quad \text{则 } \varphi(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j) \bar{l}_j(x).$$

性质: 当 $x \in [x_j, x_{j+1})$ 时, 有

$$(1) \sum_{j=0}^n \bar{l}_j(x) = \bar{l}_j(x) = 1;$$

$$(2) \begin{aligned} |f(x) - \varphi(x)| &= \left| \sum_{j=0}^n f(x) \bar{l}_j(x) - \sum_{j=0}^n f(x_j) \bar{l}_j(x) \right| = \sum_{j=0}^n |f(x) - f(x_j)| \bar{l}_j(x) \\ &= |f(x) - f(x_j)| \bar{l}_j(x) = |f(x) - f(x_j)| \rightarrow 0 \quad \left(\because |x - x_j| < \frac{b-a}{n} \rightarrow 0 \right). \end{aligned}$$

第三章 函数逼近与计算

§1 引言

1. 问题提出

为近似地求一个函数 $f(x)$, 一般用一个 n 次多项式 $P_n(x)$ 来逼近:

(1) **插值法** ($n+1$ 个节点 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$): 构造

(拉格朗日插值法)

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j)l_j(x), \text{ 或}$$

(牛顿均差公式)

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

满足: 当 $x = x_j$, $P_n(x_j) = f(x_j)$; 当 $x \neq x_j$, $P_n(x) \approx f(x)$, 余项

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x), \quad \xi \in [a, b].$$

(2) **泰勒展开法** (1 个节点 x_0): 构造

$$P_n(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n.$$

满足: 当 $x = x_0$, $P_n^{(k)}(x_0) = f^{(k)}(x_0)$; 当 $x \neq x_0$, $P_n(x) \approx f(x)$, 余项

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x-x_0)^{n+1}, \quad \xi \in [a, b].$$

总之, 多项式 $P_n(x)$ 已可以得到. 剩下的问题是如何进一步分析误差, 从而设法减少 (控制) 误差.

逼近的程度 **着眼于**: $|R_n(x)| = |f(x) - P_n(x)|$

(与 $P_n(x)$ 的取法有关, 也与 n 有关).

逼近的标准最常用的有 2 个:

(1) 记 $\|f(x) - P(x)\|_\infty \triangleq \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - P(x)|$.

用 $\|\cdot\|_\infty$ 的大小来刻划的逼近称 **一致逼近** 或 **均匀逼近**. **离散型**

(2) 记 $\|f(x) - P(x)\|_2 \triangleq \sqrt{\int_a^b [f(x) - P(x)]^2 dx}$. **根号常可去掉**

用 $\|\cdot\|_2$ 的大小来刻划的逼近称 **均方逼近** 或 **平方逼近**. **连续型**

2. 维尔斯特拉斯定理 (Weierstrass)

定理1 设 $f(x) \in C[a, b]$, 则 $\forall \varepsilon > 0$, 存在多项式 $P(x)$, 使 $\|f(x) - P(x)\|_\infty < \varepsilon$ 在区间 $[a, b]$ 上一致成立.

证明 不妨设区间 $[a, b] = [0, 1]$, 取等距节点: $x_k = \frac{k}{n} (k = 0, 1, \dots, n)$, 构造所谓的 **伯恩斯坦多项式**:

$$B_n(f, x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) P_k(x), \text{ 其中 } P_k(x) = \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} \geq 0 \text{ (} n \text{ 次多项式)}$$

则可以证明 $\lim_{n \rightarrow \infty} B_n(f, x) = f(x)$ 在 $[0, 1]$ 上一致成立 (详证略).

特别, 当 $f(x) \in C^m[0, 1]$ 时,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} B_n^{(m)}(f, x) = f^{(m)}(x).$$

性质: (1) $\sum_{k=0}^n P_k(x) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} = [x + (1-x)]^n = 1;$

(2) 若 $f(x)$ 有界, 即 $|f(x)| \leq M$, 则

$$|B_n(f, x)| \leq \sum_{k=0}^n |f(x_k)| P_k(x) \leq M \sum_{k=0}^n P_k(x) = M. \text{ (因为 } P_k(x) \geq 0 \text{)}$$

事实上, $B_n(f, x)$ 关于 n 的收敛速度太慢, 故在实际中通常不用.

§2 最佳一致逼近

本节研究在第一种逼近标准下的逼近.

1. 存在性

考虑 n 固定时多项式的逼近. 记区间 $[a, b]$ 上次数不超过 n 的多项式全体的集合为 H_n . 显然 $H_n \subseteq C[a, b]$. H_n 的一组基为 $1, x, \dots, x^n$ ($n+1$ 维), 即

$$\forall P_n(x) \in H_n, \exists! a_0, a_1, \dots, a_n, \text{ 使 } P_n(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n.$$

问题 能否得到 $P_n^*(x) \in H_n$, 使

$$\|f(x) - P_n^*(x)\|_\infty = \inf_{P_n(x) \in H_n} \|f(x) - P_n(x)\|_\infty? \text{ 下确界 (最大的下界)}$$

以下简记: $f = f(x), P_n = P_n(x), \dots$

定义1 记 $\Delta(f, P_n) \triangleq \|f - P_n\|_\infty$, 称为 $f(x)$ 与 $P_n(x)$ 的 **偏差**.

这时 $\{\Delta(f, P_n) \mid P_n \in H_n\}$ 是一个数集.

显然 0 是这个数集的一个下界. 因此存在下确界:

记 $E_n \triangleq \inf_{P_n \in H_n} \{\Delta(f, P_n)\}$, 称 E_n 为 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上的 **最小偏差**.

(仅与 $f(x)$ 以及正整数 n 和区间 $[a, b]$ 有关.)

定义2 若存在 $P_n^*(x) \in H_n$, 使 $\Delta(f, P_n^*) = E_n$, 则称 $P_n^*(x)$ 是 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上的 **最佳一致逼近多项式** 或 **最小偏差逼近多项式**, 简称 **最佳逼近多项式**.

(即可达到下确界)

定理2 若 $f(x) \in C[a, b]$, 则必存在 $P_n^*(x) \in H_n$, 使 $\|f(x) - P_n^*(x)\|_\infty = E_n$.
即必存在 $f(x)$ 的最佳逼近多项式.

证明略, 可参考有关文献.

2. 切比雪夫定理

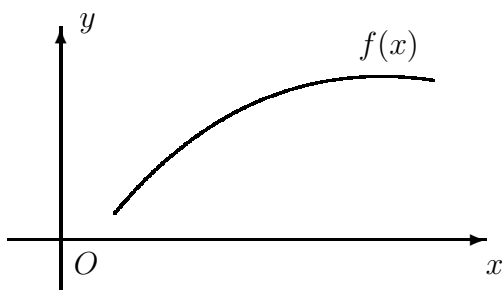
以下给定 $f(x) \in C[a, b]$.

定义3 设 $P(x) \in H_n$, 若存在 $x_0 \in [a, b]$, 使

$$|P(x_0) - f(x_0)| = \|P(x) - f(x)\|_\infty,$$

则称 x_0 是 $P(x)$ 的 **偏差点**.

特别, 当 $P(x) > f(x_0)$ 时, 称 x_0 是 **正偏差点**, 否则称 **负偏差点**.



复习连续函数的性质:

(1) 若 $f(x) \in C[a, b]$, 且存在 $x_1, x_2 \in [a, b]$, 使 $f(x_1)f(x_2) < 0$, 即 $f(x_1)$ 与 $f(x_2)$ 异号,

则存在 $\xi \in (x_1, x_2)$, 使 $f(\xi) = 0$. 即 $f(x)$ 在 (x_1, x_2) 至少有一个根.

(2) 若 M, m 分别是 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的上, 下确界, 则存在 x_1, x_2 , 使 $f(x_1) = M, f(x_2) = m$.

即连续函数在闭区间上可达到上下确界.

定理3 若 $P(x) \in H_n$ 是 $f(x) \in C[a, b]$ 的最佳逼近多项式, 则 $P(x)$ 同时存在正负偏差点.

证明 令 $\phi(x) = |P(x) - f(x)|$, 则 $\phi(x)$ 连续, 因而可达到最大值, 即存在 x_0 , 使 $\phi(x_0) = \max_{a \leq x \leq b} \phi(x) = \|P(x) - f(x)\|_\infty$, 这说明 x_0 是 $P(x)$ 的一个偏差点, 不妨设为正偏差点. 由于 $P(x)$ 是最佳逼近多项式, 则

$$\phi(x_0) = P(x_0) - f(x_0) = \|P(x) - f(x)\|_\infty = E_n = \inf_{P_n \in H_n} \{\Delta(f, P_n)\}.$$

反证, 即假设 $P(x)$ 无负偏差点. 令 $\psi(x) = P(x) - f(x) \in C[a, b]$, 设它在 x_1 达到最小值 $\psi(x_1) \triangleq m$, 则必然 $m > -E_n$ (否则 x_1 就是 $P(x)$ 的负偏差点).

取 $h = \frac{m+E_n}{2} > 0$, 则 $m = -E_n + 2h \leq \psi(x) \leq E_n \Rightarrow -E_n + h \leq [P(x) - h] - f(x) \leq E_n - h$,
 即 $|[P(x) - h] - f(x)| \leq E_n - h$, 说明 $P(x) - h$ 才是最佳逼近多项式, 矛盾.
 因此 $P(x)$ 必有正负偏差点. 证毕

定理4 $P(x) \in H_n$ 是最佳逼近多项式 $\Leftrightarrow P(x)$ 在 $[a, b]$ 上至少有 $n+2$ 正负交错偏差点

(即存在 $n+2$ 个点 $a \leq x_1 < x_2 < \cdots < x_{n+2} \leq b$, 使 $P(x_k) - f(x_k) = \pm(-1)^k \|P(x) - f(x)\|_\infty$).

只证“ $\Leftarrow$ ” 即往证 $P(x)$ 是 $f(x)$ 的最佳逼近多项式.

用反证法, 假设另有 $Q(x) \in H_n$, 使 $\|Q(x) - f(x)\|_\infty < \|P(x) - f(x)\|_\infty$.

则考虑 $P(x) - Q(x) = [P(x) - f(x)] - [Q(x) - f(x)]$. 代入各偏差点, 得

$$P(x_k) - Q(x_k) = [P(x_k) - f(x_k)] - [Q(x_k) - f(x_k)] \quad (k=1, 2, \cdots, n+2).$$

因为 $|P(x_k) - f(x_k)| = \|P(x) - f(x)\|_\infty > \|Q(x) - f(x)\|_\infty \geq |Q(x_k) - f(x_k)|$,

所以 $P(x_k) - Q(x_k)$ 与 $P(x_k) - f(x_k)$ 同符号, 因此交错取正负值,

即 $P(x) - Q(x)$ 在小区间 $[x_k, x_{k+1}]$ ($k=1, 2, \cdots, n+1$) 两端异号, 之间至少有一个 0 点,

导致 n 次非零多项式 $P(x) - Q(x)$ 至少有 $n+1$ 个 0 点, 矛盾.

只能 $P(x)$ 是 $f(x)$ 的最佳逼近多项式. 证毕

推论1 若 $f(x) \in C[a, b]$, 则在 H_n 中唯一存在 $f(x)$ 的最佳逼近多项式.

证明 存在性由定理 2 可得, 只证唯一性.

设 $P(x), Q(x)$ 都是 $f(x)$ 的最佳逼近多项式, 往证 $P(x) = Q(x)$.

$$\text{由 } \begin{cases} -E_n \leq P(x) - f(x) \leq E_n \\ -E_n \leq Q(x) - f(x) \leq E_n \end{cases} \Rightarrow -E_n \leq \frac{P(x) + Q(x)}{2} - f(x) \leq E_n.$$

记 $R(x) \triangleq \frac{P(x) + Q(x)}{2}$, 则显然 $R(x)$ 也是 $f(x)$ 的最佳逼近多项式, 于是

$R(x) - f(x)$ 有 $n+2$ 个正负交错偏差点 $\{x_k\}$, 满足 $R(x_k) - f(x_k) = \pm(-1)^k E_n$,
 即

$$E_n = |R(x_k) - f(x_k)| = \left| \frac{P(x_k) - f(x_k)}{2} + \frac{Q(x_k) - f(x_k)}{2} \right| \leq \left| \frac{P(x_k) - f(x_k)}{2} \right| + \left| \frac{Q(x_k) - f(x_k)}{2} \right| \leq \frac{E_n}{2} + \frac{E_n}{2} = E_n.$$

必然中间的“等号”成立, 得 $\frac{P(x_k) - f(x_k)}{2} = \frac{Q(x_k) - f(x_k)}{2}$ (因为同号且绝对值相等).

整理得 $P(x_k) = Q(x_k)$ ($k = 1, 2, \cdots, n+2$), 作为 n 次多项式, 只能 $P(x) = Q(x)$.

推论2 设 $P(x) \in H_n$ 是 $f(x) \in C[a, b]$ 的最佳逼近多项式, 则 $P(x)$ 是 $f(x)$ 的某个拉格朗日插值多项式.

证明 因为 $P(x)-f(x)$ 在 $[a, b]$ 上有 $n+2$ 个正负交错的偏差点, 所以 $P(x)-f(x)$ 在 $[a, b]$ 上有 $n+1$ 个 0 点, 于是 $P(x)$ 是以这些 0 点为节点的拉格朗日插值多项式.

推论 3 设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上具有 $n+1$ 阶导数, 且 $f^{(n+1)}(x)$ 保号. 若 $P(x) \in H_n$ 是 $f(x)$ 的最佳逼近多项式, 则端点 a, b 也是 $P(x)$ 是偏差点.

证明 因为 $R(x) \triangleq P(x)-f(x)$ 有 $n+2$ 个正负交错的偏差点 $a \leq x_1 < x_2 < \cdots < x_{n+2} \leq b$, 所以 $R(x)$ 在 (x_1, x_{n+2}) 内有 $n+1$ 个 0 点, 进而 $R'(x)$ 在 (x_1, x_{n+2}) 内有 n 个 0 点. 如果 $a < x_1$, 则 x_1 是 $R(x)$ 在 (a, x_2) 内的一个极值点, 导致 $R'(x_1) = 0$, 这使得 $R'(x)$ 在 $[a, b]$ 内有 $n+1$ 个 0 点, 从而 $R^{(n+1)}(x) = -f^{(n+1)}(x)$ 至少有一个 0 点, 与 $f^{(n+1)}(x)$ 保号矛盾. 故只能 $a = x_1$ 是偏差点. 同样必须 $b = x_{n+2}$ 也是偏差点.

2. 最佳一次逼近多项式

事实上要求出 $f(x)$ 的最佳 n 次逼近多项式是相当困难的, 只能考虑 n 比较小的情况.

当 $n = 0$, 最佳 0 次逼近多项式见 P80 习题 4.

重点考虑 $n = 1$ 的情形.

设 $f(x) \in C^2[a, b]$, 且 $f''(x)$ 在 (a, b) 内保号,

则由 **推论 3**, 其最佳一次逼近多项式 $P_1(x) =$

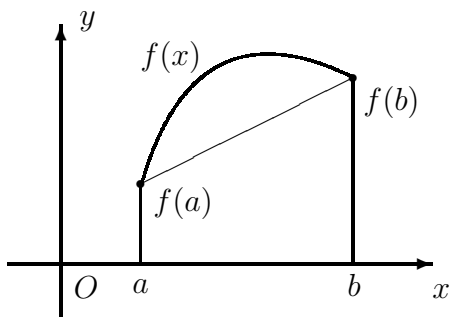
$a_0 + a_1x$ 的 $n+2 = 3$ 个正负交错偏差点包含区间端点, 即 $a = x_1 < x_2 < x_3 = b$.

记 $R(x) \triangleq P_1(x) - f(x)$, 则 $R(x)$ 在 (a, b) 内有 2 个 0 点, 从而 $R'(x)$ 在 (a, b) 内至少有 1 个 0 点. 注意 $R''(x) = -f''(x)$ 保号, 知 $R'(x)$ 单调, 因而只有一个 0 点, 并且还是极值点, 所以只能是 x_2 . 于是由 $0 = R'(x_2) = P_1'(x_2) - f'(x_2) = a_1 - f'(x_2) \Rightarrow f'(x_2) = a_1$. 再由 $P_1(a) - f(a) = -[P_1(x_2) - f(x_2)] = P_1(b) - f(b) = \pm \|P_1(x) - f(x)\|_\infty$, 得

$$\begin{cases} a_0 + a_1a - f(a) = -a_0 - a_1x_2 + f(x_2); \\ a_0 + a_1a - f(a) = a_0 + a_1b - f(b). \end{cases}$$

$$\text{解得 } a_1 = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} = f'(x_2), \quad a_0 = \frac{f(a) + f(x_2)}{2} - a_1 \frac{a + x_2}{2}.$$

$$\text{于是 } P_1(x) = a_0 + a_1x = \frac{f(a) + f(x_2)}{2} + a_1 \left(x - \frac{a + x_2}{2} \right).$$



例1 (P49) 求 $f(x) = \sqrt{1+x^2}$ 在 $[0, 1]$ 上的最佳一次逼近多项式.

解 设 $f(x) = \sqrt{1+x^2}$ 的最佳一次逼近多项式为 $P_1(x) = a_0 + a_1x$, 则

$$a_1 = \frac{f(1) - f(0)}{1 - 0} = \sqrt{2} - 1 \approx 0.414. \text{ 又 } a_1 = f'(x_2) = \frac{x_2}{\sqrt{1+x_2^2}}, \text{ 解得}$$

$$x_2 = \sqrt{\frac{\sqrt{2}-1}{2}} \approx 0.4551, \text{ 进而 } f(x_2) = \sqrt{1+x_2^2} \approx 1.0986, \text{ 则}$$

$$a_0 = \frac{f(0) + f(x_2)}{2} - a_1 \frac{0 + x_2}{2} \approx 0.955, \text{ 于是 } \sqrt{1+x^2} \approx P_1(x) = 0.955 + 0.414x, \quad 0 \leq x \leq 1.$$

$$\text{而误差限 } \max_{a \leq x \leq b} |\sqrt{1+x^2} - P_1(x)| = |\sqrt{1+0^2} - P_1(0)| \leq 0.045.$$

§3 最佳平方逼近

在一致逼近标准下, $f(x)$ 的最佳 n 次逼近多项式 $P_n^*(x)$ 满足:

$$\|f(x) - P_n^*(x)\|_\infty = \inf_{P_n \in H_n} \|f(x) - P_n(x)\|_\infty.$$

本节研究 **平方逼近**, 标准为: $\|f(x) - P(x)\|_2 \triangleq \sqrt{\int_a^b [(f(x) - P(x))]^2 dx}.$

仍然是求 $P_n^*(x) \in H_n$, 使 $\|f(x) - P_n^*(x)\|_2 = \inf_{P_n \in H_n} \|f(x) - P_n(x)\|_2.$

设 $P_n(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n = \sum_{j=0}^n a_jx^j \in H_n$. 为确定 **系数** $a_0, a_1, \cdots, a_n$,

作多元函数 $I(a_0, a_1, \cdots, a_n) \triangleq \|P_n(x) - f(x)\|_2^2 = \int_a^b \left[\sum_{j=0}^n a_jx^j - f(x) \right]^2 dx.$

考虑 $I(a_0, a_1, \cdots, a_n)$ 的最小值. 由 **多元函数极值的必要条件**, 令

(无最大值, 为什么?)

$$\frac{\partial I}{\partial a_i} = 2 \int_a^b x^i \left[\sum_{j=0}^n a_jx^j - f(x) \right] dx = 0 \quad (i = 0, 1, \cdots, n).$$

整理后可得到关于 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 的 $n+1$ 元线性方程组:

$$\sum_{j=0}^n a_j \int_a^b x^{i+j} dx = \int_a^b x^i f(x) dx \quad (i = 0, 1, \cdots, n).$$

注意: 内积与区间 $[a, b]$ 以及权函数 $\rho(x)$ 有关.

内积的性质:

- (1) 交换: $(f, g) = (g, f)$;
- (2) 线性: $(cf, g) = c(f, g)$, $(f_1 + f_2, g) = (f_1, g) + (f_2, g)$;
- (3) 非负: $(f, f) \geq 0$, 且 $f \equiv 0 \Leftrightarrow (f, f) = 0$.

定义 6 设 $f(x) \in C[a, b]$, 记 $\|f\|_2 \triangleq \sqrt{(f, f)} = \sqrt{\int_a^b \rho(x) f^2(x) dx}$ 称为 $f(x)$ 的 **欧氏范数**.

注意: 范数与区间 $[a, b]$ 以及权函数 $\rho(x)$ 有关.

