TAMKANG UNIVERSITY
SOFTWARE ENGINEERING GROUP
淡江軟體工程實驗室 http://www.tkse.tku.edu.tw

數 值 方 法

資訊工程系
王英宏

授課資訊

- 教科本：數值分析 林丕靜著 儒林出版
  - 請尊重智慧財產權，勿非法影印使用教科書與參考書籍及使用盜版軟體
- 成績評定：
  - 上課出席:15%
  - 出席成績僅考核出席與否，亦僅佔總成績15%，故不接受任何請假
  - 平時成績(含隨堂作業、小考與作業): 50%
  - 期中考:15%
  - 期末考20%
  - 演講出席:每場加一分(需簽到簽退)
- 考試方式:
  - 筆試、需使用工程用計算機
  - 期末考將提前一周考試
  - Closed Book
- 上課方式
  - 板書為主、投影片為輔
  - 上課時間不私下聊天、手機請關機或改震動，並請移駕教室外接聽

金句名言分享

- 台灣首富郭台銘在其部落格上提到
  - 為金錢做事，容易累
  - 為理想做事，能耐風寒
  - 為興趣做事，則永不倦怠
- 成功的要素不僅止於有正確的策略，還要有
  - 快如閃電的速度
  - 狠如巨雷的執行力

對同學們的建議

- 在專業養成上
  - 奠定紮實的基礎
  - 養成終身學習的習慣
- 在人格養成上
  - 建立正確的態度
  - 處事三態：真誠、負責、合群

目次

- 基本概念
- 非線性方程式求根
- 解線性聯立方程式
- 內插法
- 數值積分

基本概念

- 何謂數值方法(數值分析)
  - 以具有邏輯程序及反覆演算的步驟,解決傳統複雜緊瑣的古典數學問題之方法
  - 數值方法的邏輯程序與反覆的步驟可以轉換成程式，並以電腦執行，獲得數學問題的解
  - 無論是理、工、商、管等相關科系均將數值方法列為必修科目

基本概念

- 常用之數學定理:
  - 中間值定理
    - If f(x)在區間[a,b]連續,且L為f(a)與f(b)之間的值, then 必存在一點c, 其中a<c<b (即 c ∈(a,b)),使得 f(c)=L。
  - 平均值定理
    - If f(x)在區間[a,b]連續,且可微分, then 必存在一點c,其中a<c<b, 使的f(b)-f(a)=f'(c)(b-a)or 記為f'(c)=(f(b)-f(a))/(b-a)
  - 泰勒展開式定理
    - If f(x)在區間[a,b]連續且可微分(n+1)次(即 n>=1)且已知點$x_0 \in [a,b]$, then 任意點 $x \in (a,b)$之方程式值 $f(x)= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \ldots +[f^{(n)}(x_0)/n!] (x- x_0)^n + [f^{(n+1)}(\xi)/(n+1)!] (x- x_0)^{n+1}$ 其中 $\xi \in (x_0,x)$

誤差 (Error)

- 為何討論誤差
  - 數值方法是採用一連串的循序步驟與反覆代入的計算過程，因此勢必在計算時間與計算值得精確度上求得一個平衡，所以也就要容許所謂的誤差存在
- 何謂誤差
  - 誤差(Error)不全然就是錯誤(Mistake)，它是代表了估算值與真實解之間的一個差距.
- 誤差的表示方式
  - 絕對誤差
  - 相對誤差
    - 絕對誤差所表現的是一個數值，數值本身的大小容易造成人們的錯覺
    - 相對誤差是表示誤差與真實值(或估算值)之間的一個比值(百分比)

誤差 (Error)

- 說明
  - 令正確值 = X ,估算值 = X'
  - 則絕對誤差記為 $e_x = |X - X'|$
  - 相對誤差記為 rel. $e_x = |(X - X')/X| \cong |(X - X')/X'|$
  - 例: X=100000 X' =99900
  - Y=0.002 Y' =0.0025
  - 對X而言,絕對誤差e_x=|100000-99900|=|100|=100
  - 對Y而言,絕對誤差e_y=|0.002-0.0025|=0.0005
  - 對X而言,相對誤差rel. e_x=|100/100000|=1/1000
  - 對Y而言,相對誤差rel. e_y=|0.0005/0.002|=1/4

TAMKANG UNIVERSITY SOFTWARE ENGINEERING GROUP
淡江軟體工程實驗室 http://www.tkse.tku.edu.tw

誤差 (Error)

- 產生誤差的三各主要因素:
  - 原始資料的誤差
    - 開始計算之前方程式之係數或初始代入值，即非精確 值,故造成誤差。
  - 截斷誤差
    - 使用的數學計算項次，因為有無窮的計算項或計算項過多，因而終止計算時，未計算的項次造成誤差。
  - 約略誤差
    - 計算時使用小數位數不足，致使一部份的小數被捨去所造成的誤差。
  - 當吾人以程式完成某一數值方法時,可以透過程式設計上的技巧，降低前述三個問題所造成的誤差
    - Thinking About How To Do ?!

誤差的衍生

- 誤差會隨著算術運算而變化，可能增大，亦可能減小、假設已知兩各真實值為x與y，而某一數值運算所推得知估算值及誤差,分別為 x’, y’,及e_x, e_y。
  - 不失一般性，假設e_x及e_y均為正向偏差,即
  - $x = x' + e_x$, $y = y' + e_y$
  - 當數值運算接下去，對x與y進行四則運算之一時，會產生下列變化:

TAMKANG UNIVERSITY SOFTWARE ENGINEERING GROUP
淡江軟體工程實驗室 http://www.tkse.tku.edu.tw

誤差的衍生

- 加法運算
  - 真實值=x+y
  - 估算值= x’+y’
  - 加法運算之誤差

    $e_{x+y} = |(x+y) - (x'+y')|$

    $= |(x'+e_x) + (y'+e_y) - (x'+y')|$
  - 故加法運算之誤差 $e_{x+y} = |e_x+e_y|$
- 減法運算
  - 真實值=x-y
  - 估算值=x’ – y’
  - 減法運算之誤差

    $e_{x-y} = |(x-y) - (x'-y')|$

    $= |(x'+e_x) - (y'+e_y) - (x'-y')|$
  - 故減法運算之誤差 $e_{x-y} = |e_x-e_y|$

誤差的衍生

- 乘法運算
  - 真實值=x*y
  - 估算值=x'*y'
  - 乘法運算之誤差

    $e_{xy} = |(x*y) - (x'*y')|$

    $= |(x' + e_x) * (y'+e_y) - x'*y'|$

    $= x'y' + x'e_y + y'e_x + e_xe_y - x'y'$
  - 乘法運算之誤差 $e_{xy} = x'e_y + y'e_x + e_xe_y$
- 除法運算
  - 真實值=x/y
  - 估算值= x'/y'
  - 除法運算之誤差
  - $e_{x/y} = |(x/y) - (x'/y')|$

    $= |(x' + e_x)/(y'+e_y) - (x'/y')|$

    $= [(x' + e_x)/y']*[1/(1+e_y/y')]$

    $= [(x' + e_x)/y']*[1 - e_y/y' + (e_y/y')^2 - (e_y/y')^3 + \ldots]$
  - 省略二次方以上的項
  - 除法運算之誤差 $e_{x/y} = e_x/y' - (x'e_y)/y'^2$

非線性方程式求根

- 傳統方法
  - 分解方程式為多個一次式乘積
- 數值方法
  - 反覆代入法求一根

解非線性方程式的方法

- **數值方法解非線性方程式可分為兩類：**

一、括入根法

使用2個初始值(括入根)反覆代入數值計算公式

計算次數較多，一定可以找到根(收斂)

二、局部收斂法

使用2個或1個初始值(局部逼近)反覆代入數值計算公式

計算次數較少，可能找不到根(發散)

TAMKANG UNIVERSITY SOFTWARE ENGINEERING GROUP
淡江軟體工程實驗室 http://www.tkse.tku.edu.tw

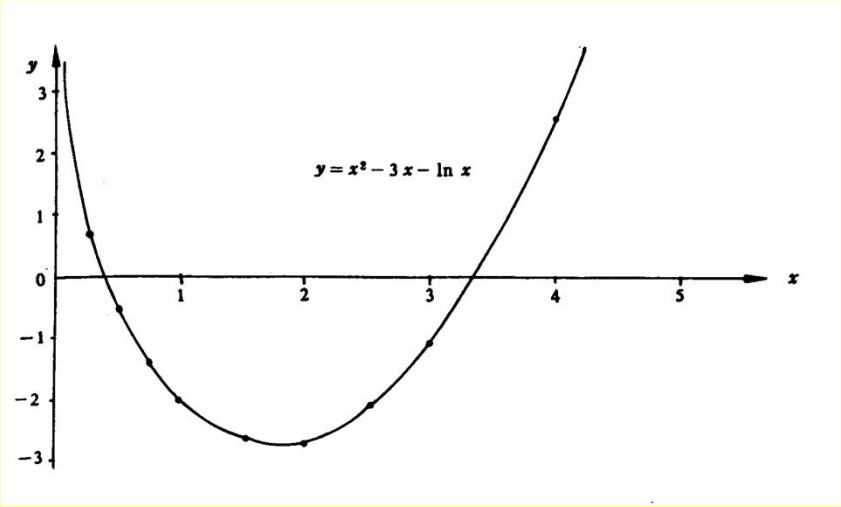
求初始值的方法

- 依非線性方程式進行：
  - 一、單圖法
  - 二、雙圖法
  - 三、近似方程式法
  - 四、笛卡兒符號法
  - 五、布丹定理法

單 圖 法

- 將非線性方程式在平面座標的略圖畫出，找出與X軸交點的鄰近已知值作為初始值。
- 範例說明：
  - $Y = X^2 - 3X - \ln X$
  - 該方程式不複雜，可直接以固定的整數分別帶入，將其平面座標略圖畫出