范数的性质:

定理 5 $\forall f, g \in C[a, b]$, 则

- (1) $|(f, g)| \leq \|f\|_2 \cdot \|g\|_2$; (哥西 - 许瓦兹不等式)
- (2) $\|f + g\|_2 \leq \|f\|_2 + \|g\|_2$; (三角不等式)
- (3) $\|f + g\|_2^2 + \|f - g\|_2^2 = 2(\|f\|_2^2 + \|g\|_2^2)$; (平行四边形定律)
- (4) 若 $(f, g) = 0$, 则 $\|f + g\|_2^2 = \|f\|_2^2 + \|g\|_2^2$. (勾股定律)

定义 7 (1) 若 $f(x), g(x) \in C[a, b]$, 满足 $(f, g) = 0$, 则称 $f(x)$ 与 $g(x)$ **正交**;

(2) 两两正交的非零函数族 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x), \dots$, 即

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \int_a^b \rho(x) \varphi_i(x) \varphi_j(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{当 } i \neq j; \\ A_j > 0 & \text{当 } i = j, \end{cases}$$

称 **正交函数族**.

定义 8 设有限函数列 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x) \in C[a, b]$. 若由

$$a_0 \varphi_0(x) + a_1 \varphi_1(x) + \dots + a_n \varphi_n(x) = 0$$

推出 $a_0 = a_1 = \dots = a_n = 0$, 则称 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 在 $[a, b]$ 上 **线性无关**. 而对于 **个数无穷** 的函数族 $\{\varphi_n(x)\}$, 若其中任何有限子函数列都是线性无关的, 则称 $\{\varphi_n(x)\}$ 为 **线性无关的函数族**.

显然函数族 $1, x, x^2, \dots, x^n, \dots$ 在任意区间 $[a, b]$ 上都是 **线性无关** 的.

定理 正交函数族一定是 **线性无关** 的.

证明 任取其中一个有限子函数列 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$,

并设 $a_0 \varphi_0(x) + a_1 \varphi_1(x) + \dots + a_n \varphi_n(x) = 0$, 往证每个 $a_k = 0$.

为此, 用 $\varphi_k(x)$ 分别与上式两边作内积, 得

左边 $= (a_0\varphi_0 + a_1\varphi_1 + \cdots + a_n\varphi_n, \varphi_k) = a_k(\varphi_k, \varphi_k) =$ 右边 $= 0$. 但 $(\varphi_k, \varphi_k) > 0$, 只能 $a_k = 0$.

设 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 是 $C[a, b]$ 中线性无关的函数列, 记

$$\text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n\} \triangleq \{a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x) \mid a_0, a_1, \cdots, a_n \in \mathbb{R}\},$$

定理6 连续函数列 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上线性无关的充要条件是

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

克莱姆 (Gramer) 行列式

2. 最佳平方逼近

设 $f(x) \in C[a, b]$, $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 是 $C[a, b]$ 中**线性无关**的函数列, 记 $\varphi = \text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n\}$. 若存在 $S^*(x) \in \varphi$, 使 $\|f(x) - S^*(x)\|_2 = \inf_{S \in \varphi} \|f(x) - S(x)\|_2$, 则称 $S^*(x)$ 是 $f(x)$ 在 φ 中的**最佳平方逼近函数**.

为求 $S^*(x)$, 令 $S^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x) = \sum_{j=0}^n a_j^*\varphi_j(x) \in \varphi$,

关键求 $a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*$. 为此, 作多元函数

$$I(a_0, a_1, \cdots, a_n) \triangleq \|S(x) - f(x)\|_2^2 = \int_a^b \rho(x) \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x) - f(x) \right]^2 dx.$$

考虑 $I(a_0, a_1, \cdots, a_n)$ 的最小值. 由**多元函数极值的必要条件**, 令

$$\frac{\partial I}{\partial a_i} = 2 \int_a^b \rho(x) \varphi_i \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j - f(x) \right] dx = 0 \quad (i = 0, 1, \cdots, n).$$

整理后可得到关于 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 的 $n+1$ 元**线性方程组**:

$$\sum_{j=0}^n (\varphi_i, \varphi_j) a_j = (\varphi_i, f) \quad (i = 0, 1, \cdots, n).$$

系数 (φ_i, φ_j) , **常数** $d_i = (\varphi_i, f)$ $(i, j = 0, 1, \cdots, n)$.

由于方程组的系数行列式 $G(\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n) \neq 0$, 故存在唯一解 $a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*$, 从而唯一得到 $S^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x)$.

注意: (1) 这时 $(\varphi_i, f - S^*) = \int_a^b \rho(x) \varphi_i \left[f(x) - \sum_{j=0}^n a_j^* \varphi_j \right] dx = 0$, 说明 $(S^* - S, f - S^*) = 0$.

(2) 若 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 两两正交, 则方程组变为 $(\varphi_i, \varphi_i)a_i = (\varphi_i, f)$, 即解 $a_i^* = \frac{(\varphi_i, f)}{(\varphi_i, \varphi_i)} (i = 0, 1, \dots, n)$.

以下验证 $S^*(x)$ 的确是 **最佳平方逼近函数**,
即 $\forall S(x) \in \varphi$, 有 $\|f(x) - S(x)\|_2^2 \geq \|f(x) - S^*(x)\|_2^2$. 事实上,
上式左边 $= \|f(x) - S^*(x) + S^*(x) - S(x)\|_2^2 = \|f(x) - S^*(x)\|_2^2 + \|S^*(x) - S(x)\|_2^2 \geq$ 右边.

(勾股定律)

若 $S^*(x)$ 是 $f(x)$ 在 φ 中的 **最佳平方逼近函数**:

(1) 则 $f(x) - S^*(x)$ 与 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 均正交;

(2) 若 $T^*(x)$ 也是 $f(x)$ 在 φ 中的最佳平方逼近函数, 则 $T^*(x) = S^*(x)$,
即最佳平方逼近函数是 **唯一** 的.

$$\begin{aligned} \|f(x) - S^*(x)\|_2^2 &= \|f(x) - T^*(x)\|_2^2 = \|f(x) - S^*(x) + S^*(x) - T^*(x)\|_2^2 = \|f(x) - S^*(x)\|_2^2 + \|S^*(x) - T^*(x)\|_2^2 \\ &\Rightarrow \|S^*(x) - T^*(x)\|_2 = 0 \Rightarrow S^*(x) = T^*(x). \end{aligned}$$

(3) 令 $\delta = f(x) - S^*(x)$ (**余项**), 则平方误差为

$$\|\delta\|_2^2 = (f - S^*, f - S^*) = (f - S^*, f) - (f - S^*, S^*) = (f, f) - (S^*, f) = \|f\|_2^2 - \sum_{j=0}^n a_j^* (\varphi_j, f).$$

§4 正交多项式

我们已知道, 如果 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 两两正交, 则 $\text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ 中 $f(x)$ 的 **最佳平方逼近函数** $S^*(x) = a_0^* \varphi_0(x) + a_1^* \varphi_1(x) + \dots + a_n^* \varphi_n(x)$ 满足 $a_i^* = \frac{(\varphi_i, f)}{(\varphi_i, \varphi_i)} (i = 0, 1, \dots, n)$.

特别, 如果 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 是两两正交的 **n 次多项式**, 并且 $\text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\} = H_n$. 则上述 $S^*(x)$ 就是 $f(x)$ 的 **最佳平方逼近 n 次多项式**, 所以关键是寻找两两正交的 **n 次多项式** 函数列.

1. 勒让德多项式 (Legendre)

区间取 $[-1, 1]$, 权函数取 $\rho(x) \equiv 1$, 构造 **勒让德多项式**:

$$P_0(x) = 1; \text{ 当 } n \geq 1 \text{ 时, } P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n].$$

由于 $(x^2 - 1)^n$ 是 $2n$ 次多项式, 所以求 n 阶导数之后即为 n 多项式,

$$\text{且首项系数 } a_n = \frac{\overbrace{(2n)(2n-1) \cdots (n+1)}^n}{2^n n!} = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}.$$

性质 1 正交性:

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

证明 令 $\varphi(x)=(x^2-1)^n$, 则 $\frac{1}{2^n n!}\varphi^{(n)}(x)=P_n(x)$, 并且 $\varphi^{(k)}(\pm 1)=0$ ($k < n$). 任取

$Q(x) \in C^n[-1, 1]$, 得

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 Q(x)P_n(x)dx &= \frac{1}{2^n n!} \int_{-1}^1 Q(x)\varphi^{(n)}(x)dx = \frac{1}{2^n n!} \int_{-1}^1 Q(x)d\varphi^{(n-1)}(x) \\ &= \frac{1}{2^n n!} [Q(x)\varphi^{(n-1)}(x)]_{-1}^1 - \frac{1}{2^n n!} \int_{-1}^1 \varphi^{(n-1)}(x)dQ(x) = -\frac{1}{2^n n!} \int_{-1}^1 Q'(x)\varphi^{(n-1)}(x)dx \\ &= -\frac{1}{2^n n!} \int_{-1}^1 Q'(x)d\varphi^{(n-2)}(x) = \frac{(-1)^2}{2^n n!} \int_{-1}^1 Q''(x)\varphi^{(n-2)}(x)dx = \dots = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \int_{-1}^1 Q^{(n)}(x)\varphi(x)dx. \end{aligned}$$

令 $Q(x)=P_m(x)$, 当 $m \neq n$ 时, 不妨设 $m < n$, 则 $\int_{-1}^1 P_m(x)P_n(x)dx = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \int_{-1}^1 P_m^{(n)}(x)\varphi(x)dx = 0$.

当 $m=n$ 时, $\int_{-1}^1 P_n^2(x)dx = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \int_{-1}^1 P_n^{(n)}(x)\varphi(x)dx = \frac{(-1)^n (2n)!}{2^{2n} (n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n dx = \frac{(2n)!}{2^{2n} (n!)^2} \int_{-1}^1 (1-x^2)^n dx$

作换元法 $x = \sin t$; $dx = \cos t dt$; $x: \int_{-1}^1 \Rightarrow t: \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}$, 得 $\int_{-1}^1 P_n^2(x)dx = \frac{(2n)!}{2^{2n} (n!)^2} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^{2n+1} t dt = \frac{2}{2n+1}$.

性质 2 奇偶性: $P_n(x)$ 与 n 同奇偶, 即 $P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$. 事实上, 因为 $\varphi(x) = (x^2-1)^2$ 是偶函数, 所以求导 n 次后, 若 n 是奇数, 则 $P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\varphi^{(n)}(x)$ 是奇函数; 若 n 是偶数, 则 $P_n(x)$ 是偶函数.

性质 3 递推关系: 令 $xP_n(x) = a_0 P_0(x) + a_1 P_1(x) + \dots + a_n P_n(x) + a_{n+1} P_{n+1}(x)$,

两边乘 $P_k(x)$ 后积分, 得 $\int_{-1}^1 xP_n(x)P_k(x)dx = a_k \int_{-1}^1 P_k^2(x)dx = a_k \frac{2}{2k+1}$.

当 $k \leq n-2$ 时, $a_k = \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^1 xP_n(x)P_k(x)dx = \int_{-1}^1 [xP_k(x)]P_n(x)dx = 0$;

当 $k=n$ 时, $a_k = \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^1 xP_n^2(x)dx = 0$; (奇函数积分)

$$a_{n-1} = \frac{2n-1}{2} \int_{-1}^1 xP_n(x)P_{n-1}(x)dx$$

$$= \frac{2n-1}{2} \frac{2n}{4n^2-1} = \frac{n}{2n+1};$$

$$a_{n+1} = \frac{2n+3}{2} \int_{-1}^1 xP_n(x)P_{n+1}(x)dx$$

$$= \frac{2n+3}{2} \frac{2(n+1)}{(2n+1)(2n+3)} = \frac{n+1}{2n+1}.$$

于是 $xP_n(x) = a_{n-1}P_{n-1}(x) + a_{n+1}P_{n+1}(x) = \frac{n}{2n+1}P_{n-1}(x) + \frac{n+1}{2n+1}P_{n+1}(x)$.

整理后得递推公式: $P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}xP_n(x) - \frac{n}{n+1}P_{n-1}(x)$ ($n = 1, 2, \dots$).

由 $P_0(x) = 1$; 而当 $n = 1$ 时, $P_1(x) = \frac{1}{2 \cdot 1!} \frac{d}{dx} [(x^2 - 1)^1] = \frac{1}{2} \frac{d}{dx} (x^2 - 1) = x$, 推出:

$$P_2(x) = (3x^2 - 1)/2, P_3(x) = (5x^3 - 3x)/2, P_4(x) = (35x^4 - 30x^2 + 3)/8, \dots$$

性质 4 记 **次数** 不超过 n 且 **首项系数** 为 1 的多项式全体的集合为 $\widetilde{H}_n \subseteq H_n$,

记 $\widetilde{P}_n(x) = \frac{2^n n!}{(2n)!} P_n(x)$, 则 $\widetilde{P}_n(x)$ 是 $\widetilde{H}_n$ 中 $f(x) \equiv 0$ 的 **最佳平方逼近多项式**.

(首项系数为 1)

事实上, 任取 $Q_n(x) \in \widetilde{H}_n$, 则 $Q_n(x) - \widetilde{P}_n(x)$ 是 $n-1$ 次多项式, 所以

$$Q_n(x) - \widetilde{P}_n(x) = \sum_{k=0}^{n-1} a_k \widetilde{P}_k(x), \text{ 即 } Q_n(x) = \widetilde{P}_n(x) + \sum_{k=0}^{n-1} a_k \widetilde{P}_k(x), \text{ 于是}$$

$$\|Q_n(x) - 0\|_2^2 = \int_{-1}^1 [Q_n(x)]^2 dx = (Q_n, Q_n) = (\widetilde{P}_n + \sum_{k=0}^{n-1} a_k \widetilde{P}_k, \widetilde{P}_n + \sum_{k=0}^{n-1} a_k \widetilde{P}_k) = \sum_{k=0}^{n-1} a_k^2 (\widetilde{P}_k, \widetilde{P}_k) \geq (\widetilde{P}_n, \widetilde{P}_n) = \|\widetilde{P}_n(x) - 0\|_2^2.$$

性质 5 $P_n(x)$ 在区间 $(-1, 1)$ 内有 n 个 **不同的实 0 点** (实根).

令 $\varphi(x) = (x^2 - 1)^n$. 由 $P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \varphi^{(n)}(x)$, 只需证 $\varphi^{(n)}(x)$ 在 $(-1, 1)$ 内有 n 个不同的实 0 点. 事实上,

$\varphi(x)$ 在 $[-1, 1]$ 内有 2 个不同的 0 点 ± 1 , 由罗尔定理, 得

$\varphi'(x)$ 在 $[-1, 1]$ 内有 1 个异于 ± 1 的 0 点, 加上 ± 1 所以 $\varphi'(x)$ 有 3 个 0 点;

$\varphi''(x)$ 在 $[-1, 1]$ 内有 2 个异于 ± 1 的 0 点, 加上 ± 1 所以 $\varphi''(x)$ 有 4 个 0 点;

.....

$\varphi^{(n-1)}(x)$ 在 $[-1, 1]$ 内有 $n-1$ 个异于 ± 1 的 0 点, 加上 ± 1 所以 $\varphi^{(n-1)}(x)$ 有 $n+1$ 个 0 点;

最后, $\varphi^{(n)}(x)$ 在 $[-1, 1]$ 内有 n 个异于 ± 1 的 0 点.

2. 切比雪夫多项式 (Tchebyshev)

区间取 $[-1, 1]$, 定义 $T_n(x) = \cos(n \arccos x) \quad |x| \leq 1$, 称 **切比雪夫多项式**.

若令 $x = \cos \theta$, 则 $\theta = \arccos x \Rightarrow T_n(x) = \cos n\theta, \quad 0 \leq \theta \leq \pi$.

性质 1 递推关系:

$$\begin{cases} T_0(x) = 1, T_1(x) = x, \\ T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, \dots \end{cases}$$

事实上, 由 $\begin{cases} \cos(n+1)\theta = \cos n\theta \cos \theta - \sin n\theta \sin \theta \\ \cos(n-1)\theta = \cos n\theta \cos \theta + \sin n\theta \sin \theta \end{cases}$, 两式相加, 得

$\cos(n+1)\theta = 2\cos n\theta \cos \theta - \cos(n-1)\theta$, 即 $T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$, $n = 1, 2, \dots$.

于是, $T_0(x) = 1$, $T_1(x) = x$, $T_2(x) = 2x^2 - 1$, $T_3(x) = 4x^3 - 3x$, $T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1, \dots$,
(见 P58 表 3-1)

由递推关系, $T_n(x)$ 是 n 次多项式, 首项系数为 2^{n-1} .

性质 2 $T_n(x)$ 与 $f(x) \equiv 0$ 的偏差最小, 即 $T_n(x)$ 是 $f(x) \equiv 0$ 的最佳逼近多项式.

定理 6 在区间 $[-1, 1]$ 上的首项系数为 1 的 n 次多项式中, $\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$ 与 $f(x) \equiv 0$ 的偏差最小, 并且偏差为 $\frac{1}{2^{n-1}}$.

证明 记 $\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x) = x^n - P_{n-1}^*(x)$, 其中 $P_{n-1}^*(x)$ 是某 $n-1$ 次多项式.

而点 $x_k = \cos \frac{k}{n}\pi$ ($k=0, 1, 2, \dots, n$) 是 $x^n - P_{n-1}^*(x)$ 的 $n+1$ 个正负交错的偏差点组.

事实上 $\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x_k) = \frac{1}{2^{n-1}}\cos k\pi = (-1)^k \frac{1}{2^{n-1}}$, 而 $|x^n - P_{n-1}^*(x)| = \left| \frac{1}{2^{n-1}}T_n(x) \right| \leq \frac{1}{2^{n-1}}$.

故 $P_{n-1}^*(x)$ 是 x^n 的 $n-1$ 次最佳逼近多项式,

从而 $\left| \frac{1}{2^{n-1}}T_n(x) - 0 \right| = |x^n - P_{n-1}^*(x)|$ 的偏差最小.

例 3(P59) 求 $f(x) = 2x^3 + x^2 + 2x - 1$ 在区间 $[-1, 1]$ 上的最佳 2 次逼近多项式.

解 令 $Q(x) = \frac{1}{2}[f(x) - P_2^*(x)]$ (3 次多项式, 首项系数为 1). 由 $\|f(x) - P_2^*(x)\|_\infty = 2\|Q(x) - 0\|_\infty$

及定理 6, 首项系数为 1 的 3 次多项式中, $Q(x) = \frac{1}{2^{3-1}}T_3(x)$ 与 $f(x) \equiv 0$ 的偏差最小, 于是 $\frac{1}{2}[f(x) - P_2^*(x)] = \frac{1}{2^{3-1}}T_3(x)$, 解得

$$P_2^*(x) = f(x) - 2\frac{1}{2^{3-1}}T_3(x) = (2x^3 + x^2 + 2x - 1) - \frac{1}{2}(4x^3 - 3x) = x^2 + \frac{7}{2}x - 1.$$

性质 3 切比雪夫多项式函数列 $\{T_n(x)\}$ 在区间 $[-1, 1]$ 上带权 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 正交. 即

$$(T_n, T_m) = \int_{-1}^1 \frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx = \begin{cases} 0 & \text{当 } m \neq n; \\ \frac{\pi}{2} & \text{当 } m = n \neq 0; \\ \pi & \text{当 } m = n = 0. \end{cases}$$

事实上, 作变换 $x = \cos \theta$, $dx = -\sin \theta d\theta$, $\sqrt{1-x^2} = \sin \theta$, $x: \int_{-1}^1 \Rightarrow t: \int_{\pi}^0$, 则

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

性质 4 奇偶性: $T_0(x)=1$ 偶, $T_1(x)=x$ 奇, 而 $T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x)$ 与 $T_{n-1}(x)$ 同奇偶, 所以 $T_n(x)$ 与 n 同奇偶.

性质 5 $T_n(x)$ 在 $[-1, 1]$ 有 n 个实 0 点: $x_k = \cos \frac{2k-1}{2n}\pi$, $k = 1, 2, \dots, n$,
事实上, $T_n(x_k) = \cos(n \arccos x_k) = \cos \frac{2k-1}{2}\pi = 0$.

定理 设 $f(x) \in C[-1, 1]$. 若以 $x_k = \cos \frac{2k-1}{2n}\pi \in [-1, 1]$ ($k=1, 2, \dots, n$) 为插值节点作 $f(x)$ 的 $n-1$ 次插值多项式 $L_{n-1}(x)$, 则 $L_{n-1}(x)$ 是 H_{n-1} 中 $f(x)$ 的最佳逼近多项式, 即 $\|f(x) - L_{n-1}(x)\|_{\infty}$ 达到最小.

证明 由 $f(x) - L_{n-1}(x) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \omega_n(x)$, 其中 $\omega_n(x) = (x-x_1)(x-x_2) \cdots (x-x_n) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$ (首项系数为 1).

于是 $\|f(x) - L_{n-1}(x)\|_{\infty} \leq \frac{\|f^{(n)}(\xi)\|_{\infty}}{n!} \left\| \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x) - 0 \right\|_{\infty}$, 而 $\frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$ 与 0 的偏差最小.

§5 函数按正交多项式展开

取正交多项式 $\{g_0(x), g_1(x), \dots, g_n(x)\}$ 作基, 求 $f(x) \in C[a, b]$ 的 **最佳平方逼近多项式** $S_n(x) = a_0 g_0(x) + a_1 g_1(x) + \dots + a_n g_n(x)$, 由正交性, 已知

$$a_k = \frac{(f, g_k)}{(g_k, g_k)} \quad (k = 0, 1, \dots, n) \Rightarrow S_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{(f, g_k)}{(g_k, g_k)} g_k(x).$$

平方误差为 $\|f(x) - S_n(x)\|_2 = \sqrt{\|f\|_2^2 - \sum_{k=0}^n \frac{(f, g_k)^2}{(g_k, g_k)}} = \sqrt{\|f\|_2^2 - \sum_{k=0}^n a_k^2 \|g_k\|_2^2}$.

例 4(P62) 求 $f(x) = e^x$ 在区间 $[-1, 1]$ 上的 3 次最佳平方逼近多项式.

解 (1) 用勒让德正交多项式作基, 即令 $S_3^*(x) = a_0^* P_0(x) + a_1^* P_1(x) + a_2^* P_2(x) + a_3^* P_3(x)$,

已知 $a_k^* = \frac{(f, P_k)}{(P_k, P_k)} = \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^1 f(x) P_k(x) dx$, 计算得

$$a_0^* = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 e^x \cdot 1 dx = \frac{e - e^{-1}}{2} \approx 1.175; \quad a_1^* = \frac{3}{2} \int_{-1}^1 e^x \cdot x dx \approx 1.1036;$$

$$a_2^* = \frac{5}{2} \int_{-1}^1 e^x \left(\frac{3}{2} x^2 - \frac{1}{2} \right) dx \approx 0.3578; \quad a_3^* = \frac{7}{2} \int_{-1}^1 e^x \left(\frac{5}{2} x^3 - \frac{3}{2} x \right) dx \approx 0.07046.$$

$$\begin{aligned} \text{于是 } S_3^*(x) &= 1.175P_0(x) + 1.1036P_1(x) + 0.3578P_2(x) + 0.07046P_3(x) \\ &= 1.175 + 1.1036x + 0.3578\left(\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}\right) + 0.07046\left(\frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x\right) \\ &= 0.9963 + 0.9979x + 0.5367x^2 + 0.1761x^3. \end{aligned}$$

$$\text{平方误差为 } \|e^x - S_3^*(x)\|_2 = \sqrt{\int_{-1}^1 e^{2x} dx - \sum_{k=0}^n \frac{2}{2k+1} a_k^{*2}} \leq 0.0084.$$

(2) 用切比雪夫正交多项式作基, 即令 $S_3^*(x) = b_0^*T_0(x) + b_1^*T_1(x) + b_2^*T_2(x) + b_3^*T_3(x)$.

$$\text{得 } b_k^* = \frac{(f, T_k)}{(T_k, T_k)} = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{\cos x} d\theta & \text{当 } k = 0; \\ \frac{2}{\pi} \int_0^\pi e^{\cos \theta} \cos k\theta d\theta & \text{当 } k \geq 1. \end{cases}$$

§7 曲线拟合的最小二乘法

已知函数 $y = f(x)$ 有一组实验数据 $(x_i, y_i) (0, 1, 2, \dots, m)$, 试求逼近函数

$S^*(x) \in \text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$, 使在点 x_i 上的误差 $S^*(x_i) - y_i$ 按某种标准最小.

为此, 设 $S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_n\varphi_n(x) = \sum_{j=0}^n a_j\varphi_j(x)$,

考虑 **加权平方和** $\|\delta\|_2^2 \triangleq \sum_{i=0}^m \rho(x_i)[S(x_i) - y_i]^2$, 其中 $\rho(x) \geq 0$ 是 **权函数**.

问题: 什么样的一组 $\{a_i\}$ 使 $\|\delta\|_2$ 最小?

即化为多元函数 $I(a_0, a_1, \dots, a_n) \triangleq \sum_{i=0}^m \rho(x_i) \left[\sum_{j=0}^n a_j\varphi_j(x_i) - y_i \right]^2$ 的极小值

问题.

令 $\frac{\partial I}{\partial a_k} = 0$, 即 $\sum_{i=0}^m \rho(x_i) \varphi_k(x_i) \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x_i) - y_i \right] = 0 \quad (k = 0, 1, 2, \dots, n)$.

定义 **离散内积**: $(f, g) \triangleq \sum_{i=0}^m \rho(x_i) f(x_i) g(x_i)$, 则上式即为关于 $a_0, a_1, \dots, a_n$

的 $n+1$ 元线性方程组:

$$\sum_{j=0}^n a_j \sum_{i=0}^m \rho(x_i) \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i) = \sum_{i=0}^m \rho(x_i) \varphi_k(x_i) y_i \Rightarrow \sum_{j=0}^n (\varphi_k, \varphi_j) a_j = (\varphi_k, y) \quad (k=0, 1, \dots, n).$$

特别, 如果 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 两两离散正交, 即

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

则 $a_k^* = \frac{(\varphi_k, y)}{A_k} \quad (k = 0, 1, 2, \dots, n)$, 平方误差为 $\|\delta\|_2^2 = \|f\|_2^2 - \sum_{k=0}^n A_k a_k^{*2}$.

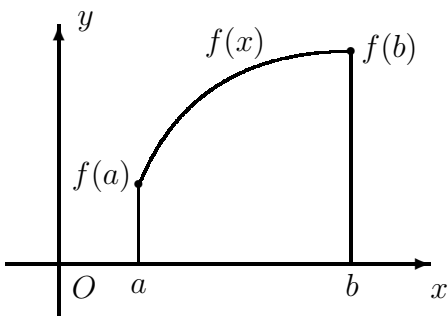
第四章 数值积分

§1 引言

1. 关于定积分与求积公式

函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上的 **定积分** 定义为:

$$I = \int_a^b f(x) dx \triangleq \lim_{\lambda \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n f(\xi_i) \Delta x_i \approx \sum_{i=1}^n f(x_i) \Delta x_i.$$



牛顿—莱布尼兹公式: $\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$,

其中 $F(x)$ 是 $f(x)$ 的一个 **原函数**, 即 $F'(x) = f(x)$.

问题: 往往 $f(x)$ 的原函数 $F(x)$ 并没有初等表达式 (即不可积), 或即使可积, 但原函数 $F(x)$ 的准确函数值不易计算, 所以必须寻求定积分的 **数值计算方法**.

定积分中值定理: $\int_a^b f(x) dx = (b-a)f(\xi)$, $\xi \in (a, b)$. 要求 $f(x) \in C[a, b]$.

事实上求 ξ 也不可能, 只能通过近似计算求 $f(\xi)$. 比如

(1) $f(\xi) \approx \frac{f(a) + f(b)}{2}$, 得 $T = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$; (梯形公式)

(2) $f(\xi) \approx f\left(\frac{a+b}{2}\right)$, 得 $R = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$. (矩形公式)

一般取 $\sum_{k=0}^n \rho_k f(x_k) \approx f(\xi)$, 其中 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 是区间 $[a, b]$ 上的节点,

ρ_k 是各节点的权, 满足 $\sum_{k=0}^n \rho_k = 1$.

从而 $\int_a^b f(x) dx = (b-a)f(\xi) \approx (b-a) \sum_{k=0}^n \rho_k f(x_k) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$, 其中 $A_k = (b-a)\rho_k$.

定义 在区间 $[a, b]$ 上取节点 $x_0, x_1, \dots, x_n$. 若近似地有

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) \triangleq I_n.$$

则称这个公式为 **求积公式**, x_k 称为 **求积节点**, A_k 称为 **求积系数**, 也称为 x_k 的 **权**.

要求: A_k 仅与 x_k 有关, 与 $f(x)$ 无关.

求积公式的特征: (1) 通用性; (2) 近似性.

2. 代数精度

求积公式是近似公式, 只能要求 **尽可能** 准确成立. 但如何做到尽可能? 评价的标准是什么?

(1) 求积公式对 **尽可能多** 的函数成立;

(2) 求积公式对 **次数尽可能高** 的多项式成立.

定义1 若 **求积公式** $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ (1.3)

当 $f(x) \in H_m$ (次数 $\leq m$ 的多项式函数) 准确成立, 而当 $f(x)$ 的次数为 $m+1$ 时公式不一定准确成立, 则称这个求积公式 **具有 m 次代数精度**.

容易知道:

(1) 梯形公式 $\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$ (节点 2 个: a, b) 与

矩形公式 $\int_a^b f(x)dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ (节点 1 个: $\frac{a+b}{2}$)

都具有一次代数精度.

(2) 若公式 (1.3) 具有 m 次代数精度, 即对 $f(x) = 1, x, \dots, x^m$ 都准确成立, 则

$$\sum A_k = \int_a^b 1dx = b-a; \quad \sum A_k x_k = \int_a^b xdx = \frac{1}{2}(b^2 - a^2); \quad \dots\dots$$

$$\sum A_k x_k^m = \frac{1}{m+1}(b^{m+1} - a^{m+1}).$$

3. 插值型求积公式

问题: 如何构造具有较高代数精度的求积公式? 节点 $x_k = ?$ 权 $A_k = ?$

由插值法知 $f(x) \approx L_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) l_k(x)$.

(其中 $l_k(x) = \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}$ 是 **插值基函数**)

两边积分, 得 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n \left[\int_a^b l_k(x)dx \right] f(x_k)$, 即 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$. (与 $f(x)$

无关)

定义 求积系数 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$ 的求积公式称为 **插值型** 求积公式.

$$\text{插值型求积公式的余项 } R[f] = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x) dx.$$

定理1 求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ 具有 n 次代数精度 $\iff$ 它是插值型的.

证明 “ $\Rightarrow$ ” 分别取 $f(x)=l_j(x)$ ($j=0, 1, \dots, n$) 代入求积公式, 则公式准确成立, 即得

$$\int_a^b l_j(x)dx = \sum_{k=0}^n A_k l_j(x_k) = A_j \text{ (因为当 } k \neq j \text{ 时, } l_j(x_k) = 0 \text{)}.$$

“ $\Leftarrow$ ” 设 $f(x)$ 的次数 $\leq n$, 则直接得 $\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x) = 0$, 故余项 $R[f] = 0$. **证毕**

§2 牛顿 - 柯特斯公式

1. 柯特斯系数

对区间 $[a, b]$ 作 n 等分, 步长 $h = \frac{b-a}{n}$, 得等距节点 $x_k = a + kh$ ($k = 0, 1, \dots, n$).

$$\text{这时 } A_k = \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{x-x_j}{x_k-x_j} dx = h \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{t-j}{k-j} dt,$$

其中 $x=a+ht$, $dx=hdt$, $x: \int_a^b \Rightarrow t: \int_0^n$, 并且 $x-x_j=(t-j)h$, $x_k-x_j=(k-j)h$.

令 $C_k^{(n)} = \frac{A_k}{b-a}$, 称柯特斯系数, 这时求积公式称 **牛顿 - 柯特斯公式**.

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

其中, 分母 $\underbrace{(k-0)(k-1) \cdots (k-(k-1))}_{k!} \underbrace{(k-(k+1))(k-(k+2)) \cdots (k-n)}_{(-1)^{n-k}(n-k)!}$

可以证明: $C_{n-k}^{(n)} = C_k^{(n)}$. (**对称性**)

例 当 $n=1$ 时, $C_0^{(1)} = (-1) \int_0^1 (t-1)dt = \frac{1}{2} = C_1^{(1)}$. (**对称性**)

于是 $I_1 = (b-a)[C_0^{(1)} f(a) + C_1^{(1)} f(b)] = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] \triangleq T$. (**梯形公式**)

$$\text{当 } n=2 \text{ 时, } C_0^{(2)} = C_2^{(2)} = \frac{1}{4} \int_0^2 t(t-1)dt = \frac{1}{4} \int_0^2 (t^2-t)dt = \frac{1}{4} \left(\frac{8}{3} - \frac{4}{2} \right) = \frac{1}{6},$$

$$C_1^{(2)} = -\frac{1}{2} \int_0^2 t(t-2)dt = -\frac{1}{2} \int_0^2 (t^2-2t)dt = -\frac{1}{2} \left(\frac{8}{3} - \frac{8}{2} \right) = \frac{4}{6}.$$

这时的求积公式 $I_2 = \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \triangleq S$. (辛甫公式)

柯特斯系数 ($n \leq 6$) 见下表:

表 4-1(P86)

n	$C_k^{(n)}$					
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$			
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$		
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$	
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$

这说明当 n 较大时, 牛顿 - 柯特斯 公式不宜用.

2. 偶阶求积公式的代数精度

定理2 当 n 为偶数时, 牛顿 - 柯特斯公式至少具有 $n+1$ 次代数精度.

证明 设 $f(x) \in H_{n+1}$, 往证牛顿 - 柯特斯公式对 $f(x)$ 准确成立, 即证余项 $R[f]=0$.

$$\text{事实上, } R[f] = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x) dx = \int_a^b \omega_{n+1}(x) dx = h^{n+2} \int_0^n \prod_{j=0}^n (t-j) dt$$

$$= h^{n+2} \int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} \prod_{j=0}^n \left(u + \frac{n}{2} - j\right) du = h^{n+2} \int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} \prod_{i=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} (u-i) dt = h^{n+2} \int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} u \prod_{i=1}^{\frac{n}{2}} (u^2 - i^2) dt = 0.$$

(奇函数在对称区间上积分)

$$\text{其中 } u = t - \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} \text{ 为整数} \right), \quad t: \int_0^n \Rightarrow u: \int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}; \quad i = j - \frac{n}{2}, \quad j: \prod_{j=0}^n \Rightarrow i: \prod_{i=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}.$$

3. 关于低阶求积公式的余项

(1) 当 $n=1$ 时, 求积公式为 **梯形公式**. 余项 $R_T = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2} (x-a)(x-b) dx$.

由 $(x-a)(x-b) \leq 0$, 则 $\exists \eta \in (a, b)$,

$$\text{使 } R_T = \frac{f''(\eta)}{2} \int_a^b (x-a)(x-b) dx = \frac{f''(\eta)}{2} \int_a^b (x-a)^2 + (x-a)(b-a) dx = -\frac{f''(\eta)}{12} (b-a)^3.$$

定积分中值定理: 若 $f(x) \in C[a, b]$, $g(x)$ 保号, 则 $\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi) \int_a^b g(x)dx$, $\xi \in (a, b)$.

证明 不妨设 $g(x) \leq 0$. 设 M, m 是 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的最大最小值, 即 $m \leq f(x) \leq M$,

则 $mg(x) \geq f(x)g(x) \geq Mg(x) \Rightarrow m \int_a^b g(x)dx \geq \int_a^b f(x)g(x)dx \geq M \int_a^b g(x)dx$.

$$m \leq \frac{\int_a^b f(x)g(x)dx}{\int_a^b g(x)dx} \leq M \Rightarrow f(\xi) = \frac{\int_a^b f(x)g(x)dx}{\int_a^b g(x)dx}, \quad \xi \in (a, b) \Rightarrow \int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi) \int_a^b g(x)dx.$$

(2) 当 $n=2$ 时, 求积公式为 **辛甫生公式**.

取等距节点 $a < c = \frac{a+b}{2} < b$ 作 3 次插值多项式 $H(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$,

使 $H(a) = f(a)$, $H(b) = f(b)$, $H(c) = f(c)$, $H'(c) = f'(c)$. 可解出 4 个未定元 a_0, a_1, a_2, a_3 .

由定理 2 知辛甫生公式具有 3 次代数精度, 即 $\int_a^b H(x)dx = \frac{b-a}{6} [H(a) + 4H(c) + H(b)]$.

从而 $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(c) + f(b)] = \frac{b-a}{6} [H(a) + 4H(c) + H(b)] = \int_a^b H(x)dx$.

由于插值余项: $R(x) = f(x) - H(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} (x-a)(x-c)^2(x-b)$.

事实上, 作 $\phi(t) = f(t) - H(t) - \frac{f(x) - H(x)}{(x-a)(x-c)^2(x-b)} (t-a)(t-c)^2(t-b)$.

显然 $\phi(t)$ 有 4 个 0 点 a, c, b, x , 因此 $\phi'(t)$ 有 3+1 个 0 点 (另一个 0 点是 c), 可得

$$0 = \phi^{(4)}(\xi) = f^{(4)}(\xi) - 0 - \frac{f(x) - H(x)}{(x-a)(x-c)^2(x-b)} 4!. \text{ 整理后即得余项公式.}$$

于是辛甫生公式的余项:

$$\begin{aligned} R_S &= \int_a^b [f(x) - H(x)]dx = \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} (x-a)(x-c)^2(x-b)dx = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!} \int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)dx \\ &= -\frac{b-a}{180} \left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta). \end{aligned}$$

4. 复化求积法

对区间 $[a, b]$ 作 n 等分, 步长 $h = \frac{b-a}{n}$, 分点 $x_k = a + kh$ ($k = 0, 1, \dots, n$).

在每个小区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上用 **低阶** 求积公式 (比如梯形公式, 辛甫生公式),

然后求和, 这种方法称 **复化求积法**, 即

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1} I_k,$$

其中 I_k 表示小区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上求 $\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$ 的低阶求积公式.

(1) **复化梯形公式:** $I_k = \frac{h}{2} [f(x_k) + f(x_{k+1})]$,

$$\text{则 } T_n = \sum_{k=0}^{n-1} I_k = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{2} [f(x_k) + f(x_{k+1})] = \frac{h}{2} [f(a) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)].$$

$$(2) \text{ 复化辛甫生公式: } I_k = \frac{h}{6} [f(x_k) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})],$$

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

复习:

$$(1) f(x) \in C[a, b], x_0, x_1, \dots, x_{n-1} \in [a, b], \text{ 则 } \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f(x_k) = f(\xi), \quad \xi \in [a, b];$$

事实上, 由 $m \leq \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f(x_k) \leq M$ 即得.

$$(2) \text{ 梯形公式余项 } R_T = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2} (x-a)(x-b) dx = \frac{f''(\eta)}{2} \int_a^b (x-a)(x-b) dx = -\frac{f''(\eta)}{12} (b-a)^3;$$

$$(3) \text{ 辛甫生公式余项 } R_S = \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} (x-a)(x-c)^2(x-b) dx = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta).$$

于是 **复化梯形公式** 与 **复化辛甫生公式** 的余项分别为:

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

(与 h^2 成正比, 即是 $O(h^2)$ 阶无穷小)

$$I - S_n = \sum_{k=0}^{n-1} \left[-\frac{h^5}{2880} f^{(4)}(\eta_k) \right] = -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\eta). \text{ (与 } h^4 \text{ 成正比, 即是 } O(h^4) \text{ 阶无穷小)}$$

例1(P89) 根据表 4-2 提供的插值条件, 利用复化求积法计算 $I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$.

解 将区间 $[0, 1]$ 划为 $n = 8$ 等分, 用复化梯形公式计算, 得 $T_8 = 0.9456909$; 而如果把区间 $[0, 1]$ 划为 $n = 4$ 等分, 并改用复化辛甫生公式计算, 也用到 9 个点的函数值, 得 $S_4 = 0.9460832$. 注意直接计算积分可得 $I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx = 0.9460831$. 显然 S_4 更接近.

§3 龙贝格算法

1. 梯形法的递推化

对于 **复化求积法**, 显然增加分点, 减少步长可提高精度. 但要保持已有的结果, 则采用所谓的逐次分半法, 即在 $[x_k, x_{k+1}]$ 上, 对梯形公式已有 $I_k = \frac{h}{2} [f(x_k) + f(x_{k+1})]$, 加入一个分点 $x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$, 得 $\frac{h}{4} [f(x_k) + 2f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})]$, 于是

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

注: $x_{k+\frac{1}{2}}$ 取遍每个小区间的中点.

例2(P91) 计算积分 $I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$.