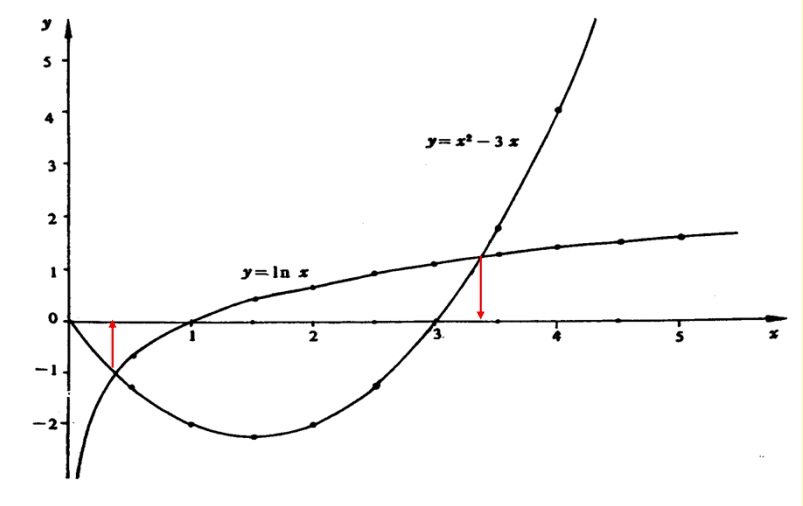
單 圖 法



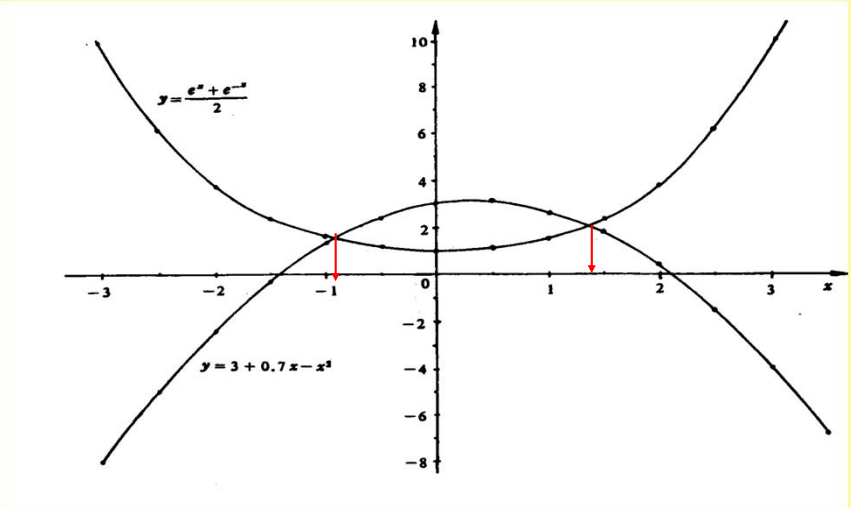
雙圖法

- 將方程式分解成2部分，其中一部份變號，再分別畫出其平面座標圖，再求兩圖之交點投影至X 軸的交點，取鄰近已知值為初始值。
- 範例說明:
  - $Y = X^2 - 3X - \ln X$
  - $Y = 2X^2 - 1.4X - 6 + e^X + e^{-X}$
  - 此二方程式明顯地由兩部分不同型式的方程式組成，故將方程式分成兩部分，其中一部份先變號，在分別求其平面座標圖

雙圖法



雙圖法



近似方程式

- 找到一個近似但易解的方程式，以其根為初始值。
- 範例說明：
  - f (X) = e^x ＋ |CosX|/16 －2
  - 已知|Cos X|≦1 ， 故 |CosX|/16 ≦ 1/16 = 0.0625
  - 可選|CosX| = 0，近似方程式 g(x) = e^x－2 = 0
  - 以x = ln2 為初始值，故得x = 0.69315
  - 又可選|CosX| = 1，近似方程式 h(x) = e^x ＋ 1/16 － 2 = e^x－1.9375 = 0
  - 以x = ln(1.9375)為另一初始值，故得x = 0.6614

笛卡兒符號法

- 方程式之正根個數≦f(x)之係數＋－號變化次數方程式之負根個數≦f(-x)之係數＋－號變化次數小於時，必以2之倍數遞減。
- 範例說明： $f(x) = 3X^5 - 2X^4 + X^3 - X^2 + 2X + 9$
- 笛卡兒符號規則可知
- f (x)之係數符號＋、－號變化為＋－ ＋ －＋＋ 4次
- f (-x)之係數符號＋、－號變化為－－ － － － ＋1次
- 故f (x)之正根個數≦4，負根個數≦1
- 是以 f (x)可能有4個或2個或0個正根及1個負根

布丹定理法

- 令f(x)最高次項為n，且f(x)的 n次微分存在，取兩個值U、L分別代入，f(x)及各f(x)微分項，紀錄代入值之在f(x)及各f(x)微分項的正負變化次數，分別記為 M_u及M_L，則f(x)在(U,L)有≦｜ $M_u - M_L$ ｜個根，小於時必以2倍數遞減。

布丹定理法舉例

範例說明：

已知方程式 $f(x)=3X^5-2X^4+X^3-X^2+2X+3$

則

$f(x)=3X^5-2X^4+X^3-X^2+2X+3$

$f'(x)=15X^4-8X^3+3X^2-2X+2$

$f''(x)=60X^3-24X^2+6X-2$

$F^{(3)}(x)=180X^2-48X+6$

$f^{(4)}(x)=360X-48$

$f^{(5)}(x)=360$

布丹定理法舉例

	$f(x)$	$f'(x)$	$f''(x)$	$f'''(x)$	$f^{(4)}(x)$	$f^{(5)}(x)$	M
U=1	+	+	+	+	+	+	0
L=0 U=0	+	+	—	+	—	+	4
L=-1	—	+	—	+	—	+	5

試以0為基準令U=1,L=0 U=0,L=－1, 分別代入可得下表，故可知f(x)在(0,1)有≦｜0－4｜=4個正根，可能有4個、2個或0個，

又f(x)在(－1,0)有≦｜4－5｜=1個負根，必有1個負根。

Question: 該方程式共有幾個根?是否要再考慮其他範圍?

勵志小品

- 一位台北市某市立高職校長的孩子教育經驗分享

括入根法

- 括入根法
  - 二分法
  - 假位法
  - 改良式假位法
- Preprocessing（預備工作）
  - 從已知的方程式f(x)找到兩個初始值a、b，ɜ (a＜b) 且 f(a)・f(b)＜0
- 執行下列方法

二分法

演算法

1.令$a_0=a$, $b_0=b$,i=1 ;　　(以i為計算次數)

2.計算$x_i=\frac{a_{i-1}+b_{i-1}}{2}$;

3.if(x_i滿足終止條件)，then x_i 為所求，stop

4.if($f(a_{i-1})f(x_i)<0$)，then $a_i=a_{i-1}$,$b_i=x$;

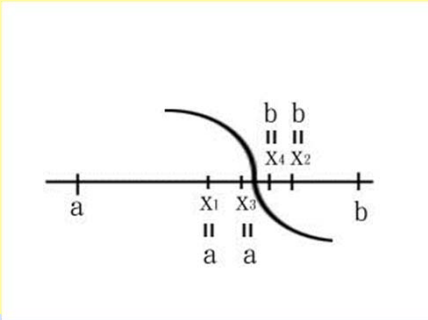
else $a_i=x_i$, $b_i=b_{i-1}$;

5.i=i+1，goto step2

終止條件為下列三件之一

- 1. $|f(x_i)|<\varepsilon$ (寫程式時使用)
- 2. $|x_i - x_{i-1}|<\varepsilon$ (寫程式時或用數值方法計算時使用)
- 3. $\left|\frac{x_i - x_{i-1}}{x_i}\right|<\varepsilon'$
- 其中ε及ε'均為極小值且ε'<<ε，例ε=10 ,ε'=10^{-7}

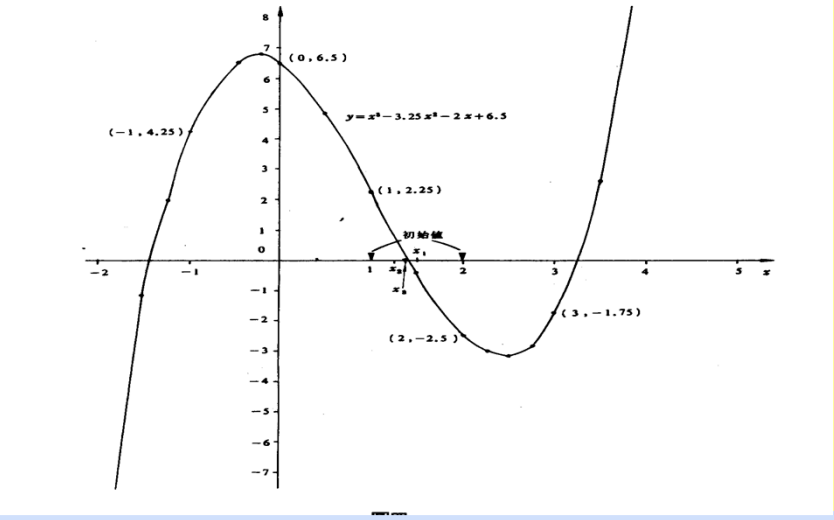
說明



計算範例

- 方程式$f(x) = x^3 - 3.25x^2 - 2x + 6.5 = 0$的最小正根
  - 首先以單圖法求出最小正根所在位置，並取初始值1, 2
  - 如圖例
  - 再令初始值 $a_0 = 1$，$b_0 = 2$代入二分法演算法，並以
  - $|X_{i+1} - X_i| < \varepsilon$為終止條件， $\varepsilon = 5 \times 10^{-5}$
  - 如附表

計算範例



計算範例

i	a_i	$f(a_i)$	b_i	$f(b_i)$	x_{i+1}	$f(x_{i+1})$	$\lvert x_{i+1} - x_i \rvert$
0	1.0000000	2.25	2.0000000	-2.5	1.5000000	-0.4375	
1	1.0000000	2.25	1.5000000	-0.4375	1.2500000	0.875	0.250000
2	1.2500000	0.875	1.5000000	-0.4375	1.3750000	0.205078125	0.125000
3	1.3750000	0.2050781	1.5000000	-0.4375	1.4375000	-0.12036133	0.062500
4	1.3750000	0.2050781	1.4375000	-0.120361328	1.4062500	0.041412354	0.031250
5	1.4062500	0.0414124	1.4375000	-0.120361328	1.4218750	-0.03972244	0.015625
6	1.4062500	0.0414124	1.4218750	-0.039722443	1.4140625	0.000784397	0.007813
7	1.4140625	0.0007844	1.4218750	-0.039722443	1.4179688	-0.01948434	0.003906
8	1.4140625	0.0007844	1.4179688	-0.0194846	1.4160157	-0.00935391	0.001953
9	1.4140625	0.0007844	1.4160157	-0.009354168	1.4150391	-0.00428583	0.000977
10	1.4140625	0.0007844	1.4150391	-0.004285835	1.4145508	-0.00175096	0.000488
11	1.4140625	0.0007844	1.4145508	-0.001750956	1.4143067	-0.00048334	0.000244
12	1.4140625	0.0007844	1.4143067	-0.000483598	1.4141846	0.000150385	0.000122
13	1.4141846	0.0001504	1.4143067	-0.000483598	1.4142457	-0.00016661	0.000061
14	1.4141846	0.0001504	1.4142457	-0.00016687	1.4142152	-8.2436E-06	0.000031
15	1.4141846	0.0001504	1.4142152	-8.50319E-06	1.4141999	7.09405E-05	0.000015

假位法演算法

1.令$a_0=a$, $b_0=b$,$i=1$;

2.計算$x_i = b_{i-1} - f(b_{i-1}) * \dfrac{b_{i-1} - a_{i-1}}{f(b_{i-1}) - f(a_{i-1})}$

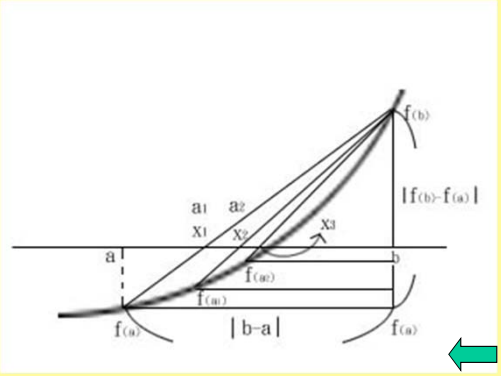
3.if(x_i滿足終止條件) then x_i 為所求 ，stop

4.if ($f(a_{i-1})f(x_i)<0$) ，then $a_i=a_{i-1}$,$b_i=x_i$;

else $a_i=x_i$, $b_i=b_{i-1}$;

5. .$i=i+1$，goto step2

假位法原理



三角形比例法

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

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

此為假位法原理

由第一個x落點後

單向逼近

計算範例

- 方程式$f(x) = x^3 - 3.25x^2 - 2x + 6.5 = 0$的最小正根
  - 首先以單圖法求出最小正根所在位置，並取初始值1, 2
  - 再令初始值 $a_0 = 1$，$b_0 = 2$代入假位法演算法，並以
  - $|X_{i+1} - X_i| < \varepsilon$為終止條件， $\varepsilon = 5 \times 10^{-5}$
  - 如附表

計算範例

i	a_i	$f(a_i)$	b_i	$f(b_i)$	x_{i+1}	$f(x_{i+1})$	$\lvert x_{i+1} - x_i \rvert$
0	1.0000000	2.25	2.0000000	-2.5	1.4736842	-0.30507363	
1	1.0000000	2.25	1.4736842	-0.305073573	1.4171267	-0.01511778	0.056557
2	1.0000000	2.25	1.4171267	-0.015117693	1.4143427	-0.00067073	0.002784
3	1.0000000	2.25	1.4143427	-0.000670516	1.4142193	-2.9583E-05	0.000123
4	1.0000000	2.25	1.4142193	-2.9792E-05	1.4142138	-1.3141E-06	0.000005
5	1.0000000	2.25	1.4142138	-1.23385E-06	1.4142136	-5.4422E-08	0.000000

改良式假位法演算法

1.令$a_0=a$,$b_0=b$,i=1 ,FA=$f(a_0)$,FB=$f(b_0)$,save=FA

2.計算$x_i=b_{i-1} - FB * \dfrac{b_{i-1} - a_{i-1}}{FB - FA}$, FX=$F(x_i)$

3.if(x_i 滿足終止條件) , then x_i為所求 stop

4.if($f(a_{i-1})$ · $f(x_i)<0$)

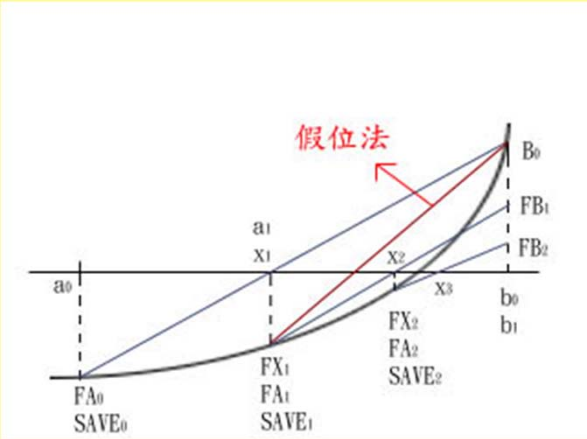
then $a_i=a_{i-1}$, $b_i=x_i$, FB=FX , if(save · FX>0)then FA= $\dfrac{FA}{2}$

else $a_i=x_i$, $b_i=b_{i-1}$, FA=FX, if(save · FX>0)then FB= $\dfrac{FB}{2}$

5.save=FX , i=i+1 , goto step 2

save的功能為紀錄前一個FX

改良式假位法之圖形



計算範例

- 方程式$f(x) = x^3 - 3.25x^2 - 2x + 6.5 = 0$的最小正根
  - 首先以單圖法求出最小正根所在位置，並取初始值1, 2
  - 再令初始值 $a_0 = 1$，$b_0 = 2$代入改良式假位法演算法，並以
  - $|X_{i+1} - X_i| < \varepsilon$為終止條件， $\varepsilon = 5 \times 10^{-5}$
  - 如附表

計算範例

i	a_i	FA	b_i	FB	x_{i+1}	$f(x_{i+1})$	$\lvert x_{i+1} - x_i \rvert$	$SAVE_i$
0	1.0000000	2.25	2.0000000	-2.5	1.4736842	-0.30507363		2.25
1	1.0000000	2.25	1.4736842	-0.305076	1.4171264	-0.01511595	0.056558	-0.3050736
2	1.0000000	1.125	1.4171264	-0.015116	1.4115960	0.01359837	0.005530	-0.015116
3	1.4115960	0.0135982	1.4171264	-0.015116	1.4142150	-7.5693E-06	0.002619	0.01359837
4	1.4115960	0.0135982	1.4142150	-7.57E-06	1.4142135	1.0077E-07	0.000001	1.0077E-07

練習一

- 求下列方程式的解
  - $f(X) = X^3+4X^2-10$，分別以二分法及假位法求最小正根
  - $f(X) = X^3-7X^2+14X-6$，分別以二分法及假位法求最小正根
  - $f(X) = X^4-2X^3-4X^2+4X+4$，以布丹定理求初始值並分別以假位法及改良式假位法求最大負根
  - 以上精確度求至10^{-5}
  - 參考解答

局部收斂法

- 局部收斂法
  - 正割法
  - 牛頓法
  - 定點法
- Preprocessing（預備工作）
  - 從已知的方程式f(x)找到兩個初始值a、b，或一個初始值a即可
- 執行下列方法

正割法

- 演算法

1.令$X_{-1}=a$, $X_0=b$, $i=1$

2.計算$X_i = X_{i-1} - f(x_{i-1}) * \dfrac{x_{i-1} - x_{i-2}}{f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}$

3. if(X_i滿足終止條件)

thenX_i為所求stop

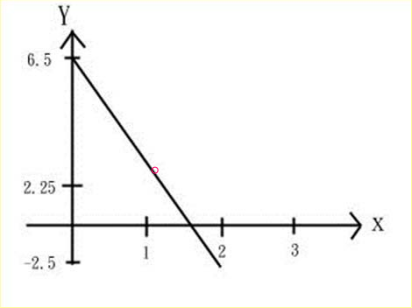
else if(i>MAX)

then發散stop

else i=i+1 goto step2

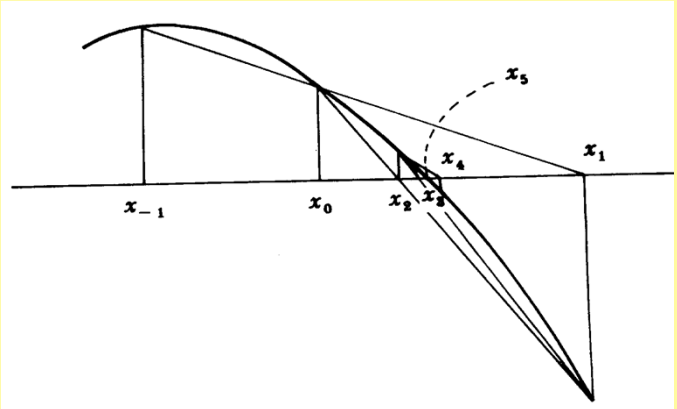
正割法

說明：方程式 $f(x) = x^3 - 3.25x^2 - 2x + 6.5 = 0$

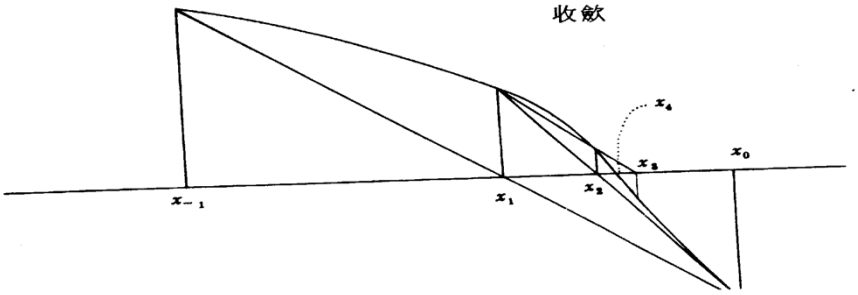


正割法

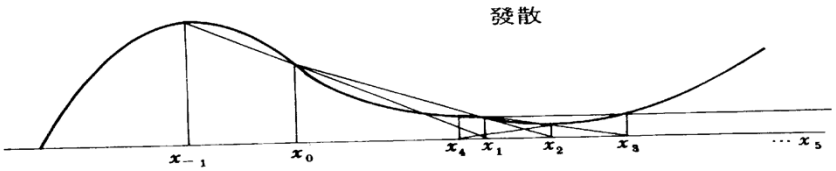
正割法的收斂與發散



圖九



圖七



圖八

計算範例

- 方程式$f(x) = x^3 - 3.25x^2 - 2x + 6.5 = 0$的最小正根
  - 首先以單圖法求出最小正根所在位置，括入根值1, 2
  - 但令初始值 a = 0，b = 1代入正割法演算法，故可知 $f(a)*f(b) > 0$，而非<0。仍以
  - $|X_{i+1} - X_i| < \varepsilon$為終止條件， $\varepsilon = 5 \times 10^{-5}$
  - 如附表