解 设 $f(x) = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$. 先对整个 $[0, 1]$ 区间使用梯形公式, 则由 $f(0) = 1$, $f(1) = 0.8414709$, 得

$$T_1 = \frac{1}{2}[f(0)+f(1)] = 0.9207355.$$

再对 $[0, 1]$ 区间二等分, 并求出中点函数值 $f(\frac{1}{2}) = 0.9588510$, 由递推公式, 得

$$T_2 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{1}{2}f(\frac{1}{2}) = 0.9397933.$$

进一步二分, 并计算新分点的函数值: $f(\frac{1}{4}) = 0.9896158$, $f(\frac{3}{4}) = 0.9088516$, 又得

$$T_4 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{1}{4}[f(\frac{1}{4}) + f(\frac{3}{4})] = 0.9445135. \dots\dots$$

2. 龙贝格公式

考虑复化梯形公式, 误差 $I - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)$, 近似地与 h^2 成正比, 于是近似地有

$$\frac{I-T_{2n}}{I-T_n} \approx \frac{(\frac{h}{2})^2}{h^2} = \frac{1}{4} \Rightarrow 4(I-T_{2n}) \approx I-T_n \Rightarrow 3(I-T_{2n}) \approx T_{2n}-T_n \Rightarrow I-T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n}-T_n).$$

由于 $I = T_{2n} + (I - T_{2n}) \approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$, 作为一种 补偿,

则 $\bar{T} = T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$ 应比 T_{2n} 更精确.

事实上, 直接验证知: $S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$, 即补偿后的复化梯形公式与高一阶的复化辛甫生公式等值.

同理, 复化辛甫生公式的误差 $I - S_n = -\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta)$, 近似地与 h^4 成正比, 于是也近似地有

$$\frac{I-S_{2n}}{I-S_n} \approx \frac{(\frac{h}{2})^4}{h^4} = \frac{1}{16} \Rightarrow 16(I-S_{2n}) \approx I-S_n \Rightarrow 15(I-S_{2n}) \approx S_{2n}-S_n \Rightarrow I-S_{2n} \approx \frac{1}{15}(S_{2n}-S_n).$$

仍由 $I = S_{2n} + (I - S_{2n}) \approx S_{2n} + \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n)$, 作为一种 补偿,

则 $\bar{S} = S_{2n} + \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n) = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n$ 比 S_{2n} 更精确.

的确, 补偿后的复化辛甫生公式与更高阶的复化柯特斯公式等值:

$$C_n = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n.$$

重复同样的手段, 即对柯特斯公式也进行补偿, 就可得到更高阶的复化求积公式:

$$R_n = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n. \text{ (称 龙贝格公式)}$$

龙贝格算法:

$$T_0(h) \triangleq T_n \text{ (复化梯形公式);}$$

$$T_1(h) \triangleq \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n = \frac{4}{4-1}T_0\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{4-1}T_0(h) \text{ (复化辛甫生公式);}$$

$$T_2(h) \triangleq \frac{4^2}{4^2-1}T_1\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{4^2-1}T_1(h) \text{ (复化柯特斯公式);}$$

.....

$$T_k(h) = \frac{4^k}{4^k-1}T_{k-1}\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{4^k-1}T_{k-1}(h) \text{ 称 龙贝格算法.}$$

例3(P93) 用 **龙贝格算法** 计算积分 $I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$.

解 先利用复化梯形公式计算 $(n = 1, 2, 4, \dots, 2^k, \dots)$, 即下表第一列:

表 4-4(P93)

k	$T_0(h/2^k)$	$T_1(h/2^{k-1})$	$T_2(h/2^{k-2})$	$T_3(h/2^{k-3})$
0	$T_1 = 0.9207355$			
1	$T_2 = 0.9397933$	$S_1 = 0.9461459$		
2	$T_4 = 0.9445135$	$S_2 = 0.9460869$	$C_1 = 0.9460830$	
3	$T_8 = 0.9456909$	$S_4 = 0.9460833$	$C_2 = 0.9460831$	$R_1 = 0.9460831$

于是 $I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \approx R_1 = 0.9460831$.

§4 高斯公式

1. 高斯点

定义: 若求积公式 $\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ 具有 $2n+1$ 次代数精度, 则称为 **高斯公式**, 其中的求积节点称为 **高斯点**.

问题：有没有高斯点？如何求高斯点？

定理4：设节点为 $x_k (k = 0, 1, \dots, n)$, 记 $\omega(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) = \prod_{k=0}^n (x-x_k)$.

(以这些节点为根的最小首1多项式)

作 **插值型** 求积公式: $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$, 其中 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$. 则

$x_0, x_1, \dots, x_n$ 是高斯点 $\iff \forall P(x) \in H_n$, 都有 $\int_a^b P(x)\omega(x)dx = 0$.

(即 $\omega(x)$ 与任意次数 $\leq n$ 的多项式 $P(x)$ 正交)

证明 “ $\Rightarrow$ ” 任取 $P(x) \in H_n$, 往证 $\int_a^b P(x)\omega(x)dx = 0$.

事实上, $P(x)\omega(x)$ 的次数 $\leq n+(n+1) = 2n+1$, 由于 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 是高斯点, 所以求积公式对 $P(x)\omega(x)$ 准确成立, 即 $\int_a^b P(x)\omega(x)dx = \sum_{k=0}^n A_k P(x_k)\omega(x_k) = 0$.

但每个 x_k 都是 $\omega(x)$ 的根, 所以 $\omega(x_k) = 0 (k = 0, 1, \dots, n)$, 从而 $\int_a^b P(x)\omega(x)dx = 0$.

“ $\Leftarrow$ ” 任取 $f(x) \in H_{2n+1}$, 往证 $\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$.

事实上, 由多项式除法, 存在 $P(x), Q(x) \in H_n$, 使 $f(x) = P(x)\omega(x) + Q(x)$. 于是

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P(x)\omega(x)dx + \int_a^b Q(x)dx = \sum_{k=0}^n A_k Q(x_k) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$$

由条件知 $\int_a^b P(x)\omega(x)dx = 0$, 由插值型公式知 $\int_a^b Q(x)dx = \sum_{k=0}^n A_k Q(x_k)$,

并且 $f(x_k) = P(x_k)\omega(x_k) + Q(x_k) = Q(x_k) (k = 0, 1, \dots, n)$.

2. 高斯 - 勒让德多项式

考虑 $[-1, 1]$ 区间上的高斯公式. 由于 $n+1$ 次 **勒让德多项式** $P_{n+1}(x)$ 与 $P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_2(x), \dots, P_n(x)$ 正交, 因此就与所有次数不超过 n 次的多项式正交, 即其 0 点都是高斯点. 这时的高斯公式称 **高斯 - 勒让德公式**.

例 令 $n = 1$. 取 $P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$ 的两个 0 点 $\pm \frac{1}{\sqrt{3}}$ 作高斯 - 勒让德公式:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx A_0 f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + A_1 f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right). \text{ (具有 3 次代数精度)}$$

为求系数 A_0, A_1 , 分别代入 $f(x) \equiv 1, f(x) \equiv x$, 应准确成立:

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ -\frac{A_0}{\sqrt{3}} + \frac{A_1}{\sqrt{3}} = 0 \end{cases}, \text{ 解得 } \begin{cases} A_0 = 1 \\ A_1 = 1 \end{cases}, \text{ 即 } \int_{-1}^1 f(x)dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

3. 高斯公式的余项

定理5 高斯公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ 的余项:

$$R = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b \omega^2(x)dx.$$

证明 取定 $f(x)$. 在节点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 上构造次数不超过 $2n+1$ 的 Hermite 插值多项式 $H(x)$, 满足 $H(x_k)=f(x_k), H'(x_k)=f'(x_k) (k=0, 1, \dots, n)$.

$$\text{这时 } \int_a^b H(x)dx = \sum_{k=0}^n A_k H(x_k) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k).$$

$$\begin{aligned} \text{于是, } R &= \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b H(x)dx = \int_a^b [f(x) - H(x)]dx \\ &= \int_a^b \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \omega^2(x)dx = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b \omega^2(x)dx. \quad (\omega^2(x) \text{ 保号}) \end{aligned} \quad \text{证毕}$$

习题选讲(P106)

1. 确定下列求积公式中的待定参数, 使求积公式的代数精度尽量高:

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

解 分别将 $f(x) \equiv 1, x, x^2$ 代入, 并令求积公式成立:

$$\begin{cases} A_{-1} + A_0 + A_1 = 2h \\ A_{-1}(-h) + 0 + A_1h = 0 \\ A_{-1}(-h)^2 + 0 + A_1h^2 = \frac{2}{3}h^3 \end{cases}, \text{解得 } A_{-1}=A_1=\frac{h}{3}, A_0=\frac{4h}{3},$$

$$\text{即 } \int_{-h}^h f(x)dx \approx \frac{h}{3}f(-h) + \frac{4h}{3}f(0) + \frac{h}{3}f(h). \text{ 具有 3 次代数精度}$$

$$\text{直接计算知: } \int_{-h}^h x^3dx = 0 = \frac{h}{3}(-h)^3 + 0 + \frac{h}{3}h^3.$$

$$\int_{-h}^h x^4dx = \frac{2h^5}{5} \neq \frac{h}{3}(-h)^4 + 0 + \frac{h}{3}h^4.$$

2.

$$1) \text{ 用辛甫生公式计算 } \int_0^1 \frac{x}{4+x^2}dx = \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] = \frac{1}{6} \left(0 + 4 \frac{\frac{1}{2}}{4 + \frac{1}{4}} + \frac{1}{5} \right) = \frac{19}{170}.$$

$$3) \text{ 用复化梯形公式计算 } \int_1^9 \sqrt{x}dx \quad (n=4).$$

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

$$\text{由于 } n=4, h=2, x_0=1, x_1=3, x_2=5, x_3=7, x_4=9.$$

$$\text{则 } T_4 = \sum_{k=0}^3 I_k = \frac{2}{2} \left[f(1) + 2 \sum_{k=1}^3 f(x_k) + f(9) \right] = 1 + 2(\sqrt{3} + \sqrt{5} + \sqrt{7}) + 3 = 4 + 2(\sqrt{3} + \sqrt{5} + \sqrt{7}).$$

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

其中: $x_{k+\frac{1}{2}}$ 取遍每个小区间的中点 (即新增加的分点).

则由 $T_1 = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] = \frac{9-1}{2} (\sqrt{9} + \sqrt{1}) = 16$, 得

$T_2 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{9-1}{2} f(5) = 8 + 4\sqrt{5}, \quad T_4 = \frac{1}{2}T_2 + 2(\sqrt{3} + \sqrt{7}) = 4 + 2(\sqrt{5} + \sqrt{3} + \sqrt{7}).$

11. 用 **龙贝格算法** 计算积分 $I = \int_1^3 \frac{1}{x} dx (= [\ln x]_1^3 = \ln 3 \approx 1.098612289).$

解 先利用复化梯形公式计算 $T_1, T_2, T_4, T_8, \dots, T_{2^k}, \dots$

$T_1 = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] = \frac{3-1}{2} (\frac{1}{1} + \frac{1}{3}) = 1.333333,$

已知递推公式 $T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})$ (其中 $x_{k+\frac{1}{2}}$ 为新增加的分点).

当 $n=2^k$ 时, 步长为 $h = \frac{b-a}{2^k}$. 进一步作 $2n = 2^{k+1}$ 等分时, 则步长为 $\frac{b-a}{2^{k+1}}$, 并且

分点为 $a + j \frac{b-a}{2^{k+1}} (j=0, 1, \dots, 2^{k+1})$, 新增分点为 j 取奇数, 即 $a + (2i-1) \frac{b-a}{2^{k+1}} (i=1, 2, \dots, 2^k).$

于是 $T_{2^{k+1}} = \frac{1}{2}T_{2^k} + \frac{b-a}{2^{k+1}} \sum_{i=1}^{2^k} f[a + (2i-1) \frac{b-a}{2^{k+1}}]$. 由此先得下表第一列:

k	T_{2^k}	S_{2^k}	C_{2^k}	R_{2^k}
0	$T_1=1.333333$	$S_1=1.111111$	$C_1=1.099258$	$R_1=1.098630$
1	$T_2=1.166667$	$S_2=1.099999$	$C_2=1.098640$	
2	$T_4=1.166666$	$S_4=1.098725$		
3	$T_8=1.103210$			

再由 $S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$, 即 $S_{2^k} = \frac{4T_{2^{k+1}} - T_{2^k}}{3} (k=0, 1, \dots,)$, 得表的第二列;

由 $C_{2^k} = \frac{4^2 S_{2^{k+1}} - S_{2^k}}{4^2 - 1} (k=0, 1, \dots,)$, 得表的第三列;

由 $R_{2^k} = \frac{4^3 C_{2^{k+1}} - C_{2^k}}{4^3 - 1} (k=0, 1, \dots,)$, 得表的第四列;

最后得 $I = \int_1^3 \frac{1}{x} dx \approx 1.098630.$

第五章 常微分方程数值解法

§1 引言

考虑一阶常微分方程 **初值问题**:
$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (1.1)$$

如果 $f(x, y)$ 特殊, 则上述常微分方程可直接用积分求解:

(1) $f(x, y) = f(x)$, 即 $y' = f(x)$, 则 $y = \int f(x) dx$;

(2) $f(x, y) = f_1(x)f_2(y)$, 即 $\frac{dy}{dx} = f_1(x)f_2(y)$, 则 $\frac{dy}{f_2(y)} = f_1(x)dx \Rightarrow \int \frac{dy}{f_2(y)} = \int f_1(x)dx$,

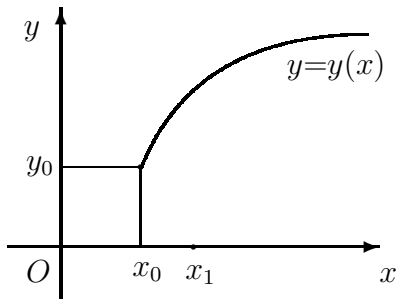
若存在 $L > 0$, 使 $|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq L|y_1 - y_2|$, 则上述初值问题 (1.1) 有 **唯一解**.

数值解法: 寻求解 $y = y(x)$ 在一系列离散节点 $x_1 < x_2 < \cdots < x_n < \cdots$ 上的近似值 $y_1, y_2, \cdots, y_n, \cdots$

通常采用 **等距节点**, 即 $x_n = x_0 + nh$ ($n = 1, 2, \cdots$), $x_{n+1} = x_n + h$. (h 称步长)

§2 尤拉方法

1. 尤拉公式



微分方程 (1.1) 的解称 **积分曲线**. **几何意义**:

积分曲线上每一点的切线斜率为 $f(x, y)$. 于是从初始点 $P_0(x_0, y_0)$ 出发, 寻求下一个点 $P_1(x_1, y_1)$.

要求 y_1 满足 $\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = f(x_0, y_0)$, 即 $y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0)$;

再从点 $P_1(x_1, y_1)$ 出发寻求点 $P_2(x_2, y_2)$. 同理 $y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1)$. 一般地,

$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$ (2.1) 称 **尤拉公式**.

最后以折线 $\overline{P_0P_1P_2\cdots}$ 作为 $y = y(x)$ 的近似解.

例1(P109) 求解初值问题
$$\begin{cases} y' = y - \frac{2x}{y} \quad (0 < x < 1); \\ y(0) = 1. \end{cases} \quad (2.2)$$

解 取步长 $h = 0.1$ 用尤拉公式, 得 $y_{n+1} = y_n + h\left(y_n - \frac{2x_n}{y_n}\right) = 1.1y_n - \frac{0.2x_n}{y_n}$.

于是 $y_1 = 1.1y_0 - \frac{0.2x_0}{y_0} = 1.1$, $y_2 = 1.1y_1 - \frac{0.2x_1}{y_1} = 1.21 - \frac{0.22}{1.1}$.

事实上, 初值问题 (2.2) 有解析解 $y(x) = \sqrt{1+2x}$, 则 $y(x_n) = \sqrt{1+2x_n}$.

y_n 与 $y(x_n)$ 的取值见 (P109)表 5-1.

尤拉公式的一步误差: 考虑 $y(x)$ 在 x_n 点展开: $y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(\xi)$.

设第 n 步准确, 即 $y(x_n) = y_n$, $y'(x_n) = f(x_n, y_n)$ 又 $y(x_{n+1}) = y(x_{n+1})$. 则

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = \left[y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(\xi) \right] - [y_n + hf(x_n, y_n)] = \frac{h^2}{2!}y''(\xi).$$

2. 后退的尤拉公式

若令 $\frac{y_{n+1} - y_n}{x_{n+1} - x_n} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$, 则有 $y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$. 称 **后退的尤拉公式**.

拉公式.

注意: 后退的尤拉公式是 **隐式** 的, 因为公式右边含有 y_{n+1} .

后退尤拉公式的一步误差: 考虑 $y(x)$ 在 x_{n+1} 点展开:

$$y(x_{n+1} - h) = y(x_{n+1}) - hy'(x_{n+1}) + \frac{h^2}{2!}y''(\xi) \Rightarrow y_n = y(x_{n+1}) - hf(x_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{h^2}{2!}y''(\xi).$$

$$y(x_{n+1} - h) = y(x_n) = y_n, \quad y'(x_{n+1}) = f(x_{n+1}, y_{n+1})$$

$$\text{所以 } y(x_{n+1}) - y_{n+1} = \left[y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{h^2}{2!}y''(\xi) \right] - [y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})] = -\frac{h^2}{2!}y''(\xi).$$

3. 梯形公式

平均两种尤拉公式, 得 **梯形公式:** $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})]$.

注意: 梯形公式也是 **隐式** 的, 因为公式右边含有 y_{n+1} .

4. 改进的尤拉公式

由于 **梯形公式** 右端仍含有 y_{n+1} , 不能直接用迭代法. 但若用 **尤拉公式** 计算 **梯形公式** 右边的 $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$, 即得

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

称 **改进的尤拉公式**.

例2(P112) 用改进的尤拉公式求解初值问题
$$\begin{cases} y' = y - \frac{2x}{y} & (0 < x < 1); \\ y(0) = 1. \end{cases} \quad (2.2)$$

解 取步长 $h = 0.1$, 得

$$\begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n) = y_n - \frac{2x_n}{y_n}; \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1) = (y_n + hK_1) - \frac{2(x_n + h)}{y_n + hK_1}; \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2) \end{cases}$$

5. 尤拉两步公式

由 $\frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} = f(x_n, y_n) \Rightarrow y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf(x_n, y_n)$.

称 **尤拉两步法**, 代入 **梯形公式** 右边, 得

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

§3 龙格 - 库塔方法

1. 泰勒级数法

考虑 $y(x)$ 在 x_n 点展开: $y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_n) + \cdots$

若取前 2 项, 即得 **尤拉公式** $y_{n+1} = y_n + hy'_n$, **截断误差** 为 $O(h^2)$. $f(x_n, y_n)$

若取前 $p+1$ 项, 得 $y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2!}y''_n + \cdots + \frac{h^p}{p!}y_n^{(p)}$. (3.3) 称 p 阶 **泰勒公式**

由 $y' = f(x, y)$, 得 $y'' = \frac{\partial f}{\partial x} + y' \frac{\partial f}{\partial y} = f_x(x, y) + f(x, y)f_y(x, y)$.

则 $y''_n = f_x(x_n, y_n) + f(x_n, y_n)f_y(x_n, y_n) \triangleq f^{(1)}(x_n, y_n)$.

同理, $y'''_n = f_x^{(1)}(x_n, y_n) + f(x_n, y_n)f_y^{(1)}(x_n, y_n) \triangleq f^{(2)}(x_n, y_n)$.

$y_n^{(j)} = f_x^{(j-1)}(x_n, y_n) + f(x_n, y_n)f_y^{(j-1)}(x_n, y_n)$.

公式 (3.3) 的截断误差为: $y(x_{n+1}) - y_{n+1} = \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}y^{p+1}(\xi)$,

是 $O(h^{p+1})$ 阶无穷小. 这时称公式 (3.3) 具有 p 阶精度.

$$y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \cdots + \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x_n) + \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}y^{p+1}(\xi)$$

$$y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2!}y''_n + \cdots + \frac{h^p}{p!}y_n^{(p)}$$

令 $p = 2$, 即取前 $p+1=3$ 项, 得 2 阶 泰勒公式:

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2!} y''_n = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} [f_x(x_n, y_n) + f(x_n, y_n)f_y(x_n, y_n)].$$

2. 龙格 - 库塔方法的基本思想

令 $\frac{y_{n+1}-y_n}{x_{n+1}-x_n} = \frac{y_{n+1}-y_n}{h} \triangleq K$, 则 $y_{n+1} = y_n + hK$.

(1) 当 $K_1 = f(x_n, y_n)$, 即为尤拉公式;

(2) 当 $K_2 = f(x_{n+1}, y_{n+1})$, 即为后退尤拉公式;

(3) 当 $K_3 = \frac{1}{2}(K_1 + K_2)$, 即为梯形公式.

注: K_2 中的 y_{n+1} 可取 $y_n + hK_1$.

如果 $y(x)$ 可导, 即得 拉格朗日中值定理:

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = y'(\xi)(x_{n+1} - x_n) = hy'(\xi) = hf(x_{n+p}, y_{n+p}). \quad (0 < p < 1)$$

其中, $x_{n+p} \triangleq x_n + ph \in [x_n, x_{n+1}]$, 取 $y_{n+p} = y_n + phf(x_n, y_n)$. $\frac{y_{n+p}-y_n}{x_{n+p}-x_n} = \frac{y_{n+p}-y_n}{ph} = f(x_n, y_n)$.