計算範例

i	x_{i-2}	$f(x_{i-2})$	x_{i-1}	$f(x_{i-1})$	x_i	$f(x_i)$	$\lvert x_i - x_{i-1}\rvert$
1	0.0000000	6.5	1.0000000	2.25	1.529411764706	-0.58345207	0.5294117647
2	1.0000000	2.25	1.5294118	-0.58345224	1.420397610130	-0.03207178	0.1090141899
3	1.5294118	-0.583452	1.4203976	-0.032071726	1.414056654853	0.000814749	0.0063409451
4	1.4203976	-0.032072	1.4140567	0.000814515	1.414213749161	-9.6988E-07	0.0001570492
5	1.4140567	0.0008145	1.4142137	-7.14612E-07	1.414213562377	-2.1425E-11	0.0000001376
6	1.4142137	-7.15E-07	1.4142136	-1.95373E-07	1.414213562373	0	0.0000000376

正割法中求根的計算式與牛頓法

- $X_i = X_{i-1} - f(x_{i-1}) * \dfrac{X_{i-1} - X_{i-2}}{f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}$
- 由平均值定理可知，若f(x)在$[x_{i-2}, x_{i-1}]$ 連續且可微分，則必存在X' 屬於(x_{i-2}, x_{i-1}) 使得$f'(x') = \dfrac{f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{X_{i-1} - X_{i-2}}$
- 故上式可寫成$X_i = X_{i-1} - \dfrac{f(x_{i-1})}{f'(x')}$
- 又因為解非線性方程式中，正割法若收斂，則$X_{i-2} \fallingdotseq X_{i-1}$，而X'屬於$(x_{i-2}, x_{i-1})$所以$X' \fallingdotseq \fallingdotseq X_{i-1}$ 故X'以X_{i-1}視之，則正割計算公式可改寫為 $X_i = X_{i-1} - \dfrac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}$
- 所以牛頓法非線性方程式之preprocessing,只需初始值a

牛頓法的演算

1.令$X_0=a$, $i=1$

2.計算$X_i=X_{i-1}-\dfrac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}$

3.if (X_i 滿足終止條件)

then X_i為所求 stop

else if(i>MAX)

then 發散 stop

else i=i+1 , goto step2

計算範例

- 方程式$f(x) = x^3 - 3.25x^2 - 2x + 6.5 = 0$的最小正根
  - 首先以單圖法求出最小正根所在位置，並取初始值1, 2
  - 分別令初始值 a = 1，與a = 2 分別代入牛頓法演算法，仍以
  - $|X_{i+1} - X_i| < \varepsilon$為終止條件， $\varepsilon = 5 \times 10^{-5}$
  - 如附表

計算範例

i	x_{i-1}	$f(x_{i-1})$	$f'(x_{i-1})$	x_i	$f(x_i)$	$\lvert x_i - x_{i-1}\rvert$
1	1.0000000	2.25	-5.5	1.4090909	0.026624718	0.409091
2	1.4090909	0.0266248	-5.202479	1.4142086	2.57297E-05	0.005118
3	1.4142086	2.577E-05	-5.192398	1.4142136	2.44444E-11	0.000005
4	1.4142136	-1.95E-07	-5.192388	1.4142136	0	0.000000

i	x_{i-1}	$f(x_{i-1})$	$f'(x_{i-1})$	x_i	$f(x_i)$	$\lvert x_i - x_{i-1}\rvert$
1	2.0000000	-2.5	-3	1.1666667	1.331018519	0.833333
2	1.1666667	1.3310183	-5.5	1.4086700	0.028814483	0.242003
3	1.4086700	0.0288147	-5.203301	1.4142078	3.0101E-05	0.005538
4	1.4142078	2.992E-05	-5.1924	1.4142136	3.29603E-11	0.000006
5	1.4142136	-1.95E-07	-5.192388	1.4142136	0	0.000000

定點法

- 對任何方程式而言，若存在一個 r ，使得f(r)=0
- 則稱 r 為 f(x) 之一根
- 若存在一個s，若使得f(s)=s
- 則稱 s 為 f(x) 之一定點
- 因此，欲求f(x)之一根，亦即計算為 f(x)=0之x值
- 今將等式f(x)=0改寫成x=g(x)，則找到g(x)之定點k，亦即 g(k) = k，則k必使得f(k)=0
- 即為f(x)之一根

定點法之演算法

- Processing
- 已知f(x)和一初始值a，且從f(x)=0找到一個g(x)使得x=g(x)
- 演算法流程

1.令x_0=a，i=1
2.計算$x_i=g(x_{i-1})$
3. if(x_i滿足終止條件)
  then x_i即為所求 STOP
  else if(i >MAX)
    then 發散 STOP
    else i=i+1 go to step2

定點法中的g(x)

- 對任意的f(x)=0都可以找到多個x=g(x)的等式，則不同的g(x)對定點法的運算是否有影響呢?
- Ans: 有

例 $f(x)=x^3 - 3.25x^2 - 2x + 6.5$

可以找到至少下列三種 g(x)

$x^3 - 3.25x^2 - 2x + 6.5=0$

1. $x=\dfrac{x^3 - 3.25x^2+6.5}{2} \quad =g_1(x)$

2. $x=\sqrt{\dfrac{x^3 - 2x + 6.5}{3.25}} \quad =g_2(x)$

3. $x=(3.25x^2 + 2x - 6.5)^{1/3} \quad =g_3(x)$

分析選擇何種g(x)對定點法之影響

令f(x)=0轉換成x=g(x)，假設已知s為g(x)之一定點，亦即s=g(s)且f(s)=0，又令x_n為定點法第n次計算之x，亦即$x_n=g(x_{n-1})$，則$x_n - s=g(x_{n-1}) - g(s)$ 必成立，

又 $x_n - s = \dfrac{g(x_{n-1}) - g(s)}{(x_{n-1} - s)}(x_{n-1} - s)$ 亦成立。

又由平均值定理可知必存在一個m_n屬於(x_{n-1}, s)或m_n屬於(s, x_{n-1})使得 $g'(m_n)= \dfrac{g(x_{n-1}) - g(s)}{(x_{n-1} - S)}$

故 $x_n - s= g'(m_n)(x_{n-1} - S)$

亦成立，同理 $x_{n-1} - s=g'(m_{n-1})(x_{n-2} - S)$ 亦成立，其中m_{n-1}屬於(x_{n-2}, s)或m_{n-1}屬於(s, x_{n-2})

分析選擇何種g(x)對定點法之影響

以此類推令 $M= \max_{\text{all } x} |g'(x)|$

則 $|x_n - S| \leqq M\,|x_{n-1} - S|$

$\leqq M\,\{M\,|x_{n-2} - S|\}$

$\leqq M^2\,\{M\,|x_{n-3} - S|\}$

$\leqq M^{n-2}\,\{M\,|x_1 - S|\}$

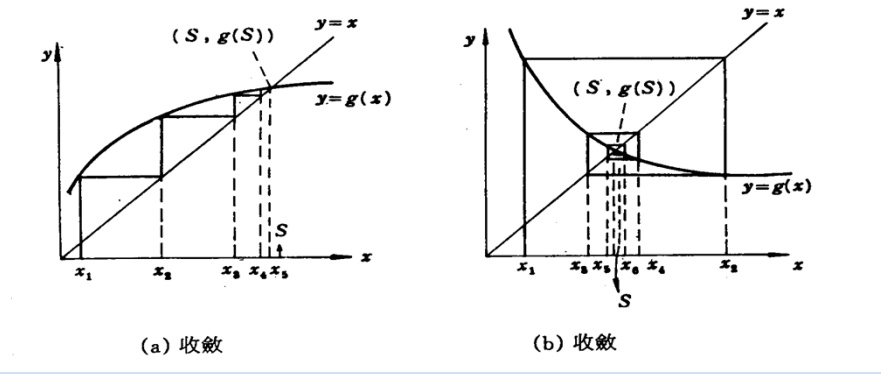
$x_n - S \leqq M^{n-1}\,|x_1 - S|$. 故當M<1時，(註M>0)

則當$n\to\infty$，$|x_n - S| \to 0$，亦即$x_n \to S$表示收斂.

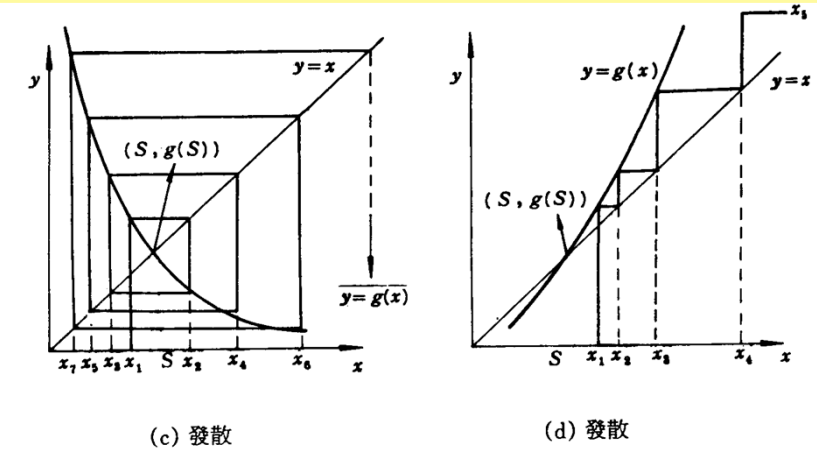
故 $|g'(x)|<1$是定點法收斂之充分條件.

分析選擇何種g(x)對定點法之影響

- 圖形說明:
  - 畫出 y=x 及 y = g(x) 兩曲線，則兩曲線之交點即為解
  - 圖例



分析選擇何種g(x)對定點法之影響



計算範例

- 方程式$f(x) = x^3 - 3.25x^2 - 2x + 6.5 = 0$的最小正根
- 分別以$g_1(x) = (x^3 - 3.25x^2 + 6.5)/2$ 與
- $g_3(x) = (3.25x^2 + 2x - 6.5)^{1/3}$ 計算，
- 初始值均以1代入

計算範例 $g_1(x) = (x^3 - 3.25x^2 + 6.5)/2$

i	x_i	f(x)	$g(x_i)$	$\lvert x_i - x_{i-1}\rvert$
1	1.0000000	2.25	2.125	
2	2.1250000	-2.830078125	0.709960938	1.125000
3	0.7099609	3.79978532	2.609853598	1.415039
4	2.6098536	-3.079959303	1.069873946	1.899893
5	1.0698739	1.864813855	2.002280874	1.539980
6	2.0022809	-2.506828304	0.748866722	0.932407
7	0.7488667	3.599627594	2.548680519	1.253414
8	2.5486805	-3.152972758	0.97219414	1.799814
9	0.9721941	2.40271744	2.17355286	1.576486
10	2.1735529	-2.932599428	0.707253146	1.201359
11	0.7072531	3.813593901	2.614050096	1.466300
12	2.6140501	-3.0737099	1.077195146	1.906797

計算範例 $g_1(x) = (x^3 - 3.25x^2 + 6.5)/2$

13	1.0771951	1.824396937	1.989393615	1.536855
14	1.9893936	-2.467872676	0.755457277	0.912198
15	0.7554573	3.565410756	2.538162655	1.233936
16	2.5381627	-3.162173443	0.957075934	1.782705
17	0.9570759	2.485542658	2.199847263	1.581087
18	2.1998473	-2.98172805	0.708983238	1.242771
19	0.7089832	3.804773073	2.611369774	1.490864
20	2.6113698	-3.077720056	1.072509746	1.902387
21	1.0725097	1.850263213	1.997641353	1.538860
22	1.9976414	-2.492908773	0.751186966	0.925132
23	0.7511870	3.587591207	2.544982569	1.246454

來回震盪、誤差無縮小的趨勢，發散

計算範例 $g_3(x) = (3.25x^2 + 2x - 6.5)^{1/3}$

i	x_i	f(x)	$g(x_i)$	$\lvert x_i - x_{i-1}\rvert$
1	1.0000000	2.25	1.619805901	
2	1.6198059	-1.016868059	1.305057957	0.619806
3	1.3050580	0.577304982	1.471679153	0.314748
4	1.4716792	-0.294915892	1.383556327	0.166621
5	1.3835563	0.160088401	1.430487886	0.088123
6	1.4304789	-0.084188823	1.405550904	0.046923
7	1.4055509	0.045053724	1.418819943	0.024928
8	1.4188199	-0.023896956	1.411761949	0.013269
9	1.4117619	0.01273568	1.415517768	0.007058
10	1.4155178	-0.006770251	1.413519582	0.003756

計算範例 $g_3(x) = (3.25x^2 + 2x - 6.5)^{1/3}$

11	1.4135196	0.003603893	1.414582788	0.001998
12	1.4145828	-0.001917027	1.414017106	0.001063
13	1.4140111	0.001051512	1.414321305	0.000572
14	1.4143213	-0.00055943	1.414156236	0.000310
15	1.4141562	0.000297664	1.414244064	0.000165
16	1.4142406	-0.000140597	1.414199155	0.000084
17	1.4141992	7.48089E-05	1.414221228	0.000041
18	1.4142212	-3.98029E-05	1.414209484	0.000022
19	1.4142095	2.11765E-05	1.414215732	0.000012
20	1.4142157	-1.12655E-05	1.414212408	0.000006

收斂

練習二

- 求下列方程式的解
  - $f(X) = X^4-2X^3-4X^2+4X+4$，以正割法及牛頓法求最大負根
  - $f(x) = X^3-2X^2-5$ ，以正割法求最小正根
  - $f(x) = 2X\cos 2X - (X-2)^2$ ，以牛頓法求最小的二個正根
  - $f(x) = e^X - 3X^2$ ，以定點法求最小正根
  - 以$|X_{i+1} - X_i| < \varepsilon$為終止條件， $\varepsilon = 10^{-5}$

多項式的根

- 當方程式型式為

  $f(x) = a_n x^n + \ldots + a_1 x^1 + a_0$ 時 ------(1)

  - 可採用牛頓法 $X_i = X_{i-1} - f(X_{i-1})/f'(X_{i-1})$反覆計算
  - 然而，一連串的反覆計算$f(X_i)$ 與 $f'(X_i)$ 相當繁瑣
  - 因此另找出計算函數值$f(X)$的方法**Horner's Method**
  - 又稱為**Nested Multiplication**，其形式如下

  $f(X_1) = a_0 + x_1(a_1+x_1(a_2+\ldots+x_1(a_{n-1} +x_1(a_n))\ldots))$

多項式的根

- **Horner's Method**的推導

  - 假設X_1為初始值，則

  $f(x)/(x-X_1) = (n-1)$次多項式 + 餘式

  $= b_n X^{n-1} +\ldots+ b_2 x + b_1 + b_0/(x-X_1)$

  故

  $f(x) = (x-X_1)(b_n X^{n-1} +\ldots+ b_2 x + b_1) + b_0$ ---------- (2)

  當 $x = X_1$時，$f(X_1) = b_0$

  比較$f(x)$在式(1)與式(2)展開後之各項係數可發現

多項式的根

- **Horner's Method**的推導

X_n 項 $a_n = b_n$

X_{n-1}項 $a_{n-1} = b_{n-1} - x_1 b_n$

. .

. .

. .

X_{j-1}項 $a_{j-1} = b_{j-1} - x_1 b_j$, $j = n, n-1, \ldots, 1$

. .

. .

. .

X_0項 $a_0 = b_0 - x_1 b_1$

多項式的根

- 為求bj，可以解前述之各等式，得

$b_n = a_n$

$b_{n-1} = a_{n-1} + x_1 b_n$

. .

. .

. .

$b_{j-1} = a_{j-1} + x_1 b_j$, $j = n, n-1, \ldots, 1$

. .

. .

. .

$b_0 = a_0 + x_1 b_1$

故得方程式$f(x)$之**Nested Multiplication**形式如下

$f(X_1) = a_0 + x_1(a_1 + x_1(a_2 + \ldots + x_1(a_{n-1} + x_1(a_n))\ldots))$

多項式的根

- 再進一步地求一次微分$f'(x)$
  - 由前述第(2)式
  - $f(x) = (x-X_1)(b_nX^{n-1} +\ldots+ b_2x + b_1) + b_0$ ---------- (2)
  - 可改寫為 $f(x) = (x-X_1)g(x) + b_0$ ，則對$f(x)$一次微分得f
  - $f'(x) = (x-X_1)g'(x) + g(x)$ (g(x)微分 + $(x - X_1)$微分)
  - 當$x = X_1$時，
  - $f'(X_1) = g(X_1)$ ，而$g(x) = b_nX^{n-1} +\ldots+ b_2x + b_1$
  - 再利用**Horner's Method**
  - $g(x) = (x-X_1)(c_nX^{n-2} +\ldots+ c_3x + c_2) + c_1$
  - 則 $g(X_1) = c_1$

多項式的根

- 故由Horner's method可得

$$c_n = b_n$$
$$c_{n-1} = b_{n-1} + x_1c_n$$
$$\vdots$$
$$c_{j-1} = b_{j-1} + x_1c_j,\ j = n, n-1, \ldots, 2$$
$$\vdots$$
$$c_1 = b_1 + x_1c_2$$

  - 故得 $f'(X_1) = g(X_1) = c_1$

多項式的根

- 故由Horner's method可得

$c_n = b_n$

$c_{n-1} = b_{n-1} + x_1 c_n$

. .

. .

. .

$c_{j-1} = b_{j-1} + x_1 c_j,\ j = n, n-1, \ldots, 2$

. .

. .

. .

$c_1 = b_1 + x_1 c_2$

  - 故得 $f'(X_1) = g(X_1) = c_1$

多項式的根

- 因此，牛頓法中的
  $X_{i+1} = X_i - f(X_i)/f'(X_i)$，對任意的$i$值，當$x = x_i$時，$f(x_i)$與$f'(x_i)$分別以$b_0$與$c_1$代入可得
  $X_{i+1} = X_i - b_0/c_1$，$i = 1, 2, 3, \ldots.$
- 其中b_0與c_1可用下列公式推導
  - $c_n = b_n = a_n$
  - $b_j = a_j + x_i b_{j+1}$，$j = n-1, \ldots, 0$
  - $c_j = b_j + x_i c_{k+1}$，$k = n-1, \ldots 1$
  - $i = 1, 2, 3, \ldots.$
- 上述三式稱為**Birge-Vieta Method**

Birge-Vieta Method應用範例

- 已知方程式為多項式$f(x) = x^4 - 5x^3 + 3x^2 - 42x - 96$
- 且已知 $f(-2)*f(-1) < 0$，故取X1 = -1，以Birge-Vieta Method求方程式$f(x)$之一根，終止條件為 $|X_{i+1} - X_i| < \varepsilon$為終止條件， $\varepsilon = 5 \times 10^{-5}$
- Ans:
  - 方程式最高次項為4，故需計算b_4～b_0，c_4～c_1
  - 計算結果如下表所示

TAMKANG UNIVERSITY SOFTWARE ENGINEERING GROUP
淡江軟體工程實驗室 http://www.tkse.tku.edu.tw

Birge-Vieta Method應用範例

由方程式已知 a4=1，a3= -5 ，a2= 3 ，a1= -42 ，a0= -96
計算公式
c4 = b4 = a4
b3 = a3 + Xi*b4 c3 = b3 + Xi*c4
b2 = a2 + Xi*b3 c2 = b2 + Xi*c3
b1 = a1 + Xi*b2 c1 = b1 + Xi*c2
b0 = a0 + Xi*b1 i = 1, 2, 3, …