于是, $y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+p}, y_{n+p}) = y_n + hf(x_n + ph, y_n + phf(x_n, y_n))$.

$$\text{即} \begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n); \\ K_2 = f(x_n + ph, y_n + phK_1); \\ y_{n+1} = y_n + hK_2. \end{cases}$$

通常 K_2 换成 $\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2$ ($\lambda_1 + \lambda_2 = 1$), 即用两个点的斜率的 加权平均 来估计 K_2 .

$$\text{这时又得} \begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n); \\ K_2 = f(x_n + ph, y_n + phK_1); \\ y_{n+1} = y_n + h(\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2) \quad (\lambda_1 + \lambda_2 = 1). \end{cases} \quad (3.5)$$

用多个点的斜率的 加权平均 来估计 K , 就是 龙格 - 库塔方法 的基本思想.

关键是 $p, \lambda_1, \lambda_2 = ?$

3. 龙格 - 库塔公式

由公式 (3.5), $K_1 = f(x_n, y_n)$,

$$K_2 = f(x_n + ph, y_n + phK_1) = f(x_n, y_n) + ph[f_x(x_n, y_n) + f(x_n, y_n)f_y(x_n, y_n)] + \cdots$$

考虑 2 阶 泰勒公式:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} [f_x(x_n, y_n) + f(x_n, y_n)f_y(x_n, y_n)].$$

$$=y_n+h\lambda_1 K_1+h\lambda_2 K_1+\frac{h^2}{2!}\left[f_x(x_n, y_n)+f(x_n, y_n)f_y(x_n, y_n)\right].$$

$$=y_n+h\lambda_1 K_1+h\lambda_2\left\{f(x_n, y_n)+\frac{h}{2\lambda_2}\left[f_x(x_n, y_n)+f(x_n, y_n)f_y(x_n, y_n)\right]\right\}.$$

(1) 取 $p=\frac{1}{2\lambda_2}$, $\lambda_1+\lambda_2=1$, 公式 (3.5) 称 **二阶龙格 - 库塔公式**.

特别, 取 $p=\frac{1}{2}$, $\lambda_1=0$, $\lambda_2=1$, 得

$$\begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n); \\ K_2 = f(x_n+\frac{h}{2}, y_n+\frac{h}{2}K_1); \\ y_{n+1} = y_n+hK_2. \end{cases}$$

(2) 进一步, 若用 3 个点 x_n, x_{n+p}, x_{n+q} 的斜率 K_1, K_2, K_3 的加权平均来估计 K , 可得 **三阶龙格 - 库塔公式**. 比如取 $p=\frac{1}{2}, q=1, \lambda_1=\lambda_3=\frac{1}{6}, \lambda_2=\frac{2}{3}$, 得

$$\begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n); \\ K_2 = f(x_n+\frac{h}{2}, y_n+\frac{h}{2}K_1); \\ K_3 = f(x_n+h, y_n-hK_1+2hK_2); \\ y_{n+1} = y_n+\frac{h}{6}(K_1+4K_2+K_3). \end{cases}$$

$$(3) \text{ 四阶龙格 - 库塔公式 } \begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n+\frac{h}{2}, y_n+\frac{h}{2}K_1) \\ K_3 = f(x_n+\frac{h}{2}, y_n+\frac{h}{2}K_2) \\ K_4 = f(x_n+h, y_n+hK_3) \\ y_{n+1} = y_n+\frac{h}{6}(K_1+2K_2+2K_3+K_4) \end{cases}$$

§4 单步法的收敛性和稳定性

1. 收敛性

定义 2 若常微分方程某数值解法对固定的 $x_n = x_0+nh$, 当 $h \rightarrow 0$ 时, 有 $y_n \rightarrow y(x_n)$, 则称该方法是 **收敛的**.

(同时 $n \rightarrow \infty$)

例 考虑 **尤拉方法** 对 **初值问题**(4.1) 的收敛性:
$$\begin{cases} y' = \lambda y; \\ y(0) = y_0 \end{cases} \quad (4.1)$$

解 由 **尤拉方法**: $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) = y_n + h\lambda y_n = (1+\lambda h)y_n = (1+\lambda h)^2 y_{n-1} = \dots$

$$y_n = (1+\lambda h)y_{n-1}$$

于是 $y_n = y_0(1+\lambda h)^n \Rightarrow \lim_{h \rightarrow 0} y_n = y_0 \lim_{h \rightarrow 0} (1+\lambda h)^n = y_0 \lim_{h \rightarrow 0} \left[(1+\lambda h)^{\frac{1}{\lambda h}} \right]^{\lambda x_n} = y_0 e^{\lambda x_n}$.

(因为 $x_n = x_0 + nh = nh \Rightarrow n = \frac{x_n}{h}$.)

而方程 (4.1) 的 **准确解** 也正是 $y(x_n) = y_0 e^{\lambda x_n}$, 说明尤拉方法对本例是收敛的.

2. 稳定性

定义3 若常微分方程某数值解法在节点值 y_n 上有不超过 δ 的扰动, 而以后各节点值 $y_m (m > n)$ 上产生的偏差均 $\leq \delta$, 则称该方法是 **稳定的**.

例 考虑 **尤拉方法** 对 **初值问题** 的稳定性:
$$\begin{cases} y' = \lambda y; \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

解 设 ε_n 是节点值 y_n 上的扰动值, y_n^* 是 y_n 的偏差值, 则 $|y_n - y_n^*| \leq \varepsilon_n$.

又由 $y_{n+1}^* = y_n^* + hf(x_n, y_n^*) = (1+h\lambda)y_n^*$, 与准确值相减, 得 $y_{n+1} - y_{n+1}^* = (1+h\lambda)(y_n - y_n^*)$,

于是 $\varepsilon_{n+1} \leq |1+h\lambda|\varepsilon_n \leq |1+h\lambda|^2\varepsilon_{n-1}$, 即 $\varepsilon_n \leq |1+h\lambda|^n\varepsilon_0$.

因此要求 $|1+h\lambda| \leq 1$ ($h \leq -\frac{2}{\lambda}, \lambda < 0$) 才能保证尤拉方法是稳定的 (称 **条件稳定**).

注: 如果用 **后退的尤拉公式**: $y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1}$, 解出 $y_{n+1} = \frac{1}{1-h\lambda}y_n$. 同上考虑, 得

$\varepsilon_n \leq \left| \frac{1}{1-h\lambda} \right|^n \varepsilon_0$. 只要 $\lambda < 0$ 就有 $\left| \frac{1}{1-h\lambda} \right| \leq 1$, 所以后退的尤拉方法是无条件稳定的.

例5 (P125)(略)

§5 线性多步法

用一系列 $y_0, y_1, \dots, y_n$ 来计算 y_{n+1} 称 **多步法**.

1. 数值积分法

由 $y' = f(x, y)$ 两边从 x_n 到 x_{n+1} 求定积分, 得

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

积分中值定理, 尤拉方法, 后退尤拉方法, 梯形公式.

用 k 次插值多项式 $P_k(x)$ 来逼近 $f[x, y(x)]$, 就得 $y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} P_k(x) dx$.

$$P_1(x) = \frac{x - x_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} f(x_n, y_n) + \frac{x - x_n}{x_{n-1} - x_n} f(x_{n-1}, y_{n-1}) = \frac{x - x_{n-1}}{h} f_n - \frac{x - x_n}{h} f_{n-1}.$$

$$\text{得 } \int_{x_n}^{x_{n+1}} P_1(x) dx = \left[\frac{(x-x_{n-1})^2}{2h} \right]_{x_n}^{x_{n+1}} f_n - \left[\frac{(x-x_n)^2}{2h} \right]_{x_n}^{x_{n+1}} f_{n-1} = \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1}).$$

即 $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1})$, 称 二步亚当姆斯公式.

$$\begin{aligned} \text{截断误差: } & \int_{x_n}^{x_{n+1}} \frac{f''_x[\xi, y(\xi)]}{2} (x-x_n)(x-x_{n-1}) dx \\ &= \frac{f''_x[\eta, y(\eta)]}{2} \int_{x_n}^{x_{n+1}} [(x-x_n)^2 + (x-x_n)(x_n-x_{n-1})] dx = \frac{5}{12} h^3 y'''(\eta). \quad (y'''(\eta) = f''_x[\eta, y(\eta)]) \end{aligned}$$

§6 方程组与高阶方程的情形

[illegible]
$$\text{则} \begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}); \\ \mathbf{y}(x_0) = \mathbf{y}^0. \end{cases}$$

尤拉公式: $\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n)$, 其中 $\mathbf{y}_n = (y_1^{(n)}, \dots, y_N^{(n)})$.

例 求解
$$\begin{cases} y' = f(x, y, z), & y(x_0) = y_0; \\ z' = g(x, y, z), & z(x_0) = z_0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0, z_0); \\ z_1 = z_0 + hg(x_0, y_0, z_0). \end{cases} \quad \dots \quad \begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n, z_n); \\ z_{n+1} = z_n + hg(x_n, y_n, z_n). \end{cases}$$

(2) 用二阶龙格 - 库塔方法 (R-K)

$$\begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n); \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1); \\ y_{n+1} = y_n + hK_2. \end{cases}$$

$$\text{于是} \begin{cases} K_1 = f(x_n, y_n, z_n); \quad L_1 = g(x_n, y_n, z_n); \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1, z_n + \frac{h}{2}L_1); \\ L_2 = g(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1, z_n + \frac{h}{2}L_1); \\ y_{n+1} = y_n + hK_2; \quad z_{n+1} = z_n + hL_2. \end{cases}$$

2. 化高阶方程为一阶方程组

考虑高阶常微分方程 $\begin{cases} y^{(m)} = f(x, y, y', \dots, y^{(m-1)}); \\ y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y'_0, \dots, y^{(m-1)}(x_0) = y_0^{(m-1)}. \end{cases}$

引入变量: $y_1 = y, y_2 = y', \dots, y_m = y^{(m-1)}$. (m 个变量)

则上述高阶方程即可化为方程组: $\begin{cases} y'_1 = y_2; \\ y'_2 = y_3; \\ \dots\dots\dots \text{初始条件} \\ y'_{m-1} = y_m; \\ y'_m = f(x, y_1, \dots, y_m). \end{cases} \begin{cases} y_1(x_0) = y_0; \\ y_2(x_0) = y'_0; \\ \dots\dots\dots \\ y_{m-1}(x_0) = y_0^{(m-2)} \\ y_m(x_0) = y_0^{(m-1)}. \end{cases}$

例 求解 $\begin{cases} y'' = f(x, y, y'); \\ y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y'_0. \end{cases}$

解 先化为方程组 $\begin{cases} y' = z; \\ z' = f(x, y, z). \end{cases} \text{初始条件} \begin{cases} z(x_0) = y'_0; \\ y(x_0) = y_0. \end{cases}$

用尤拉公式: $\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hz_n; \\ z_{n+1} = z_n + hf(x_n, y_n, z_n). \end{cases}$

第六章 方程求根

§1 搜索法

若 $f(x) \in C[a, b]$, 并且 $f(a)f(b) \leq 0$, 则方程 $f(x) = 0$ 在区间 $[a, b]$ 内至少有一个实根, 也称 $[a, b]$ 为 **有根区间**.

即 $f(a)$ 与 $f(b)$ 异号

1. 逐步搜索法

取步长为 $h = \frac{b-a}{n}$ 作等距节点 $x_k = a + kh$ ($k = 0, 1, \dots, n$). 逐个检查 $f(x_k)$ 的符号, 一旦第一次出现 $f(x_k)$ 与 $f(a)$ 异号时, 则 $[x_{k-1}, x_k]$ 为有根区间, 通常可取近似根为 $x^* = \frac{x_{k-1} + x_k}{2}$.

说明 $f(x_{k-1})$ 仍与 $f(a)$ 同号,

因此 $f(x_k)$ 与 $f(x_{k-1})$ 异号.

例1(P143) 用逐步搜索法求方程 $f(x) = x^3 - x - 1 = 0$ 的根.

解 由 $f(0) = -1 < 0$, $f(2) = 5 > 0$, 则 $f(x)$ 在区间 $(0, 2)$ 内至少有一个实根.

于是从 $x = 0$ 出发, 取步长 $h = 0.5$ 向右搜索方程的根 (见 **表 6-1**), 可知区间 $(1, 1.5)$ 内有一个实根 $x^* \approx 1.25$.

表 6-1

x	0	0.5	1.0	1.5
$f(x)$ 的符号	-	-	-	+

2. 二分法

令 $[a_0, b_0] = [a, b]$, 取中点 $x_0 = \frac{a_0 + b_0}{2}$, 并将区间二等分. 若 $f(x_0) \neq 0$, 则 $f(x_0)$ 与 $f(a_0)$ 和 $f(b_0)$ 之一异号, 从而构成新的有根区间 $[a_1, b_1] = [a_0, x_0]$ 或 $[x_0, b_0]$;

当 $f(x_0)$ 与 $f(a_0)$ 异号 当 $f(x_0)$ 与 $f(b_0)$ 异号

再取其中点 $x_1 = \frac{a_1 + b_1}{2}$. 若 $f(x_1) \neq 0$, 又得新的有根区间 $[a_2, b_2]$; $\dots\dots$

重复上面的步骤, 如果每个 $f(x_k) \neq 0$ ($k = 0, 1, 2, \dots$), 就得到区间套

$[a_0, b_0] \supset [a_1, b_1] \supset \dots \supset [a_k, b_k] \supset \dots$, 其中 $b_k - a_k = \frac{b-a}{2^k} \rightarrow 0$ ($k \rightarrow \infty$).

由有关定理: $\lim_{k \rightarrow \infty} a_k = \lim_{k \rightarrow \infty} b_k = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*$, 则 x^* 即是方程的根.

二分法的算法设计:

- (1) **赋值**: $A = f(a)$, $B = f(b)$, $C = f(\frac{a+b}{2})$;
 (2) **判断**: if $C = 0$ or $b-a < \delta$ then 转 (3). 根的误差限
 else if $C \cdot A > 0$ then $a = \frac{a+b}{2}$, 转 (1).
 else $b = \frac{a+b}{2}$, 转 (1).
 (3) $X = \frac{a+b}{2}$, **end**.

例 2 (P144) 用二分法求方程

$f(x)=x^3-x-1=0$ 在区间 $[1, 1.5]$
 内的根 (保留 2 位小数).

解 由表 6-2(P145), 只要二分
 6 次, 则 $|x^*-x_6| \leq \frac{0.5}{2^6} \leq 0.005$,
 得近似根 $x^* \approx 1.3242$.

表 6-2

k	a_k	b_k	x_k	$f(x_k) \cdot f(a_k)$ 符号
0	1.0	1.5	1.25	+
1	<u>1.25</u>	1.5	1.375	-
2	1.25	<u>1.375</u>	1.3125	+
3	<u>1.3125</u>	1.375	1.3438	-
4	1.3125	<u>1.3438</u>	1.3281	-
5	1.3125	<u>1.3281</u>	1.3203	+
6	<u>1.3203</u>	1.3281	1.3242	≈ 0

§2 迭代法

1. 迭代公式及其收敛性

将方程 $f(x) = 0$ 变成: $x = \varphi(x)$ (2.1)

取猜测值 x_0 代入 (2.1) 右端, 并令 $x_1 = \varphi(x_0)$.

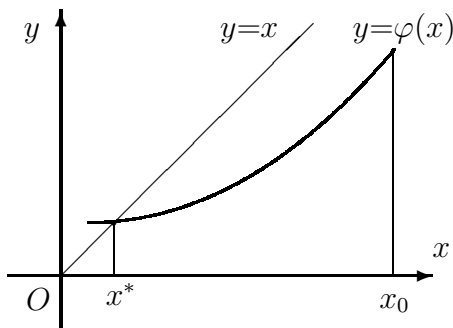
如果 $x_1 = x_0$, 则 x_0 已是根, 否则得迭代公式

$$x_{k+1} = \varphi(x_k) \quad (x_{k+1} \neq x_k, k = 0, 1, 2, \dots).$$

若数列 $\{x_k\}$ 有极限, 即 $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*$, 则

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_{k+1} = \lim_{k \rightarrow \infty} \varphi(x_k) \Rightarrow x^* = \varphi(x^*), \text{ 即 } x^* \text{ 是根.}$$

几何意义: x^* 在曲线 $\begin{cases} y = x; \\ y = \varphi(x). \end{cases}$ 的交点处.



例3(P146) 用迭代法求方程 $f(x) = x^3 - x - 1 = 0$ 在 $x_0 = 1.5$ 附近的根.

解 先将 $f(x) = x^3 - x - 1 = 0$ 变形: $x = \sqrt[3]{x+1}$, $\varphi(x) = \sqrt[3]{x+1}$. 取 $x_0 = 1.5$, 得迭代公式: $x_{k+1} = \sqrt[3]{x_k+1}$ ($k = 0, 1, 2, \dots$). 迭代结果见 表 6-3(P146). 由于 $x_8 = x_7$, 所以 $x^* \approx x_7 = 1.32472$ 为近似根.

若原方程变形为: $x = x^3 - 1$, 即 $x_{k+1} = x_k^3 - 1$. 当 $x_0 = 1.5$ 时, $x_1 = 2.375$, $x_2 = 12.39$,

这时迭代法通常 **不收敛**. 注意 $|\varphi'(x)| = 3x^2 > 1$ (当 $x > 1$ 时).

事实上, 关于 **迭代方程** 的收敛性, 有如下定理:

定理2 若 $\varphi(x)$ 满足: (1) $a \leq \varphi(x) \leq b$; (2) 存在 $0 < L < 1$, 使 $|\varphi'(x)| \leq L$,

则方程 $x = \varphi(x)$ 有迭代根 x^* . 并且有精度控制公式 $|x^* - x_k| \leq \frac{1}{1-L} |x_{k+1} - x_k|$.

复习公式: 当 $|q| < 1$ 时, $q^k + q^{k+1} + q^{k+2} + \dots + q^{k+n} = q^k(1 + q + q^2 + \dots + q^n) = q^k \frac{1 - q^{n+1}}{1 - q} \leq \frac{q^k}{1 - q}$.

证明 只需证, 对任意正整数 p , $\lim_{k \rightarrow \infty} |x_{k+p} - x_k| = 0$ ($\Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} x_k$ 有极限). 事实上,

$$|x_{k+1} - x_k| = |\varphi(x_k) - \varphi(x_{k-1})| = |\varphi'(\xi)| |x_k - x_{k-1}| \leq L |x_k - x_{k-1}| \leq L^2 |x_{k-1} - x_{k-2}| \leq \dots \leq L^k |x_1 - x_0|.$$

$$\text{而 } |x_{k+p} - x_k| \leq |x_{k+p} - x_{k+p-1}| + \dots + |x_{k+1} - x_k| \leq (L^{k+p-1} + \dots + L^k) |x_1 - x_0| \leq \frac{L^k}{1-L} |x_1 - x_0| \rightarrow 0.$$

(当 $k \rightarrow \infty$).

另外, $|x_{k+p} - x_k| \leq (L^{p-1} + \dots + L + 1) |x_{k+1} - x_k| \leq \frac{1}{1-L} |x_{k+1} - x_k|$. 即 $|x^* - x_k| \leq \frac{1}{1-L} |x_{k+1} - x_k|$.

2. 迭代法的改进

通常迭代公式 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 的收敛过程比较缓慢, 而 $\varphi(x)$ 的计算可能较繁. 为此设法改进迭代公式, 减少迭代次数. 设 $x^* = \varphi(x^*)$ 是原方程的解, 则

$$x_{k+1} - x^* = \varphi(x_k) - \varphi(x^*) = \varphi'(\xi)(x_k - x^*) \approx L(x_k - x^*), \text{ 解出 } x^* \approx \frac{1}{1-L}(x_{k+1} - Lx_k).$$

于是得 **改进的迭代公式**: $x_{k+1} = \frac{1}{1-L}[\varphi(x_k) - Lx_k]$.

例4(P148) 用 **迭代公式** 求方程 $x = e^{-x}$ 在 $x_0 = 0.5$ 附近的一个根.

解 直接由迭代公式: $x_0 = 0.5, x_{k+1} = e^{-x_k}$. 迭代结果见表 6-4.

例5(P149) 用 **改进的迭代公式** 求方程 $x = e^{-x}$ 在 $x_0 = 0.5$ 附近的一个根.

解 先估计 $L \geq \varphi'(x) = e^{-x}$, 得 $L = 0.6$. 由改进的迭代公式:

$$x_0 = 0.5, x_{k+1} = \frac{0.6}{0.4}(e^{-x_k} - x_k) = \frac{3}{2}(e^{-x_k} - x_k), \text{ 迭代结果见表 6-5.}$$

显然 **改进的迭代公式** 收敛速度大大提高.