I	Xi	b4	b3	b2	b1	b0	c4	c3	c2	c1	Xi+1	|Xi+1 - Xi|
1	-1	1	-6	9	-51	-45	1	-7	16	-67	-1.6716417910	0.67164
2	-1.671641791	1	-6.672	14.153	-65.658	13.7568	1	-8.343	28.1	-112.63	-1.5495010426	0.12214
3	-1.549501043	1	-6.55	13.148	-62.374	0.64788	1	-8.099	25.698	-102.19	-1.5431612240	0.00634
4	-1.543161224	1	-6.543	13.097	-62.211	0.00163	1	-8.086	25.576	-101.68	-1.5431451838	1.60E-05
5	-1.543145184	1	-6.543	13.097	-62.211	2.80E-08	1	-8.086	25.575	-101.68	-1.5431451837	2.76E-10

解線性聯立方程式

- 線性聯立方程式:
  - n個一次式方程式,n個未知數,求聯立解,亦即共同解.
- 傳統解法:
  - 線性代數之(1)高斯消去法
  - (2)高斯消去法之矩陣形式
  - (3)高斯喬登法
  - (4)LU分解法
- 數值方法: (反覆代入計算)
  - Jacobi法
  - Gauss-Siedel法

TAMKANG UNIVERSITY SOFTWARE ENGINEERING GROUP
淡江軟體工程實驗室 http://www.tkse.tku.edu.tw

高斯消去法

- (以n=3為例)

$A_{11}X_1+A_{12}X_2+A_{13}X_3=b_1$ -----(1)

$A_{21}X_1+A_{22}X_2+A_{23}X_3=b_2$ -----(2)

$A_{31}X_1+A_{32}X_2+A_{33}X_3=b_3$ -----(3)

- 令$M_{21}=A_{21}/A_{11}$, 式(2)'=式(2)-式(1)*M_{21}
- 得$A_{22}'X_2+A_{23}'X_3=b_2'$ -----(2)'，其中$A_{22}'=A_{22}-A_{12}*M_{21}$，$A_{23}'$, b_2'同理
- 令$M_{31}=A_{31}/A_{11}$, 式(3)'=式(3)-式(1)*M_{31}
- 得$A_{32}'X_2+A_{33}'X_3=b_3'$ -----(3)' ，其中$A_{32}'=A_{32}-A_{12}*M_{31}$，$A_{33}'$, b_3'同理
- 令$M_{32}=A_{32}'/A_{22}'$, 式(3)"=式(3)'-式(2)'*M_{32}
- 得$A_{33}''X_3=b_3''$ -----(3)" ，其中$A_{33}''=A_{33}'-A_{23}'*M_{32}$，$b_3''$同理
- 故可得X_3, 再代回(2)'或(3)'可得X_2
- 再代回(1), (2)或(3)可得X_1

高斯消去法之矩陣型式

以n=3為例

$a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3=b_1$
$a_{21}x_1+a_{22}x_2+a_{23}x_3=b_2$
$a_{31}x_1+a_{32}x_2+a_{33}x_3=b_3$

轉換成 擴充矩陣 →

$$\left(\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & b_3 \end{array}\right) \times m_{21} \quad \times m_{31}$$

得

$$\left(\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & b'_2 \\ 0 & a'_{32} & a'_{33} & b'_3 \end{array}\right) \times m_{32}$$

得

$$\left(\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & b'_2 \\ 0 & 0 & a''_{33} & b''_3 \end{array}\right)$$

得X_1 得X_2 得X_3

高斯喬登法

將聯立方程式之係數矩陣化減為單位矩陣，則擴充矩陣之常數項即為所求。

$$\left(\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_2 \\ a_{11} & a_{32} & a_{33} & b_3 \end{array}\right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & b'_2 \\ 0 & 0 & a''_{33} & b''_3 \end{array}\right)$$

得上三角矩陣

$$\left(\begin{array}{ccc|c} a''_{11} & 0 & 0 & b''_1 \\ 0 & a''_{22} & 0 & b''_2 \\ 0 & 0 & a''_{33} & b''_3 \end{array}\right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & b''_1/a''_{11} \\ 0 & 1 & 0 & b''_2/a''_{22} \\ 0 & 0 & 1 & b''_3/a''_{33} \end{array}\right)$$

得對角線矩陣 所求

處理線性聯立方程式求解之前置作業

if (各方程式之間相對應位置之係數range差距過大，
例如相差100倍)

then (進行尺度調整，即對每一個方程式 i，$1 \leq i \leq n$
取 $S_i = MAX_{i=1}^{n} |a_{ij}|$，並以 S_i 除第i個方程式之
各係數及常數項)

if (方程式組之係數矩陣中 a_{ii} 不是 $MAX_{j=i}^{n} |a_{ji}|$ 者，$1 \leq i \leq n-1$)

then (進行樞軸選擇，即進行列對調，至 a_{ii} 為 $MAX_{j=i}^{n} |a_{ji}|$ 者
$1 \leq i \leq n-1$)

樞軸選擇範例

- 聯立方程式如下

$$13X_1 - 6X_2 + 4X_3 = -3$$
$$-X_1 + 0.46X_2 + 6X_3 = -6.08$$
$$3X_1 + 4X_2 + X_3 = 10$$

- 經高斯消去法計算結果為

$X_1 = 0.769$
$X_2 = 1.5$
$X_3 = -1.000$

- 正確解為

$X_1 = 1$
$X_2 = 2$
$X_3 = -1$

- 造成誤差原因
  - 計算 m_{32} 時，因為 $|a_{22}| < |a_{32}|$，因此 m_{32} 很大
  - 經浮點運算後，大於1的 m_{32} 參與運算，造成誤差擴大

樞軸選擇範例

- 正確做法，將方程式列對調為

  $13X_1 - 6X_2 + 4X_3 = -3$

  $3X_1 + 4X_2 + X_3 = 10$

  $-X_1 + 0.46X_2 + 6X_3 = -6.08$
- 經高斯消去法計算結果，且小數點以下取三位後可得

  $X_1 = 1.000$

  $X_2 = 2.000$

  $X_3 = -1.000$
- 明顯精確許多
- 此列對調動作即為樞軸選擇，使之
  - $a_{11} \geq a_{21}$、a_{31}
  - $a_{22} \geq a_{32}$
  - $13 \geq 3$、1
  - $4 \geq 0.46$

尺度調整範例

- 聯立方程式如下

  $130000X_1 - 60000X_2 + 40000X_3 = -30000$

  $-10000X_1 + 4600X_2 + 60000X_3 = -60800$

  $3X_1 + 4X_2 + X_3 = 10$
- 係數滿足$a_{ii} \geq |a_{ji}|_{j=i}^{n}$，經高斯消去法計算結果為

  $X_1 = 0.769$

  $X_2 = 1.5$

  $X_3 = -1.000$
- 原因是本聯立方程式與前例只差別在第一式與第二式的係數放大10000倍，而第三是維持不變

尺度調整範例

- 因此正確的做法要先找出每一方程式之S_i

$130000X_1 - 60000X_2 + 40000X_3 = -30000$ $S_1 = 130000$

$-10000X_1 + 4600X_2 + 60000X_3 = -60800$ $S_2 = 60000$

$3X_1 + 4X_2 + X_3 = 10$ $S_3 = 4$

- 各方程式除以其S_i後得

$X_1 - 0.4615X_2 + 0.3077X_3 = -0.2308$

$-0.1667X_1 + 0.077X_2 + X_3 = -1.013$

$0.75X_1 + X_2 + 0.25X_3 = 2.5$

- 由此在判別樞軸選擇可得

$X_1 - 0.4615X_2 + 0.3077X_3 = -0.2308$

$0.75X_1 + X_2 + 0.25X_3 = 2.5$

$-0.1667X_1 + 0.077X_2 + X_3 = -1.013$

尺度調整範例

- 再經高斯消去法計算結果，且小數點以下取三位後可得

$X_1 = 1.000$

$X_2 = 2.000$

$X_3 = -1.000$

數值方法解線性聯立方程式

對於一組n個未知數n個一次式的聯立方程式

1.令初始值$X_1^0=X_2^0=X_3^0\ldots\ldots=X_n^0=0$; i=1

2.代入計算公式求每一個X_j^i, $1 \leqq j \leqq n$

3.if each $|X_j^i-X_j^{i-1}|< \varepsilon$ then 得唯一解, stop.

else if i>MAX then 發散.

else i=i+1, goto step2.

數值方法解聯立方程式之計算公式

計算公式有二: (以n=3為例)

- Jacobi 法公式:

$$X_1^{(k+1)} = (b_1 - a_{12}X_2^{(k)} - a_{13}X_3^{(k)})/a_{11}$$
$$X_2^{(k+1)} = (b_2 - a_{21}X_1^{(k)} - a_{23}X_3^{(k)})/a_{22}$$
$$X_3^{(k+1)} = (b_3 - a_{31}X_1^{(k)} - a_{32}X_2^{(k)})/a_{33}$$

- 故推演為一般式如下
  - $X_i^{(k+1)} = b_i/a_{ii} - \Sigma^n_{j=1\&j\neq i} (a_{ij}/a_{ii})X_j^{(k)}$
  - 其中 i = 1, 2, …n 且 k = 0, 1, 2, 3, …

數值方法解聯立方程式之計算公式

計算公式有二: (以n=3為例)

- Gauss-Siedel 法公式:

$X_1^{(k+1)} = (b_1 - a_{12}X_2^{(k)} - a_{13}X_3^{(k)})/a_{11}$

$X_2^{(k+1)} = (b_2 - a_{21}X_1^{(k+1)} - a_{23}X_3^{(k)})/a_{22}$

$X_3^{(k+1)} = (b_3 - a_{31}X_1^{(k+1)} - a_{32}X_2^{(k+1)})/a_{33}$

- 故推演為一般式如下
  - $X_i^{(k+1)} = b_i/a_{ii} - \Sigma^{i-1}_{j=1} (a_{ij}/a_{ii})X_j^{(k+1)} - \Sigma^{n}_{j=i+1} (a_{ij}/a_{ii})X_j^{(k)}$
  - 其中 $i = 1, 2, \ldots n$ 且 $k = 0, 1, 2, 3, \ldots$

數值方法解聯立方程式應用範例

- 以反覆代入法解下列聯立方程式之共同解

$-3x_1 + 7x_2 - x_3 = 1$ ---------(1)

$2x_1 - 5x_2 - 9x_3 = -5$ ---------(2)

$7x_1 + x_2 + x_3 = 9$ ---------(3)

- 首先進行樞軸選擇之列對調得

$7x_1 + x_2 + x_3 = 9$ ---------(1)

$-3x_1 + 7x_2 - x_3 = 1$ ---------(2)