§3 牛顿法

1. 牛顿公式

有时方程 $f(x)=0$ 不易变成收敛的迭代方程 $x=\varphi(x)$, 故要寻求新的迭代公式.

设 $x = \varphi(x)$ 是原方程 $f(x) = 0$ 收敛的迭代方程, 即迭代所得的数列有极限:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*, \text{ 而 } x^* \text{ 是根, 即 } f(x^*) = 0.$$

取定 x_k , 考虑 $f(x)$ 在 x_k 展开, 即

$$f(x) \approx f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k), \text{ 代入 } x^*,$$

$$\text{得 } 0 = f(x^*) \approx f(x_k) + f'(x_k)(x^* - x_k).$$

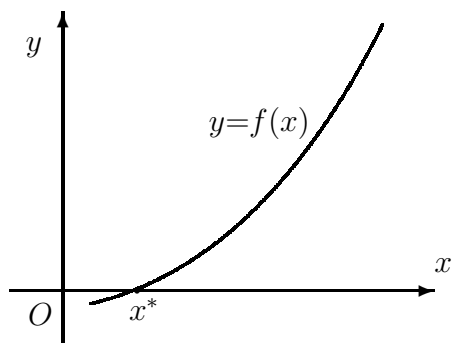
$$\text{若 } f'(x_k) \neq 0, \text{ 则 } x^* \approx x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)},$$

于是, 令 $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$, 称 **牛顿公式**,

这种迭代法简称 **牛顿法**.

2. 牛顿法几何意义

由 **牛顿公式** 易得 $\frac{f(x_k)}{x_k - x_{k+1}} = f'(x_k)$. 即 x_{k+1} 是曲线 $y=f(x)$ 在点 $(x_k, f(x_k))$ 处切线与 x 轴的交点. x_{k+2}



3. 牛顿法收敛性

关于 **牛顿公式** 的收敛性, 有如下定理:

定理 若 $f(x) \in C^2[a, b]$, 且满足:

- (1) $f(a)f(b) < 0$ (有根);
- (2) $f'(x) \neq 0$ ($f(x)$ 单调, 因此有唯一根);
- (3) $f''(x) \neq 0$ ($f(x)$ 的凹凸性不变);
- (4) 初值 $x_0 \in [a, b]$, 满足 $f''(x_0)f(x_0) > 0$,

则牛顿公式收敛.

例 7 (P152) 用牛顿法解方程 $f(x) = xe^x - 1 = 0$ (等价方程: $x = e^{-x}$).

解 这时牛顿公式为 $x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - e^{-x_k}}{1 + x_k}$.

取初值 $x_0=0.5$ 进行迭代, 计算结果见 **表 6-7**, 收敛速度很快.

表 6-7

k	x_k
0	0.50000
1	0.57102
2	0.56716
3	0.56714

迭代法的收敛速度

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^* , 记 $e_k = x_k - x^*$, 称 **迭代误差**. 若存在实数 $p > 0$, 使 $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{e_{k+1}}{e_k^p} = C$ ($C \neq 0$), 则称该迭代过程 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 是 p 阶收敛的.

特别地 $\begin{cases} p = 1, & \text{称 线性收敛;} \\ p > 1, & \text{称 超线性收敛;} \\ p = 2, & \text{称 平方收敛.} \end{cases}$

显然 $\lim_{k \rightarrow \infty} e_k = 0$

定理 牛顿迭代法是平方收敛的.

证明 考虑 $f(x)$ 在点 x_k 的泰勒展开式 (1 阶): $f(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_k)^2$.

代 $x = x^*$, 得 $0 = f(x_k) + f'(x_k)(x^* - x_k) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x^* - x_k)^2$. 两边除 $f'(x_k)$, 并移项, 得

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

即 $\frac{f''(\xi)}{2f'(x_k)}(x_k - x^*)^2 = x_{k+1} - x^*$, 两边除 $(x_k - x^*)^2$, 则 $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x_{k+1} - x^*}{(x_k - x^*)^2} = \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}$.

4. 牛顿法的应用

例 利用牛顿法计算 $\sqrt{C}$.

解 因 $x^* = \sqrt{C}$ 是方程 $f(x) = x^2 - C$ 的根, 故由牛顿公式, 得数列

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{x_k^2 - C}{2x_k} = \frac{1}{2}\left(x_k + \frac{C}{x_k}\right), \text{ 则 } \lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \sqrt{C}.$$

当 $C = 2$ 时, $x_{k+1} = \frac{x_k}{2} + \frac{1}{x_k} \rightarrow \sqrt{2} \ (k \rightarrow \infty)$.

例 8 (P153) 求 $\sqrt{115}$.

解 由 $C = 115$, 得迭代公式 $x_{k+1} = \frac{1}{2}\left(x_k + \frac{115}{x_k}\right)$.

取初值 $x_0 = 10$ 进行迭代, 计算结果见 **表 6-8**.

于是 $\sqrt{115} \approx 10.723805$.

表 6-8

k	x_k
0	10.000000
1	10.750000
2	10.723837
3	10.723805
4	10.723805

§4 弦截法

已知 **牛顿公式**: $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$.

如果不知道 $f'(x_k)$, 或 $f'(x_k)$ 的计算复杂, 则可用曲线 $y = f(x)$ 上两点的割线斜率代替 $f'(x_k)$, 即 $f'(x_k) \approx \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$.

得 $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$, 称 **弦截法**.

注: 弦截法是两步法, 要求先给出根 x^* 的两个估计值 x_0, x_1 .

例 9 (P156) 用弦截法解方程 $f(x) = xe^x - 1 = 0$.

解 这时弦截法的公式为 $x_{k+1} = x_k - \frac{(x_k e^{x_k} - 1)(x_k - x_{k-1})}{x_k e^{x_k} - x_{k-1} e^{x_{k-1}}}$.

取初值 $x_0=0.5, x_1=0.6$ 代入, 计算结果见 **表 6-9**, 收敛速度也相当快.

表 6-9

k	x_k
0	0.50000
1	0.60000
2	0.56532
3	0.56709
4	0.56714

定理 弦截法 是 1.618 收敛的.

习题选讲(P163)

1. 用 **二分法** 求方程

$$f(x) = x^2 - x - 1 = 0 \text{ 的}$$

正根, 要求误差 $\delta < 0.05$.

解 由 $f(1)=-1, f(2)=2$,

故只要二分 5 次, 则

$$|x^* - x_5| \leq \frac{1}{2^5} \leq 0.05. \text{ 计算结果见上表.}$$

k	a_k	b_k	x_k	$f(x_k) \cdot f(a_k)$ 符号
0	1.0	2.0	1.5	+
1	<u>1.5</u>	2.0	1.75	-
2	1.5	<u>1.75</u>	1.625	-
3	1.5	<u>1.625</u>	1.5625	+
4	<u>1.5625</u>	1.625	1.59375	+
5	<u>1.59375</u>	1.625	1.60938	≈ 0

于是得近似根 $x^* \approx 1.60938$.

3. 为求方程 $x^3 - x^2 - 1 = 0$ 在 $x_0 = 1.5$ 附近的一个根, 讨论如下迭代公式的收敛性.

1) 先移项, 两边除 $x^2 \Rightarrow x = 1 + \frac{1}{x^2}$, 迭代公式 $x_{k+1} = 1 + \frac{1}{x_k^2}$;

2) 只移项 $\Rightarrow x^3 = 1 + x^2$, 迭代公式 $x_{k+1} = \sqrt[3]{1+x_k^2}$;

3) 只移项 $\Rightarrow x^2(x-1) = 1$, $x^2 = \frac{1}{x-1}$, 迭代公式 $x_{k+1} = \frac{1}{\sqrt{x_k-1}}$.

解 1) 由 $\varphi_1(x) = 1 + \frac{1}{x^2}$, $x \approx 1.5$, 则 $|\varphi'_1(x)| = \left| -\frac{2}{x^3} \right| < 1$, 本迭代公式收敛.

2) 由 $\varphi_2(x) = \sqrt[3]{1+x^2}$, $x \approx 1.5$, 则 $|\varphi'_2(x)| = \left| \frac{2x}{3}(1+x^2)^{-\frac{2}{3}} \right| < 1$, 本迭代公式收敛.

3) 由 $\varphi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{x-1}}$, $x \approx 1.5$, 则 $|\varphi'_3(x)| = \left| -\frac{1}{2}(x-1)^{-\frac{3}{2}} \right| > 1$, 本迭代公式发散.

用迭代公式 $x_{k+1} = \sqrt[3]{1+x_k^2}$, 得 $x_0 = 1.5$, $x_1 = 1.481248$, $x_2 = 1.4727057$, $x_3 = 1.4688173$, $x_4 = 1.4670480$, $x_5 = 1.466243$, $x_6 = 1.4658768$, $x_7 = 1.4657102$, $x_8 = 1.4656344$, $x_9 = 1.465600$, 由 $|x_9 - x_8| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$, 可取 $x^* \approx x_9$.

5. 设 $f(x)$ 满足 $0 < m \leq f'(x) \leq M$, 证明当 $0 < \lambda < \frac{2}{M}$ 时, 迭代方程 $x_{k+1} = x_k - \lambda f(x_k)$ 收敛于 $f(x) = 0$ 的根.

证明 这时 $\varphi(x) = x - \lambda f(x)$, 只需证 $|\varphi'(x)| = |1 - \lambda f'(x)| \leq L < 1$. 事实上, 由 $0 < m \leq f'(x) \leq M \Rightarrow 0 < \lambda m \leq \lambda f'(x) \leq \lambda M \Rightarrow 1 > 1 - \lambda m \geq 1 - \lambda f'(x) \geq 1 - \lambda M = -(\lambda M - 1) > -1$.

于是, 可取 $L = \max\{1 - \lambda m, \lambda M - 1\} < 1$, 这时 $|1 - \lambda f'(x)| \leq L < 1$.

说明迭代方程 $x_{k+1} = x_k - \lambda f(x_k)$ 收敛于 x^* , 即 $x^* = x^* - \lambda f(x^*) \Rightarrow f(x^*) = 0$.

6. 已知函数 $x = \varphi(x)$ 在区间 $[a, b]$ 内只有一根, 而且当 $a < x < b$ 时, $|\varphi'(x)| \geq k > 1$, 如何将 $x = \varphi(x)$ 化为收敛的迭代方程?

解 注意条件 $|\varphi'(x)| \geq k > 1$ 可化为 $\left| \frac{1}{\varphi'(x)} \right| \leq \frac{1}{k} < 1$,

于是可将 $x = \varphi(x)$ 化为 $x = \varphi^{-1}(x)$, 这时 $|\varphi^{-1}(x)|'_x = \left| \frac{1}{\varphi'(x)} \right| \leq \frac{1}{k} < 1$, 则迭代方程 $x = \varphi^{-1}(x)$ 收敛.

9. 研究求 $\sqrt{a}$ 的牛顿公式 $x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{a}{x_k} \right)$, $x_0 > 0$, 证明对任意 $k \geq 1$, $x_k \geq \sqrt{a}$, 且数列 $\{x_k\}$ 是递减的, 因此是收敛的.

证明 由不等式 $\frac{a+b}{2} \geq \sqrt{ab}$ ($a, b > 0$), 得 $x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{a}{x_k} \right) \geq \sqrt{a}$ ($k = 0, 1, 2, \dots$),

即当 $k \geq 1$ 时, $x_k \geq \sqrt{a}$, 并得 $x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{a}{x_k} \right) \leq \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{x_k^2}{x_k} \right) = x_k$.

第七章 解线性方程组的直接方法

§1 引言

[illegible]

$$\text{其中 } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

通常假设 $|\mathbf{A}| \neq 0$, 则上述方程有唯一解: $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$. 逆矩阵 系数矩阵

由 **克莱姆法则**: $x_j = \frac{D_j}{|\mathbf{A}|}$, 其中 $D_j = \begin{vmatrix} & & j & & \\ a_{11} & \cdots & b_1 & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & b_2 & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & b_n & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}, j = 1, \cdots, n.$

数值解法有两类:

1. 直接法; (主要是消去法, 针对低阶稠密矩阵)
2. 迭代法. (针对大型稀疏矩阵)

§2 高斯消去法

1. 高斯消去法

设方程组表示为矩阵形式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, 增广矩阵 $(\mathbf{A} \mid \mathbf{b})$.

若 $\mathbf{A}$ 是上三角矩阵, 即 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$, 其中 $a_{jj} \neq 0, j =$

 $1, 2, \dots, n.$

这时方程组可用回代法求解:
$$\begin{cases} x_n = b_n/a_{nn}, \\ x_k = (b_k - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}x_j)/a_{kk} \quad (k = n-1, n-2, \cdots, 2, 1). \end{cases}$$

若 A 非上三角矩阵, 则可用 矩阵的初等行变换 化 $(A | b)$ 为 阶梯形.

$$\text{初等行变换: } \begin{cases} (1) r_i \leftrightarrow r_j; & \text{交换 } i \text{ 与 } j \text{ 两行} \\ (2) r_i + kr_j; & \text{第 } j \text{ 行乘 } k \text{ 加到第 } i \text{ 行} \\ (3) r_i \times k (k \neq 0) & \text{第 } i \text{ 行乘 } k. \end{cases}$$

定理 初等行变换不改变方程组的解.

即若 $(\mathbf{A} | \mathbf{b}) \triangleq (\mathbf{A}^{(1)} | \mathbf{b}^{(1)}) \longrightarrow (\mathbf{A}^{(2)} | \mathbf{b}^{(2)})$, 则它们对应的方程组等价 (同解).

例 1 (P166) 用消去法解方程组
$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6; & (1) \\ 4x_2 - x_3 = 5; & (2) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1. & (3) \end{cases}$$

解 作初等行变换 $(3) - 2 \times (1) + (2)$, 得
$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6; & (1) \\ 4x_2 - x_3 = 5; & (2) \\ -2x_3 = -6. & (4) \end{cases}$$

回代, 得 $x_3 = 3, x_2 = (5+x_3)/4 = 2, x_1 = 6 - (x_2+x_3) = 1$.

事实上, 增广矩阵 $(\mathbf{A} | \mathbf{b}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 2 & -2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 0 & 0 & -2 & -6 \end{pmatrix} = (\mathbf{A}^{(2)} | \mathbf{b}^{(2)})$.

一般解法: 记 $\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A} (a_{ij}^{(1)} = a_{ij}), \mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b} (b_i^{(1)} = b_i)$. 经 $k-1$ 次消元后 $(\mathbf{A}^{(1)} | \mathbf{b}^{(1)}) \longrightarrow (\mathbf{A}^{(k)} | \mathbf{b}^{(k)})$.

其中 $\mathbf{A}^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}.$

$$\begin{cases} a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} a_{1j}^{(1)} \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} b_1^{(1)} \end{cases} \quad (i, j = 2, 3, \dots, n), \dots \begin{cases} a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \frac{a_{i,k-1}^{(k-1)}}{a_{k-1,k-1}^{(k-1)}} a_{k-1,j}^{(k-1)} \\ b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - \frac{a_{i,k-1}^{(k-1)}}{a_{k-1,k-1}^{(k-1)}} b_{k-1}^{(k-1)} \end{cases} \quad (i, j = k, \dots, n).$$

最后得到与原方程同解的三角形方程组: $\mathbf{A}^{(n)} \mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)}$,

其中, $\mathbf{A}^{(n)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}, \mathbf{b}^{(n)} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{pmatrix}.$

回代过程:
$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)}, \\ x_k = (b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}^{(k)} x_j) / a_{kk}^{(k)}, \quad (k = n-1, n-2, \dots, 2, 1). \end{cases}$$

注: $a_{11}^{(1)}, a_{22}^{(2)}, \dots, a_{nn}^{(n)}$ 称 **主元素**. 由于运算中它要做分母 (除数), 所以不能取太小!

2. 矩阵的三角分解

分析 一个矩阵在用 **初等行变换** 化为上三角形的过程, 比如第一次消元:

$$\mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix} \rightarrow \mathbf{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} &\text{其中 } a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} a_{1j}^{(1)}, \\ &\quad (i = 2, 3, \dots, n) \\ &\quad (j = 1, 2, \dots, n) \end{aligned}$$

令 $m_{i1} = a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)}$ ($i=2, 3, \dots, n$), 则 $\mathbf{A}^{(1)}$ 经过了 $n-1$ 次行变换 “ $r_i - m_{i1}r_1$ ” 化为 $\mathbf{A}^{(2)}$.

$$\text{如果这 } n-1 \text{ 次行变换对单位阵 } \mathbf{I}_n \text{ 施行, 则 } \mathbf{I}_n \rightarrow \mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -m_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -m_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

这说明 $\mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{L}_1 \mathbf{A}^{(1)}$. 同理 $\mathbf{A}^{(3)} = \mathbf{L}_2 \mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{L}_2 \mathbf{L}_1 \mathbf{A}^{(1)}, \dots, \mathbf{A}^{(n)} = \mathbf{L}_{n-1} \cdots \mathbf{L}_2 \mathbf{L}_1 \mathbf{A}^{(1)}$.

记 $\mathbf{L}^{-1} = \mathbf{L}_{n-1} \cdots \mathbf{L}_2 \mathbf{L}_1$ 仍为下三角阵, $\mathbf{U} = \mathbf{A}^{(n)}$ 为上三角阵, 于是 $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$.

称 **矩阵的三角分解**.

§3 高斯主元素消去法

1. 完全主元素消去法

当主元素 $a_{kk}^{(k)} \approx 0$ 时, 若用其作除数 (分母), 则 **舍入误差** 会扩散, 使计算结果不可靠. (见 P171 例 3)

为此当第 k 步消元时, 应在 $\begin{pmatrix} a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}$ 中选取绝对值最大者通

过行列变换来替换 $a_{kk}^{(k)}$, 然后再消元, 称 **完全主元素消去法**.

算法设计:

(1) 定义数组 $I_z(n)$, 负责记录未知元的下标.

- 初始化: $I_z(i) \leftarrow i$ ($i = 1, 2, \dots, n$); (循环)
- (2) 令 $k = 1$. (循环初值)
- (3) 选主元素 $|a_{i_k, j_k}| = \max_{k \leq i, j \leq n} |a_{ij}|$ (双重循环)
- (4) 若 $a_{i_k, j_k} = 0$, 则结束 (这时 $|\mathbf{A}| = 0$)
- (5) 若 $i_k \neq k$, 需要换行, 则 $a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k, j}$ ($j = k, \dots, n$), $b_k \leftrightarrow b_{i_k}$;
 若 $j_k \neq k$, 需要换列, 则 $a_{ik} \leftrightarrow a_{i, j_k}$ ($i = 1, 2, \dots, n$), 并且 $I_z(k) \leftrightarrow I_z(j_k)$;
 由于 **未定元** 也相应要换, 所以还要记下未定元的下标.
- (6) 计算乘数: $a_{ik} \leftarrow a_{ik}/a_{kk}$ ($i = k+1, \dots, n$);
- (7) 消元: $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik} * a_{kj}$ ($j = k+1, \dots, n$); ($i = k+1, \dots, n$);
 $b_i \leftarrow b_i - a_{ik} * b_k$.
- (8) $k \leftarrow k+1$, 若 $k < n$, 转 (3);
- (9) 回代: $b_n \leftarrow b_n/a_{nn}$, $b_i \leftarrow (b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}b_j)/a_{ii}$ ($i = n-1, n-2, \dots, 2, 1$).
- (10) 调整未定元次序: $a_{1, I_z(i)} \leftarrow b_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$), $b_i \leftarrow a_{1i}$ ($i = 1, 2, \dots, n$).

高斯 - 约当列主元素方法求逆

做初等行变换: $(\mathbf{A} | \mathbf{E}) \rightarrow (\mathbf{E} | \mathbf{B})$, 则 $\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}$.

例4 (P177) 计算结果可直接存在原矩阵 $\mathbf{A}$ 所在的单元中.

算法设计:

用数组 $I_p(n)$ 记录主行, 而 $|\mathbf{A}|$ 放在变量 Det 中.

- (1) $\text{Det} \leftarrow 1$; $k = 1, 2, \dots, n$ (循环)
- (2) 求第 k 列主元 (最大元): $|a_{i_k, k}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}|$; $c_0 \leftarrow a_{i_k, k}$, $I_p(k) \leftarrow i_k$.
- (3) 若 $c_0 = 0$, 则 $\text{Det} \leftarrow 0$, 停止.
- (4) 若 $i_k \neq k$, 需换行: $a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k, j}$ ($j=1, 2, \dots, n$), $\text{Det} = -\text{Det}$.
- (5) $\text{Det} = \text{Det} \cdot c_0$.
- (6) 计算: $h \leftarrow a_{kk}$, $a_{kk} \leftarrow a_{kk} \leftarrow \frac{1}{c_0}$, $a_{ki} \leftarrow a_{ki} \cdot h$. $a_{ik} \leftarrow m_{ik} = -a_{ik} \cdot h$ ($i = 1, 2, \dots, n$, 但 $i \neq k$).
- (7) 消元: $a_{ij} \leftarrow a_{ij} + m_{ik}a_{kj}$ ($i, j = 1, 2, \dots, n$, 但 $i \neq k, i \neq k$)
- (8) 最后交换列: ($k = n-1, n-2, \dots, 2, 1$)
 $t = I_p(k)$. 若 $t \neq k$, 则换列: $a_{ik} \leftrightarrow a_{it}$ ($i = 1, 2, \dots, n$).

§4 高斯消去法的变形

1. 直接三角分解法

考虑方程组系数矩阵 A 的三角分解, 即 $A = LU$, 其中 L 是对角线为 1 的下三角阵, U 是上三角阵. 于是由 $Ax = b \Rightarrow (LU)x = b$, 记 $Ux = y$, 则

$$Ax = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases} \text{ (都是三角方程)}$$

分解算法:

$$\text{设 } A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = LU = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}.$$

其中 $a_{ij} = \sum_{k=1}^n l_{ik}u_{kj}$, 而 $l_{ii} = 1, l_{ij} = 0 (i < j); u_{ij} = 0 (i > j)$.

$$\text{容易得: } \begin{cases} a_{1j} = \sum_{k=1}^n l_{1k}u_{kj} = l_{11}u_{1j} = u_{1j} \\ a_{i1} = \sum_{k=1}^n l_{ik}u_{k1} = l_{i1}u_{11} = l_{i1}a_{11} \end{cases} \begin{cases} a_{rj} = \sum_{k=1}^n l_{rk}u_{kj} = \sum_{k=1}^r l_{rk}u_{kj} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk}u_{kj} + u_{rj}; (j \geq r) \\ a_{ir} = \sum_{k=1}^n l_{ik}u_{kr} = \sum_{k=1}^r l_{ik}u_{kr} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik}u_{kr} + l_{ir}u_{rr}. (i > r) \end{cases}$$

($j=1, 2, \dots, n; i=2, \dots, n$) ($j=r, r+1, \dots, n; i=r+1, \dots, n$) 当 $r < k, l_{rk}=0$; 当 $k > r, u_{rk}=0$.

由上式, 得 **递推算法** 如下:

$$(1) \text{ 先求 } U \text{ 的第一行, } L \text{ 的第一列: } \begin{cases} u_{1j} = a_{1j} (j = 1, 2, \dots, n) \\ l_{i1} = a_{i1}/a_{11} (i = 2, \dots, n) \end{cases}$$

$$(2) \text{ 然后逐行求 } u_{rj}, \text{ 逐列求 } l_{ir} (r=2, 3, \dots, n) \begin{cases} u_{rj} = a_{rj} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk}u_{kj}; (j \geq r) \\ l_{ir} = (a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik}u_{kr})/u_{rr}. (i > r) \end{cases}$$

利用, 当 $i < r$ 时, u_{ij} 已知; 而当 $j < r$ 时, l_{ij} 已知.

(3) 最后由回代法依次求解三角方程 $Ly = b$ 和 $Ux = y$.

$$\begin{pmatrix} 1 & \cdots & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

$$\begin{cases} y_1 = b_1; \\ y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}y_k (i = 2, 3, \dots, n). \end{cases} \begin{cases} x_n = y_n/u_{nn}; \\ x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^n u_{ik}x_k)/u_{ii} (i = n-1, n-2, \dots, 2, 1). \end{cases}$$

注: 在计算机编程时, 由于计算 u_{rj} 后, $a_{rj} (r \leq j)$ 不再用, 则 u_{rj} 可放在 a_{rj} 所在单元; 而计算 l_{ir} 后, $a_{ir} (i > r)$ 也不再用, 则 l_{ir} 也可放在 a_{ir} 所在的单元中;

同理, 计算 y_i 后, b_i 不再用, 则 y_i 可以放在 b_i 所在单元 ($i = 1, 2, \dots, n$); 之后, x_i 再放到 y_i 也就是原来 b_i 所在单元中.

例 当 $n = 4$ 时:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & b_3 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & b_4 \end{array} \right) \Rightarrow \left(\begin{array}{cccc|c} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} & y_1 \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} & y_2 \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & u_{34} & y_3 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & u_{44} & y_4 \end{array} \right) \Rightarrow \left(\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{array} \right).$$

2. 平方根法

若 $\mathbf{A}$ 是对称正定矩阵, 仍有 $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$. 用初等列变换将上三角阵 $\mathbf{U}$ 化为对角阵, 即

$$\mathbf{U} = \mathbf{D}\mathbf{U}_0 = \begin{pmatrix} u_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & u_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u'_{12} & \cdots & u'_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & u'_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

这时 $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{U}_0$, $\mathbf{A}^T = \mathbf{U}_0^T(\mathbf{D}\mathbf{L}^T)$

$= \mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$, 由分解唯一性, 得

$\mathbf{U}_0^T = \mathbf{L}$, 即 $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^T$, 其中 $\mathbf{L}$

为下三角阵, $\mathbf{D}$ 为对角阵.

由于 $\mathbf{A}$ 正定, 则 $\mathbf{D}$ 的对角线元素非负, 于是 $\mathbf{D} = \mathbf{D}_1^2 \Rightarrow \mathbf{A} = (\mathbf{L}\mathbf{D}_1)(\mathbf{L}\mathbf{D}_1)^T = \mathbf{L}_1\mathbf{L}_1^T$, 而 $\mathbf{L}_1$ 仍为下三角阵. 即

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \mathbf{L}_1\mathbf{L}_1^T = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ 0 & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

其中,

$$l_{ij} = 0$$

$$(i < j).$$

当 $i \geq j$ 时, 由 $a_{ij} = \sum_{k=1}^n l_{ik}l_{jk} = \sum_{k=1}^j l_{ik}l_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk} + l_{ij}l_{jj}$, 得 $l_{ij}l_{jj} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk}$.

列小于 j .

于是可逐列求 l_{ij} :
$$\begin{cases} l_{jj} = \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 \right)^{\frac{1}{2}}; \\ l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}) / l_{jj} \quad (i > j). \end{cases} \quad (j = 1, 2, \dots, n) \text{ 第 } j \text{ 列}$$

再由 $\mathbf{L}_1 \mathbf{y} = \mathbf{b}$, $\mathbf{L}_1^T \mathbf{x} = \mathbf{y}$, 得
$$\begin{cases} y_i = (b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k) / l_{ii} \quad (i = 1, 2, \dots, n). \\ x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^n l_{ki} x_k) / l_{ii} \quad (i = n, n-1, \dots, 2, 1). \end{cases}$$

向量的范数:

设 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$. 定义向量 $\mathbf{x}$ 的 p -**范数**: $\|\mathbf{x}\|_p \triangleq \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$.

例 $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$; $\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$; $\|\mathbf{x}\|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}\|_p = \max_{1 \leq i, j \leq n} |x_i|$.

矩阵的范数:

设 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$. 定义矩阵 $\mathbf{A}$ 的 Frobenius 范数为: $\|\mathbf{A}\|_F \triangleq \sqrt{\sum_{i,j=1}^n a_{ij}^2}$.

结论: $\rho(\mathbf{A}) \leq \|\mathbf{A}\|_F$.

第八章 解线性方程组的迭代法

§1 引言

如果方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 能表示为等价方程 $\mathbf{x} = \mathbf{Bx} + \mathbf{f}$, 则可考虑用迭代法

求解, 即任意取一初始解 $\mathbf{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \\ \vdots \\ x_n^{(0)} \end{pmatrix}$ 代入方程右端, 并记 $\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{Bx}^{(0)} + \mathbf{f}$, $\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{Bx}^{(1)} + \mathbf{f}$.

一般地, 有 $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{Bx}^{(k)} + \mathbf{f}$ ($k = 1, 2, 3, \dots$). 若 $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^*$, 则 $\mathbf{x}^* = \mathbf{Bx}^* + \mathbf{f}$,

即 $\mathbf{x}^* = \begin{pmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{pmatrix}$ 是原方程组的解.

§2 雅可比迭代法与高斯 - 塞德尔迭代法

1. 雅可比迭代法

设方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, 分解系数矩阵 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}$,

其中,

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -a_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & -a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

则 $\mathbf{Ax} = (\mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U})\mathbf{x} = \mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{Dx} = (\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x} + \mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}$.

记 $\mathbf{B}_0 = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})$, $\mathbf{f} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}$, 得 $\mathbf{x} = \mathbf{B}_0\mathbf{x} + \mathbf{f}$. 于是, 得所谓的 **雅可比迭代公式**:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_0\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}.$$

$$\text{分量形式 } x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

2. 高斯 - 塞德尔迭代法

分析雅可比迭代公式: $x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right)$.

当计算 $x_i^{(k+1)}$ 时, 由于 $x_1^{(k+1)}, \dots, x_{i-1}^{(k+1)}$ 已知, 并且要比 $x_1^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$ 更优, 于是雅可比迭代公式可改为:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right), \text{ 称 高斯 - 塞德尔公式.}$$

矩阵形式: $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{b} + \mathbf{L}\mathbf{x}^{(k+1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(k)})$, 整理得:

$$(\mathbf{D} - \mathbf{L})\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{b} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(k)} \Rightarrow \mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{U}\mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{G}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}.$$

§3 迭代法的收敛性

考虑 **迭代法** 的收敛性: 设误差向量 $\varepsilon^{(k)} = \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*$.

由 $\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k-1)} + \mathbf{f}$, $\mathbf{x}^* = \mathbf{B}\mathbf{x}^* + \mathbf{f}$, 两式相减, 得 $\varepsilon^{(k)} = \mathbf{B}\varepsilon^{(k-1)} = \mathbf{B}^2\varepsilon^{(k-2)} = \dots = \mathbf{B}^k\varepsilon^{(0)}$.

则 $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^* \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \varepsilon^{(k)} = 0 \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{B}^k = 0$.

定理2 $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{B}^k = 0 \Leftrightarrow \rho(\mathbf{B}) < 1$.

其中 $\rho(\mathbf{B}) \triangleq \max \{ |\lambda| \mid \lambda \text{ 为 } \mathbf{B} \text{ 的特征值} \}$, 称 $\mathbf{B}$ 的 **谱半径**.

证明 由于任意矩阵都相似于一个 **约当阵**, 而相似矩阵的特征值不变, 故

只需证约当块 $\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & & \\ & \lambda & 1 & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & \lambda & 1 \\ & & & & \lambda \end{pmatrix}$ 当且仅当 $|\lambda| < 1$ 时, $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{J}^k = 0$.

$$\text{记 } \mathbf{E}_{t1} \triangleq \begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ & 0 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & 0 & 1 \\ & & & & 0 \end{pmatrix}_{t \times t}, \text{ 记 } \mathbf{E}_{tk} \triangleq \mathbf{E}_{t1}^k. \text{ 则 } \mathbf{E}_{t2} = \mathbf{E}_{t1}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & & \\ & 0 & 0 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 0 & 0 & 1 \\ & & & & 0 & 0 \\ & & & & & 0 \end{pmatrix}_{t \times t}.$$

特别, 当 $k \geq t$ 时, $\mathbf{E}_{tk} = 0$. 于是

$$\mathbf{J}^k = (\lambda \mathbf{I}_t + \mathbf{E}_{t1})^k = \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} (\lambda \mathbf{I}_t)^{k-j} \mathbf{E}_{t1}^j = \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} \lambda^{k-j} \mathbf{E}_{tj} = \sum_{j=0}^{t-1} \binom{k}{j} \lambda^{k-j} \mathbf{E}_{tj},$$

注意 $\binom{k}{j} = \frac{k(k-1)\cdots(k-j+1)}{j!} \leq k^j$, 并且当 $|\lambda| < 1$ 时, $\lim_{k \rightarrow \infty} k^j \lambda^k = 0$, 即得 $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{J}^k = 0$.

定理 解线性方程组的 **迭代法** $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}$ 收敛 $\Leftrightarrow \rho(\mathbf{B}) < 1$.

习题选讲(P217)

1. 写出解如下线性方程组的 **雅可比迭代** 公式和 **高斯-塞德尔迭代** 公式:

$$\begin{cases} 5x_1 + 2x_2 + x_3 = -12; \\ -x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 20; \\ 2x_1 - 3x_2 + 10x_3 = 3. \end{cases}$$

解 将方程组中非主元素移至等式右边, 即
$$\begin{cases} 5x_1 = -2x_2 - x_3 - 12; \\ 4x_2 = x_1 - 2x_3 + 20; \\ 10x_3 = -2x_1 + 3x_2 + 3. \end{cases}$$

除以系数, 得
$$\begin{cases} x_1 = (-2x_2 - x_3 - 12)/5; \\ x_2 = (x_1 - 2x_3 + 20)/4; \\ x_3 = (-2x_1 + 3x_2 + 3)/10. \end{cases}$$

于是 (1) **雅可比迭代** 公式为:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (-2x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - 12)/5; \\ x_2^{(k+1)} = (x_1^{(k)} - 2x_3^{(k)} + 20)/4; \\ x_3^{(k+1)} = (-2x_1^{(k)} + 3x_2^{(k)} + 3)/10. \end{cases}$$

(2) **高斯-塞德尔迭代** 公式为:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (-2x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - 12)/5; \\ x_2^{(k+1)} = (x_1^{(k+1)} - 2x_3^{(k)} + 20)/4; \\ x_3^{(k+1)} = (-2x_1^{(k+1)} + 3x_2^{(k+1)} + 3)/10. \end{cases}$$

例 矩阵分解 $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$, 其中 $\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$.

解 令 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ a & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & a \\ 0 & b \end{pmatrix}$.

则由 $-1 = \sqrt{2}a$, 得 $a = -\frac{\sqrt{2}}{2}$, 由 $1 = a^2 + b^2 = \frac{1}{2} + b^2$, 得 $b = \frac{\sqrt{2}}{2}$, 即 $\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$.

第九章 矩阵的特征值与特征向量

§1 引言

1. 特征值

设 $\mathbf{A}$ 是 n 阶方阵, 则一元 n 次方程 $\varphi(x) = |\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}| = 0$ 的根: $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 称 $\mathbf{A}$ 的 **特征值**.

定理 1 (1) $\sum_{i=0}^n \lambda_i = \sum_{i=0}^n a_{ii} = \text{Tr}(\mathbf{A})$, 称 $\mathbf{A}$ 的 **迹**;

(2) $\prod_{i=1}^n \lambda_i = |\mathbf{A}| = \text{Det}(\mathbf{A})$;

3) 相似矩阵有相同的特征值.

2. 特征向量

设 λ 是方阵 $\mathbf{A}$ 的一个特征值, 则线性方程组

$$(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{x} = 0$$

的非零解称 $\mathbf{A}$ 的 **关于特征值 λ 的特征向量**. 这时 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$.

显然, 若 $\mathbf{x}$ 是 $\mathbf{A}$ 的关于 λ 的特征向量, 则 $k\mathbf{x}$ 也是 $\mathbf{A}$ 关于 λ 的特征向量.

定理 3 对 $\mathbf{A}$ 的每个特征值 λ , 存在 i , 使 $|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$.

事实上, 设 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 是 $\mathbf{A}$ 的关于特征值 λ 的特征向量, x_i 是绝对值最大的分量, 则由

$$(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{x} = 0 \Rightarrow (\lambda - a_{ii})x_i = \sum_{j \neq i} a_{ij}x_j \Rightarrow |\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} a_{ij} \frac{|x_j|}{|x_i|} \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|.$$

§2 幂法及反幂法

1. 幂法

通常只求最大特征值及最大特征向量.

设 $\mathbf{A}$ 有完全特征向量组, 即 $\mathbf{A}$ 的特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 所对应的特征向量 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$. 无关.

又设 $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|$. 任取初始向量 v_0 , 可表示为

$v_0 = \alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_n \mathbf{x}_n$. 令 $v_1 = \mathbf{A}v_0$, $v_2 = \mathbf{A}v_1, \dots$, 迭代得

$$v_k = \mathbf{A}v_{k-1} = \cdots = \mathbf{A}^k v_0 = \alpha_1 \lambda_1^k \mathbf{x}_1 + \cdots + \alpha_n \lambda_n^n \mathbf{x}_n = \lambda_1^k \left[\alpha_1 \mathbf{x}_1 + \sum_{j=2}^n \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{x}_j \right].$$

由 $|\frac{\lambda_j}{\lambda_1}| < 1 (j > 1) \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{v_k}{\lambda_1^k} = \alpha_1 \mathbf{x}_1$ 即当 k 充分大时, $v_k \approx \alpha_1 \lambda_1^k \mathbf{x}_1$ 为 $\mathbf{A}$ 的 λ_1 的特征向量. 记 v_k 第 i 个分量为 $(v_k)_i$, 则 $\frac{(v_{k+1})_i}{(v_k)_i} \approx \lambda_1 + o(k) \rightarrow \lambda_1 (k \rightarrow \infty)$, 而 $(v_k)_i \approx \alpha_1 \lambda_1^k (\mathbf{x}_1)_i + (\varepsilon_k)_i$. 称 **幂法**.

注: (1) 若 $\mathbf{A}$ 的主特征值为重根: $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_r$ 则 $v_k = \mathbf{A}^k v_0 = \sum_{j=1}^n \alpha_j \lambda_j^k \mathbf{x}_j = \lambda_1^k \left[\sum_{j=1}^r \alpha_j \mathbf{x}_j + \sum_{j=r+1}^n \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{x}_j \right] \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{v_k}{\lambda_1^k} = \sum_{j=1}^r \alpha_j \mathbf{x}_j \triangleq \mathbf{x}$, 仍是 $\mathbf{A}$ 的关于特征值 λ_1 的特征向量.

(2) 当 $k \rightarrow \infty$ 时, 若 $|\lambda_1| \neq 1$, 则 $v_k \rightarrow \infty$ 或 $v_k \rightarrow 0$. (其分量)

所以一般要规范化 v_k , 即 $v_k = \frac{v_k}{\max(v_k)}$, 其中 $\max(v_k)$ 为向量 v_k 绝对值最大的分量.

2. 反幂法

若只求按模最小的特征值及其特征向量, 则要用 **反幂法**. 设 $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$, 要求 $\lambda_n = ?$ 及 $x_n = ?$

由于 $\mathbf{A}^{-1}$ 的特征值为 $|\frac{1}{\lambda_n}| > |\frac{1}{\lambda_{n-1}}| \geq \cdots \geq |\frac{1}{\lambda_1}|$, 特征向量 $\mathbf{x}_n, \cdots, \mathbf{x}_1$, 则

由反幂迭代公式:
$$\begin{cases} v_k = (\mathbf{A}^{-1})^k v_{k-1} \\ u_k = \frac{v_k}{\max(v_k)} \end{cases}$$

仍有 $\lim_{k \rightarrow \infty} u_k = \frac{\mathbf{x}_n}{\max(\mathbf{x}_n)}$, $\lim_{k \rightarrow \infty} \max(v_k) = \frac{1}{\lambda_n}$.

记号: $(\mathbf{x})_i$: 向量 $\mathbf{x}$ 的第 i 个分量.

$\max(\mathbf{x})$: 向量 $\mathbf{x}$ 的绝对值最大的分量.

取 $v_0 \neq 0$, $u_1 = \frac{\mathbf{A}v_0}{\max(\mathbf{A}v_0)}, \cdots, u_k = \frac{\mathbf{A}^k v_0}{\max(\mathbf{A}^k v_0)}$.

则 $\lim_{k \rightarrow \infty} u_k = \frac{\mathbf{x}_1}{\max(\mathbf{x}_1)}$, $\lim_{k \rightarrow \infty} \max(\mathbf{A}^k v_0) = \lambda_1$.

数值分析 (总复习)

主讲: 徐尚进

(广西大学数学与信息科学学院)

2005 年 12 月

第一章 绪 论

数值分析 也称 **计算方法**, **数值逼近**. 是研究
用计算机解决数学问题的数值方法及理论.

内容主要有: 函数的数值逼近, 数值积分, 常微分方程数值解, 方程求根, 线性方程组的求解, 等等.

由于在实际应用中 **近似计算 (即误差)** 无处不在, 所以数值方法要有**可靠的理论基础**, 能任意逼近并达到精度要求; 并且由于**面向计算机**, 运算只能是**加、减、乘、除和逻辑运算**.

数值分析研究的误差主要 **截断误差** 和 **舍入误差**.

近似解与准确解之间的误差 四舍五入后产生的误差

记号与结论:

近似数 x^* 误差记 $e(x^*)$, 误差限记 $\varepsilon(x^*)$, 相对误差记 $e_r(x^*)$, 相对误差限记 $\varepsilon_r(x^*)$.