$2x_1 - 5x_2 - 9x_3 = -5$ ---------(3)

- 再移項呈反覆代入計算形式

數值方法解聯立方程式應用範例

$x_1 = 1/7(9 - x_2 - x_3)$ --------(1)

$x_2 = 1/7(1 + 3x_1 + x_3)$ --------(2)

$x_3 = -1/9(-5 - 2x_1 + 5x_2)$ ---------(3)

- 初始值以 $x_1 = x_2 = x_3 = 0$ 分別代入

Jacobi法 與

Gauss-Siedel法

- 終止條件為 $|X_j^i - X_j^{i-1}| < 10^{-5}$，$i = 1, 2, \ldots, j = 1, 2, 3$
- 計算結果分別為

數值方法解聯立方程式應用範例 Jacobi法

I	X1	X2	X3	$\lvert X_1^i - X_1^{i-1}\rvert$	$\lvert X_2^i - X_2^{i-1}\rvert$	$\lvert X_3^i - X_3^{i-1}\rvert$
0	0	0	0			
1	1.285714	0.142857	0.555556	1.285714	0.142857	0.555556
2	1.185941	0.773243	0.761905	0.099773	0.630385	0.206349
3	1.066408	0.759961	0.389519	0.119534	0.013282	0.372386
4	1.121503	0.655534	0.370334	0.055095	0.104427	0.019184
5	1.139162	0.676406	0.440593	0.017659	0.020872	0.070258
6	1.126143	0.694011	0.432921	0.013019	0.017605	0.007671
7	1.124724	0.687336	0.420248	0.001419	0.006675	0.012674
8	1.127488	0.684917	0.423641	0.002764	0.002419	0.003393
9	1.127349	0.686586	0.425599	0.000139	0.001669	0.001958
10	1.126831	0.686806	0.424641	0.000518	0.00022	0.000958
11	1.126936	0.686448	0.424403	0.000105	0.000359	0.000237
12	1.127021	0.686459	0.424626	8.52E-05	1.13E-05	0.000223
13	1.126988	0.686527	0.424639	3.35E-05	6.84E-05	1.27E-05
14	1.126976	0.686515	0.424593	1.16E-05	1.25E-05	4.54E-05
15	1.126985	0.686503	0.424598	8.28E-06	1.14E-05	4.39E-06
16	1.126986	0.686507	0.424606	1.01E-06	4.17E-06	8.2E-06
17	1.126984	0.686509	0.424604	1.77E-06	1.6E-06	2.09E-06
18	1.126984	0.686508	0.424603	7.02E-08	1.06E-06	1.28E-06

數值方法解聯立方程式應用範例
Gauss-Siedel法

I	X1	X2	X3	$\lvert X_1^i-X_1^{i-1}\rvert$	$\lvert X_2^i-X_2^{i-1}\rvert$	$\lvert X_3^i-X_3^{i-1}\rvert$
0	0	0	0			
1	1.285714	0.693878	0.455782	1.285714	0.693878	0.455782
2	1.121477	0.688602	0.422216	0.164237	0.005276	0.033566
3	1.127026	0.686185	0.424792	0.005549	0.002417	0.002576
4	1.127003	0.686543	0.424588	2.27E-05	0.000358	0.000204
5	1.126981	0.686505	0.424604	2.2E-05	3.86E-05	1.65E-05
6	1.126984	0.686508	0.424603	3.15E-06	3.71E-06	1.36E-06
7	1.126984	0.686508	0.424603	3.36E-07	3.39E-07	1.14E-07
8	1.126984	0.686508	0.424603	3.22E-08	3E-08	9.52E-09
9	1.126984	0.686508	0.424603	2.93E-09	2.61E-09	8.02E-10

反覆代入法解線性聯立方程式

■收斂之充分條件

推導: 以n=2，Gauss-Siedel法計算為例:

$a_{11}X_1+a_{12}X_2=b_1$ -----(1)

$a_{21}X_1+a_{22}X_2=b_2$ -----(2)

假設已知聯立解為X_1',X_2'

亦即$a_{11}X_1'+a_{12}X_2'=b_1$

$a_{21}X_1'+a_{22}X_2'=b_2$

→等式成立

故$X_1'=1/a_{11}(b_1-a_{12}X_2')$ -----(3)

$X_2'=1/a_{22}(b_2-a_{21}X_1')$ -----(4)

→等式成立

反覆代入法解線性聯立方程式

又以Gauss-Siedel法而言,第i次計算結果為

$X_1^{(i)}=1/a_{11}(b_1-a_{12}X_2^{(i-1)})$ -----(5)

$X_2^{(i)}=1/a_{22}(b_2-a_{21}X_1^{(i)})$ -----(6)

故可知第i次計算之誤差

$e_{X1}^{(i)}=|X_1'-X_1^{(i)}|$ -----(7)

$e_{X2}^{(i)}=|X_2'-X_2^{(i)}|$ -----(8)

式(3)與(5)代入式(7)

式(4)與(6)代入式(8)

得:

$e_{X1}^{(i)}=|1/a_{11}[(b_1-a_{12}X_2')-(b_1-a_{12}X_2^{(i-1)})]|$

$e_{X2}^{(i)}=|1/a_{22}[(b_2-a_{21}X_1')-(b_2-a_{21}X_1^{(i)})]|$

TAMKANG UNIVERSITY SOFTWARE ENGINEERING GROUP
淡江軟體工程實驗室 http://www.tkse.tku.edu.tw

反覆代入法解線性聯立方程式

得:

$e_{X1}^{(i)}=|a_{12}/a_{11}(X_2'-X_2^{(i-1)})|$ -----(9)

$e_{X2}^{(i)}=|a_{21}/a_{22}(X_1'-X_1^{(i)})|$ -----(10)

其中式(10)之$|(X_1'-X_1^{(i)})|$即為$e_{X1}^{(i)}$

故式(9)可代入式(10)得

$e_{X2}^{(i)}=|a_{21}/a_{22}\cdot a_{12}/a_{11}(X_2'-X_2^{(i-1)})|$ -----(11)

其中$|(X_2'-X_2^{(i-1)})|$相對表示Gauss-Siedel在第i-1次計算時X_2之誤差,故同理可推

$e_{X2}^{(i-1)}=|X_2'-X_2^{(i-1)}|=|a_{21}/a_{22}\cdot a_{12}/a_{11}(X_2'-X_2^{(i-2)})|$ -----(12)

式(12)代入式(11)可得$e_{X2}^{(i)}=|(a_{12}a_{21}/a_{11}a_{22})^{(2)}\cdot(X_2'-X_2^{(i-2)})|$

依此類推可得$e_{X2}^{(i)}=|(a_{12}a_{21}/a_{11}a_{22})^{(i)}\cdot(X_2'-X_2^{(0)})|$

反覆代入法解線性聯立方程式

即$e_{X_2}^{(i)}=|(a_{12}a_{21}/a_{11}a_{22})^{(i)}\cdot(X_2'-X_2^{(0)})|$

$=|(a_{12}a_{21}/a_{11}a_{22})^{(i)}\cdot e_{X_2}^{(0)}|$

同理$e_{X_1}^{(i)}=|(a_{12}a_{21}/a_{11}a_{22})^{(i)}\cdot e_{X_1}^{(0)}|$

其中$e_{X_1}^{(i)}$及$e_{X_2}^{(i)}$表示X_1, X_2在第i次計算之誤差,

而$e_{X_1}^{(0)}$即$e_{X_2}^{(0)}$表X_1, X_2在第0次(亦即初始值)之誤差,

其中若$|a_{12}a_{21}/a_{11}a_{22}|>1$,表示$e_{X_1}^{(i)}>e_{X_1}^{(0)}$且$e_{X_2}^{(i)}>e_{X_2}^{(0)}$,
表示反覆代入法“發散”.

$|a_{12}a_{21}/a_{11}a_{22}|=1$,表示$e_{X_1}^{(i)}=e_{X_1}^{(0)}$且$e_{X_2}^{(i)}=e_{X_2}^{(0)}$,
表示反覆代入法“發散”.

$|a_{12}a_{21}/a_{11}a_{22}|<1$,表示$e_{X_1}^{(i)}<<e_{X_1}^{(0)}$, $e_{X_2}^{(i)}<<e_{X_2}^{(0)}$,且$i\rightarrow\infty$
$e_{X_1}^{(i)}\fallingdotseq e_{X_2}^{(i)}\fallingdotseq 0$, 故表示反覆代入法“收斂”.

反覆代入法解線性聯立方程式

收斂之充分條件

推展至 n 個未知數

$$\left|\frac{a_{12}a_{13}\ldots\ldots a_{1n}a_{21}a_{22}\ldots a_{2n}\ldots a_{n1}a_{n2}\ldots a_{nn-1}}{a_{11}a_{22}\ldots\ldots a_{nn}}\right| < 1$$ 或記為

$$\left|\frac{\prod_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{n} a_{ij}}{\prod_{i=1}^{n} a_{ii}}\right| < 1$$

稱為對角優勢,是反覆代入法解線性聯立方程式的充分條件.

反覆代入法與消去法之比較

1.消去法對所有的非奇異矩陣均可解.
反覆代入法對部分的非奇異矩陣仍會發散.
2.消去法在計算過程中,將方程式的係數愈算愈複雜.
反覆代入法的計算過程中,係數始終如一.
3.消去法在每一次的消去過程都可能產生約略誤差.
反覆代入法的約略誤差取決於終止條件之 ,與計算過程無關.
4.消去法的計算過程需要較多的簿記,亦即程式中需要較多的記憶空間.
反覆代入法則不需要.
5.消去法的Time Complexity是$0(n^3)$
反覆代入法的Time Complexity為$0(n^2)$
6.消去法只能應用於解線性聯立方程式.
反覆代入法則可應用於解非線性聯立方程式.