函数 $f(x^*)$ 的误差限和相对误差限分别记为 $\varepsilon(f(x^*))$ 和 $\varepsilon_r(f(x^*)) = \frac{\varepsilon(f(x^*))}{|f(x^*)|}$.

定理 若近似数 $x^* = \pm a_1.a_2 \cdots a_n \times 10^m$ 有 n 位有效数字, 则

误差限: $\varepsilon(x^*) \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$, **相对误差限:** $\varepsilon_r(x^*) \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{n-1}$.

反之, 若 $\varepsilon_r(x^*) \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)}$, 则 x^* 至少具有 **n 位有效数字**.

例 (P7) 要使 $\sqrt{20}$ 的近似值的相对误差限小于 0.001, 应取几位有效数字?

解 设应取 n 位有效数字. 由定理的证明, $\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$, 而 $\sqrt{20}=4.??$.

即 $a_1=4$.

令 $\frac{1}{2 \cdot 4} \times 10^{-n+1} \leq 0.001$, 解得 $10^n \geq 1250$, 故 $n = 4$ 即可.

数值运算的误差估计

(1) 设两个近似值 x_1^* 和 x_2^* 及其误差限分别为 $\varepsilon(x_1^*)$ 和 $\varepsilon(x_2^*)$, 则四则运算后:

$$\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) \approx \varepsilon(x_1^*) + \varepsilon(x_2^*) \text{ (注意不能取 “-” 号, 教材有误);}$$

$$\varepsilon(x_1^* \cdot x_2^*) \approx |x_1^*| \varepsilon(x_2^*) + |x_2^*| \varepsilon(x_1^*);$$

$$\varepsilon(x_1^*/x_2^*) \approx \frac{|x_1^*| \varepsilon(x_2^*) + |x_2^*| \varepsilon(x_1^*)}{|x_2^*|^2} = \frac{\varepsilon(x_1^*/x_2^*)}{|x_2^*|^2};$$

(2) 设 $f(x)$ 是一元函数, $f(x^*)$ 是 $f(x)$ 的近似值, 则

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)| \varepsilon(x^*).$$

数值计算中应遵循的原则:

(1) 避免除数的绝对值远远小于被除数的除法.

(2) 避免两相近数相减.

(3) 避免大数 “吃掉 ” 小数.

(4) 注意简化计算步骤, 减少运算次数.

习题选讲(P12)

$$\text{由 } e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x^*}, \quad e_r(f(x^*)) = \frac{e(f(x^*))}{f(x^*)}.$$

并且, 函数 $f(x^*)$ 的误差仍然有 $e(f(x^*)) \approx |f'(x^*)| e(x^*)$.

$$1. \text{ 直接得 } e(\ln x^*) \approx |(\ln x^*)'| e(x^*) = \frac{1}{|x^*|} e(x^*) = e_r(x^*) = \delta.$$

$$2. \text{ 由 } e((x^*)^n) \approx |((x^*)^n)'| e(x^*) = n(x^*)^{n-1} e(x^*), \text{ 得}$$

$$e_r((x^*)^n) = \frac{e((x^*)^n)}{(x^*)^n} = \frac{n(x^*)^{n-1} e(x^*)}{(x^*)^n} = \frac{ne(x^*)}{x^*} = ne_r(x^*) = 0.02n.$$

8. 如果用牛顿-莱布尼兹公式计算, 即

$$\int_N^{N+1} \frac{1}{1+x^2} dx = \arctan(N+1) - \arctan N.$$

不妥! 因为当 N 充分大时, $\arctan(N+1)$ 和 $\arctan N$ 是两很相近的近似数, 必须避免直接相减.

$$\text{可利用定积分中值定理: } \int_a^b f(x) dx = f(\xi)(b-a), \quad \xi \in [a, b]$$

$$\text{得 } \int_N^{N+1} \frac{1}{1+x^2} dx = \frac{1}{1+\xi^2} [(N+1) - N] \approx \frac{1}{N^2}.$$

$$12. \text{ 如果取准确值 } x = \sqrt{2}, \text{ 则 } (\sqrt{2}-1)^6 \text{ 与 } \frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6} \text{ 完全相等.}$$

记 $f_1(x) = (x - 1)^6$, $f_2(x) = \frac{1}{(x + 1)^6}$, 则

$$f_1(\sqrt{2}) = (\sqrt{2} - 1)^6, \quad f_2(\sqrt{2}) = \frac{1}{(\sqrt{2} + 1)^6}.$$

这时, 如果取近似值 $x^* = 1.4$, 则 $f_1(x^*)$ 的误差限为

$$\varepsilon(f_1(x^*)) \approx |f_1'(x^*)|\varepsilon(x^*) = |6(x^* - 1)^5|\varepsilon(x^*).$$

而 $f_2(x^*)$ 的误差限为

$$\varepsilon(f_2(x^*)) \approx |f_2'(x^*)|\varepsilon(x^*) = \left| \frac{6}{(x^* - 1)^7} \right| \varepsilon(x^*).$$

比较两个误差限 $\varepsilon(f_1(x^*))$ 与 $\varepsilon(f_2(x^*))$ 的大小, 只需比较 $|6(1.4 - 1)^5|$ 与 $\left| \frac{6}{(1.4 - 1)^7} \right|$ 的大小即可知道哪一个结果更好.

第二章 插值法

设函数 $y = f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上定义, 但只知道 $[a, b]$ 上 $n+1$ 个点:

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

及其函数值: $y_i = f(x_i)$ ($i = 0, 1, \cdots, n$). 如何求 $f(x)$?

由于准确函数 $f(x)$ 是计算不出来的, 所以只能求一个近似函数来逼近 $f(x)$.

一般取 **多项式函数** $P(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n \approx f(x)$, 并使

$$P(x_i) = y_i = f(x_i) \quad (i = 0, 1, \cdots, n) \quad (1.1)$$

这时称 $P(x)$ 为 **插值多项式**, 称 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为 **插值节点**, 称 $[a, b]$ 为 **插值区间**, 等式 (1.1) 称为 **插值条件**, 所用的方法称 **插值法**.

辅助知识: 设 $P(x)$ 是 n 次多项式, 则 $P(x_0) = 0 \iff P(x) = (x - x_0)Q(x)$. 特别,

$P(x_0) = P'(x_0) = \cdots = P^{(k)}(x_0) = 0 \iff P(x) = (x - x_0)^{k+1}Q(x)$ ($Q(x)$ 是 $n-k-1$ 次多项式).

考虑 $n = 1$ 即 2 个节点 x_0, x_1 的情形, 这时 $P(x) = a_0 + a_1x \approx f(x)$, 插值条件: $P(x_0) = y_0 = f(x_0)$, $P(x_1) = y_1 = f(x_1)$. 先构造两个一次函数 $l_0(x)$ 和 $l_1(x)$, 满足

$$l_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{当 } x = x_0 \\ 0 & \text{当 } x = x_1 \end{cases} \quad l_1(x) = \begin{cases} 0 & \text{当 } x = x_0 \\ 1 & \text{当 } x = x_1 \end{cases}$$

如果这样两个一次函数存在, 则取 $P(x) = y_0l_0(x) + y_1l_1(x)$ 仍是一次函数, 并有 $P(x_0) = y_0$, $P(x_1) = y_1$. 再由插值多项式的唯一性, $P(x)$ 即为所求.

以下考虑两个一次函数 $l_0(x)$ 和 $l_1(x)$ 的构造:

先由 $l_0(x_1) = 0 \Rightarrow l_0(x) = (x - x_1)Q(x)$.

但 $l_0(x)$ 是一次函数, 所以 $Q(x)$ 只能是常数, 记为 c , 即 $l_0(x) = (x - x_1)c$.

再由 $1 = l_0(x_0) = (x_0 - x_1)c \Rightarrow c = \frac{1}{x_0 - x_1} \Rightarrow l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}$.

同理 $l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$. 从而

$$P(x) = y_0l_0(x) + y_1l_1(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}.$$

显然这两个函数 $l_0(x)$ 和 $l_1(x)$ 很关键, 称为 **基函数**. 其特点是:

在自己对应的节点上取值为 1, 在别的节点上取值为 0.

对一般的 n , 基函数可取 $l_j(x) = \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)}$,

$j = 0, 1, 2, \cdots, n$. 显然在 $n+1$ 个节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 有 $l_j(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{当 } i = j; \\ 0 & \text{当 } i \neq j. \end{cases}$

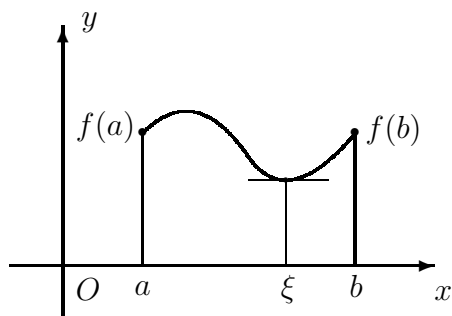
这时, 令 $L_n(x) = \sum_{j=0}^n y_j l_j(x)$. 称为 **拉格朗日插值多项式**.

显然 $L_n(x_i) = \sum_{j=0}^n y_j l_j(x_i) = y_i$. 即 $L_n(x)$ 满足插值条件, 唯一.

余项 $R(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$, 其中 $\xi \in (a, b)$ 且依赖于 x .

复习 “罗尔定理”

- 设 (1) $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续;
 (2) $f(x)$ 在 (a, b) 内可导;
 (3) $f(a) = f(b)$.



则存在 $\xi \in (a, b)$, 使 $f'(\xi) = 0$.

推论 1 假设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上具有 1 阶导数并有 2 个零点,
 则 $f'(x)$ 在 (a, b) 内至少有 1 个零点.

推论 2 假设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上具有高阶导数并有 n 个零点, 则

$f'(x)$ 在 (a, b) 内至少有 $n-1$ 个零点;

$f''(x)$ 在 (a, b) 内至少有 $n-2$ 个零点;

.....

$f^{(n-1)}(x)$ 在 (a, b) 内至少有 1 个零点.

例 设 $a < c = \frac{a+b}{2} < b$ 作 $f(x)$ 的 3 次插值多项式 $H(x)$, 满足

$$H(a) = f(a), H(b) = f(b), H(c) = f(c), H'(c) = f'(c),$$

求 $H(x)$ 及余项 $R(x) = f(x) - H(x)$.

解 为求 $H(x)$, 先构造 4 个基函数

$\alpha_a(x), \alpha_c(x), \alpha_b(x), \beta_c(x)$, 要求每个

基函数次数不超过 3, 并且各在 **针**
对自己 的一个条件上取值 1, 而在
 其它条件上取值 0, 即

x	a	c	b	x	c
$H(x)$	$f(a)$	$f(c)$	$f(b)$	$H'(x)$	$f'(c)$
$\alpha_a(x)$	1	0	0	$\alpha'_a(x)$	0
$\alpha_c(x)$	0	1	0	$\alpha'_c(x)$	0
$\alpha_b(x)$	0	0	1	$\alpha'_b(x)$	0
$\beta_c(x)$	0	0	0	$\beta'_c(x)$	1

然后取 $H(x) = f(a)\alpha_a(x) + f(c)\alpha_c(x) + f(b)\alpha_b(x) + f'(c)\beta_c(x)$ 即可.

先计算 $\alpha_a(x)$. 由 $\alpha_a(c) = \alpha'_a(c) = 0 = \alpha_a(b) = 0$, 可知 $\alpha_a(x)$ 应含因式 $(x - c)^2(x - b)$, 但 $\alpha_a(x)$ 是 3 次函数, 因此 $\alpha_a(x) = k(x - c)^2(x - b) = \frac{(x - c)^2(x - b)}{(a - c)^2(a - b)}$;

同理, 由对称性, 可得 $\alpha_b(x) = \frac{(x - c)^2(x - a)}{(b - c)^2(b - a)}$.

再求 $\alpha_c(x) = (x - a)(x - b)(kx + l) = \frac{(x - a)(x - b)}{(c - a)(c - b)} [k(x - c) + l]$.

由 $1 = \alpha_c(c) = l$, 得 $l = 1$. 由 $0 = \alpha'_c(c) = \frac{1}{c - a} + \frac{1}{c - b} + k = k$, 得 $\alpha_c(x) = \frac{(x - a)(x - b)}{(c - a)(c - b)}$.

关于 $\beta_c(x)$. 容易得 $\beta_c(x) = k(x - a)(x - c)(x - b) = k \frac{(x - a)(x - b)}{(c - a)(c - b)} (x - c) = \frac{(x - a)(x - b)}{(c - a)(c - b)} (x - c)$.

因为 $1 = \beta'_c(c) = k \frac{(c - a)(c - b)}{(c - a)(c - b)} = k$.

关于余项, 往证 $R(x) = f(x) - H(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} (x - a)(x - c)^2(x - b)$.

事实上, 作 $\varphi(t) = f(t) - H(t) - \frac{f(x) - H(x)}{(x - a)(x - c)^2(x - b)} (t - a)(t - c)^2(t - b)$.

显然 $\varphi(t)$ 有 4 个 0 点 a, c, b, x , 因此 $\varphi'(t)$ 有 3+1 个 0 点 (另一个 0 点是 c), 可得 $0 = \varphi^{(4)}(\xi) = f^{(4)}(\xi) - 0 - \frac{f(x) - H(x)}{(x - a)(x - c)^2(x - b)} 4!$. 整理后即得余项公式.

均差

一阶均差: $f[x_0, x_k] = \frac{f(x_k) - f(x_0)}{x_k - x_0}$;

二阶均差: $f[x_0, x_1, x_k] = \frac{f[x_0, x_k] - f[x_0, x_1]}{x_k - x_1}$;

k 阶均差: $f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}, x_k] = \frac{f[x_0, x_1, \dots, x_{k-2}, x_k] - f[x_0, x_1, \dots, x_{k-2}, x_{k-1}]}{x_k - x_{k-1}}$.

牛顿均差多项式

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

其中 $N_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \cdots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$
($a_k = f[x_0, x_1, \cdots, x_k]$, $k = 0, 1, \cdots, n$).

而 $R_n(x) = f[x, x_0, x_1, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x) = f(x) - N_n(x)$ 是牛顿多项式的插值余项.

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

由于 $f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$, $\xi \in [a, b]$, 所以

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

1. 最佳一次逼近多项式

设 $f(x) \in C^2[a, b]$, 且 $f''(x)$ 在 (a, b) 内保号, 设最佳一次逼近多项式 $P_1(x) = a_0 + a_1x$, 有 $n+2=3$ 个正负交错偏差点 包含区间端点, 即

$a = x_1 < x_2 < x_3 = b$. 容易知 $f'(x_2) = a_1$, 再由

$P_1(a) - f(a) = -[P_1(x_2) - f(x_2)] = P_1(b) - f(b)$, 得

$$\begin{cases} a_0 + a_1a - f(a) = -a_0 - a_1x_2 + f(x_2); \\ a_0 + a_1a - f(a) = a_0 + a_1b - f(b). \end{cases}$$

解得 $a_1 = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} = f'(x_2)$, $a_0 = \frac{f(a) + f(x_2)}{2} - a_1 \frac{a + x_2}{2}$.

于是 $P_1(x) = a_0 + a_1x = \frac{f(a) + f(x_2)}{2} + a_1\left(x - \frac{a + x_2}{2}\right)$.

2. 最佳一次平方逼近多项式

标准为: $\|f(x) - P(x)\|_2 \triangleq \sqrt{\int_a^b [(f(x) - P(x))^2] dx}$.

设 $P_1(x) = a_0 + a_1x$. 为确定 **系数** a_0, a_1 , 作多元函数

$$I(a_0, a_1) \triangleq \|P_1(x) - f(x)\|_2^2 = \int_a^b [a_0 + a_1x - f(x)]^2 dx.$$

考虑 $I(a_0, a_1)$ 的最小值. 由 **多元函数极值的必要条件**, 令

$$\frac{\partial I}{\partial a_0} = 2 \int_a^b [a_0 + a_1x - f(x)] dx = 0; \quad \frac{\partial I}{\partial a_1} = 2 \int_a^b x [a_0 + a_1x - f(x)] dx = 0.$$

整理后可得到关于 a_0, a_1 的 **2 元线性方程组**:

$$\begin{cases} a_0 \int_a^b dx + a_1 \int_a^b x dx = \int_a^b f(x) dx \\ a_0 \int_a^b x dx + a_1 \int_a^b x^2 dx = \int_a^b x f(x) dx \end{cases}$$

4. 高斯点

定义: 若求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ 具有 $2n+1$ 次代数精度, 则称为 **高斯公式**, 其中的求积节点称为 **高斯点**.

5. 牛顿 - 柯特斯公式

区间 $[a, b]$ 作 n 等分, 得节点等距的插值型求积公式, 称 **牛顿 - 柯特斯公式**.

$$C_k^{(n)} = \frac{A_k}{b-a} = \frac{1}{b-a} \int_a^b l_k(x)dx = \frac{(-1)^{(n-k)}}{nk!(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (t-j)dt. \text{ 称柯特斯系}$$

数.

当 $n=1$ 时, 得梯形公式: $T = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$.

当 $n=2$ 时, 得辛甫生公: $S = \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$.

6. 复化求积法与龙贝格算法

见 **习题选讲** (这里不展开讲).

1. 尤拉公式

2. 后退的尤拉公式

若令 $\frac{y_{n+1}-y_n}{x_{n+1}-x_n} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$, 则有 $y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$. 称 **后退的尤拉公式**.

注意: 后退的尤拉公式是 **隐式** 的, 因为公式右边含有 y_{n+1} .

3. 梯形公式

平均两种尤拉公式, 得 **梯形公式**: $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})]$.

注意: 梯形公式也是 **隐式** 的, 因为公式右边含有 y_{n+1} .

4. 改进的尤拉公式

由于 **梯形公式** 右端仍含有 y_{n+1} , 不能直接用迭代法. 但若用 **尤拉公式** 计算 **梯形公式** 右边的 $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$, 即得

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

称 **改进的尤拉公式**.

2. 牛顿公式

方程 $f(x)=0$. 若 $f'(x_k) \neq 0$, 则

$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$, 称 **牛顿公式**.

几何意义

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

即 x_{k+1} 是曲线 $y=f(x)$ 在点 $(x_k, f(x_k))$ 处切线与 x 轴的交点.

若 $\mathbf{A}$ 是对称正定矩阵, 则 $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$, 其中 $\mathbf{L}$ 为下三角阵.

这时, 由 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \Rightarrow (\mathbf{L}\mathbf{L}^T)\mathbf{x} = \mathbf{b}$, 记 $\mathbf{L}^T\mathbf{x} = \mathbf{y}$, 得

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \iff \begin{cases} \mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{b} \\ \mathbf{L}^T\mathbf{x} = \mathbf{y} \end{cases} \text{ (都是三角方程)}$$

分解算法:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ 0 & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

定理 解线性方程组的 **迭代法** $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}$ 收敛 $\Leftrightarrow \rho(\mathbf{B}) < 1$.

习题选讲(P217)

1. 写出解如下线性方程组的 **雅可比迭代** 公式和 **高斯-塞德尔迭代** 公式:

$$\begin{cases} 5x_1 + 2x_2 + x_3 = -12; \\ -x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 20; \\ 2x_1 - 3x_2 + 10x_3 = 3. \end{cases}$$

解 将方程组中非主元素移至等式右边, 即 $\begin{cases} 5x_1 = -2x_2 - x_3 - 12; \\ 4x_2 = x_1 - 2x_3 + 20; \\ 10x_3 = -2x_1 + 3x_2 + 3. \end{cases}$

除以系数, 得 $\begin{cases} x_1 = (-2x_2 - x_3 - 12)/5; \\ x_2 = (x_1 - 2x_3 + 20)/4; \\ x_3 = (-2x_1 + 3x_2 + 3)/10. \end{cases}$

于是 (1) **雅可比迭代** 公式为:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (-2x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - 12)/5; \\ x_2^{(k+1)} = (x_1^{(k)} - 2x_3^{(k)} + 20)/4; \\ x_3^{(k+1)} = (-2x_1^{(k)} + 3x_2^{(k)} + 3)/10. \end{cases}$$

(2) **高斯-塞德尔迭代** 公式为:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (-2x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - 12)/5; \\ x_2^{(k+1)} = (x_1^{(k+1)} - 2x_3^{(k)} + 20)/4; \\ x_3^{(k+1)} = (-2x_1^{(k+1)} + 3x_2^{(k+1)} + 3)/10. \end{cases}$$

例 矩阵分解 $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$, 其中 $\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$.

解 令 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ a & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & a \\ 0 & b \end{pmatrix}.$

则由 $-1 = \sqrt{2}a$, 得 $a = -\frac{\sqrt{2}}{2}$, 由 $1 = a^2 + b^2 = \frac{1}{2} + b^2$, 得 $b = \frac{\sqrt{2}}{2}$, 即 $\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}.$