內插法

- 內插法之應用
  - 方程式未知或已知但方程式結構複雜難以計算
  - 但已知一組已知點及對應函數值，推導其他未知數的可能之函數值
  - 常用於科學實驗,統計分析等
  - Ex:
    - $e^{0.3}=1.34986$
    - $e^{0.4}=1.49182$
    - $e^{0.5}=1.64872$
    - $e^{0.6}=1.82212$
  - 欲求$e^{0.432}$=?　　令X=0.432，a=0.4，b=0.5
  - 取$e^{0.4}$及$e^{0.5}$以 △ 比例法求

內插法

$$\frac{0.5 - X}{0.5-0.4} = \frac{1.64872 - f(X)}{1.64872-1.49182}$$

- 如此可表示出e的一次式f(x)=1.64872-[(1.64872-1.49782)*(0.5-X)]/0.1
- X以0.432代入即是
- 若以$e^{0.4}$,$e^{0.5}$,$e^{0.6}$則可令聯立線性方程式

  $AX_1^2+BX_1+C=f(X_1)$

  $AX_2^2+BX_2+C=f(X_2)$

  $AX_3^2+BX_3+C=f(X_3)$

內插法

- 其中X_1=0.4，X_2=0.5 ， X_3=0.6及對應之函數值為
  - $f(X_1)=e^{0.4}=1.49182$
  - $f(X_2)=e^{0.5}=1.64872$
  - $f(X_3)=e^{0.6}=1.82212$代入
- 可解聯立方程式A、B、C的值.再以$f(X)=AX^2+BX+C$為e^X的二次式，將X=0.432代入可得所求
- 因此,由已知點中取2點，以 △ 比例法推出之一次式稱為f(X)之 “內插一次式”
- 由已知點取3點，以解聯立方程式法推出的二次式稱為f(X)之 “內插二次式”

內插法

- 內插法的問題解題步驟：
  - 有哪些已知點及其函數值
  - 用其中的哪K個點推導出一個“內插(K-1)次式”
  - 將欲求的值代入
  - 推算誤差
- 由前面說明可知：
  - 用2個點,可以△比例法推算內插一次式
  - 用3個點,可以線性聯立方程式推算一個內插二次式
  - 用4個以上的點,可以???法推算內插3, 4, 5,……次式等

內插法

- 方法一：窮舉法
  - 步驟：解線性聯立方程式的方法持續使用.
- EX:
  - $AX_1^3+BX_1^2+CX_1+D=f(X_1)$
  - $AX_2^3+BX_2^2+CX_2+D=f(X_2)$
  - $AX_3^3+BX_3^2+CX_3+D=f(X_3)$
  - $AX_4^3+BX_4^2+CX_4+D=f(X_4)$
  - 其中 X_1、X_2、X_3、X_4、 $f(X_1)$、 $f(X_2)$、$f(X_3)$、$f(X_4)$為已知
  - 以聯立方程式解A、B、C、D得一內插三次式

內插法

- 內插多項式的定理
  - 已知$X_0,X_1,X_2,\ldots,X_n$等n+1各點及其對應函數值$Y_0,Y_1,Y_2,\ldots,Y_n$,找到一多項式$P_n(X)$,且$P_n(X)$滿足下列條件:
    - (1)Pn(X)最大次方<=n
    - (2)對於所有的i ,使得$P_n(X_i)=f(X_i)=Y_i$
    - (3)對相同的點$(X_0,X_1,X_2,\ldots,X_n)$而言,$P_n(X)$唯一.
  - 則稱$P_n(X)$為$f(X)$內插於點$(X_0,X_1,X_2,\ldots,X_n)$之內插多項式
- 由內插多項式定理導出下列方法

Lagrangian法

- 利用Pn要滿足定理之條件(1)及(2)，對於已知點$(X_0,Y_0),(X_1,Y_1),(X_2,Y_2),\ldots\ldots,(X_n,Y_n)$之$P_n(X)$令為
- $$P_n(X)=\sum_{i=0}^{n} y_i \frac{\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}(x-x_j)}{\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}(x_i-x_j)} = y_0\frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\ldots(x_0-x_n)}$$
- $$+y_1\frac{(x-x_0)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\ldots(x_1-x_n)}+\cdots+\ y_n\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_1)(x_n-x_2)\ldots(x_n-x_{n-1})}$$

Lagrangian法

- EX: 已知

x	0	1	2	3	4
F(x)	3	6	10	15	25

- Q1:由(0,3)、(1,6)、(2,10)、(3,15)求內插多項式
- Q2:由 (0,3)、(1,6)、(2,10)、(3,15)、(4,25)求內插多項式
- 求方程式*f*(1.7594)的函數值

Lagrangian法

Q1由4個已知點可求得$P_3(X)$ =

$$3\frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(0-1)(0-2)(0-3)}+6\frac{(x-0)(x-2)(x-3)}{(1-0)(1-2)(1-3)}+10\frac{(x-0)(x-1)(x-3)}{(2-0)(2-1)(2-3)}$$

$$+15\frac{(x-0)(x-1)(x-2)}{(3-0)(3-1)(3-2)}$$

其中 x 代入欲計算的值1.7594代入得$P_3(X)$ = 3*(-0.037787) + 6*(0.2625802) + 10*(0.8287756) + 15*(-0.0535771) = 8.9462442
並以此內插多項式函數值$P_3(1.7594)$近似方程式值*f*(1.7594)

Lagrangian法

Q2由5個已知點可求得$P_4(X)$ =

$$3\frac{(x-1)(x-2)(x-3)(x-4)}{(0-1)(0-2)(0-3)(0-4)}+6\frac{(x-0)(x-2)(x-3)(x-4)}{(1-0)(1-2)(1-3)(1-4)}$$

$$+10\frac{(x-0)(x-1)(x-3)(x-4)}{(2-0)(2-1)(2-3)(2-4)}+15\frac{(x-0)(x-1)(x-2)(x-4)}{(3-0)(3-1)(3-2)(3-4)}$$

$$+25\frac{(x-0)(x-1)(x-2)(x-4)}{(4-0)(4-1)(4-2)(4-3)}$$

其中 x 代入欲計算的值1.7594代入得$P_4(X)$ = 3*(-0.0211617) + 6*(0.1961124) + 10*(0.9284773) + 15*(-0.1200449) + 25*(0.0166170)= 9.0127120

並以此內插多項式函數值$P_4(1.7594)$近似方程式值$f(1.7594)$

Lagrangian法之缺點

- Lagrangian法找內插多項式的缺點
  - 當選用K個已知點求$P_{k-1}(X)$後，若有再增加新的1點成為(k+1)個已知點，欲求$P_k(X)$時，必須重新計算整個Lagrangian運算式，而無法引用已計算的$P_{k-1}(X)$之結果。如前例Q2的$P_4(X)$必須重新，無法引用Q1所求$P_3(X)$的結果，為了改進此一缺點，進而提出下一個方法

方法三: 牛頓形式內插多項式

- 對已知點$(X_0,Y_0),(X_1,Y_1),(X_2,Y_2),\ldots\ldots,(X_n,Y_n)$時,所對應之內插多項式為
- $P_n(X)=A_0+A_1(X-X_0)+A_2(X-X_0)(X-X_1)+A_3(X-X_0)(X-X_1)(X-X_2)+\ldots\ldots+A_n(X-X_0)(X-X_1)\ldots..(X-X_{n-1})$

$$= a_0+\sum_{i=1}^{n} a_i \prod_{j=0}^{i-1}(x-x_j)$$

牛頓形式內插多項式的優點

- 這種形式的內插多項式之優點為當已知點多取一點(X_{n+1}, Y_{n+1})時,所求之內插多項式為$P_{n+1}(X)$,而$P_{n+1}(X)$應為
-
- $P_{n+1}(X)= a_0+\sum_{i=1}^{n+1} a_i \prod_{j=0}^{i-1}(x-x_j)$
- $= a_0+\sum_{i=1}^{n} a_i \prod_{j=0}^{i-1}(x-x_j) + a_{n+1}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$
- $= P_n(X) + a_{n+1}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$
- 明顯地改進了Lagrangian法之缺點,但問題是如何求出牛頓形式的內插多項式中各個係數Ai,i= 0,1,2,….n or(n+1)呢?

牛頓形式內插多項式之係數推演

- 問題是：要如何知道$A_0,A_1,A_2,\ldots\ldots,A_n$?
- Ans： 因為$P_n(X)$為$f(X)$在已知$(X_0,\ldots..,X_n)$等n+1個點的內插多項式, 故需滿足內插多項式之條件,對 ,i=0,1,……,n,使得$P_n(X_i)=f(X_i)=Y_i$, 故,
- (1)令$X=X_0$代入牛頓形式的內插多項式$P_n(X)$
- 使得$P_n(X_0)=f(X_0)=Y_0 \equiv \mathbf{A_0=f(X_0)}$
- (2)令$X=X_1$代入
- 使得$P_n(X_1)=f(X_1)=Y_1$
- $\equiv A_0+A_1(X_1-X_0)=f(X_1)$
-
- $\equiv \mathbf{A_1}=\dfrac{f(x_1)-a_0}{x_1-x_0}=\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$

牛頓形式內插多項式之係數推演

- (3)令$X=X_2$代入
- 使得$P_n(X_2)=f(X_2) \equiv A_0+A_1(X_2-X_0)+A_2(X_2-X_0)(X_2-X_1)=f(X_2)$
- 移項得$A2=\dfrac{f(x_2)-a_1(x_2-x_0)-a_0}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \equiv A2=\dfrac{f(x_2)-a_0-a_1x_2+a_1x_0}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$
- 分子加一項減一項A_1X_1
- 使得$\equiv A2=\dfrac{f(x_2)-a_0-a_1x_2+a_1x_1-a_1x_1+a_1x_0}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$
- 移項得$\equiv A2=\dfrac{f(x_2)-a_0-a_1(x_2-x_1)-a_1(x_1-x_0)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$

牛頓形式內插多項式之係數推演

- 分項,消去 (X_2-X_1)
- $\equiv A_2 = \dfrac{f(x_2)-a_0-a_1(x_1-x_0)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} - \dfrac{a_1(x_2-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$
- A_0, A_1代入得 $A_2 = \dfrac{f(x_2)-f(x_0)-\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x_1-x_0)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} - \dfrac{\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}}{x_2-x_0}$
- $\equiv A_2 = \dfrac{f(x_2)-f(x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} - \dfrac{\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}}{x_2-x_0}$
- 改寫左式分母 $\equiv A_2 = \dfrac{\dfrac{f(x_2)-f(x_1)}{(x_2-x_1)}}{\dfrac{(x_2-x_0)}{1}} - \dfrac{\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}}{x_2-x_0}$
- 分母相同, 合併

牛頓形式內插多項式之係數推演

- 得 $\equiv A_2 = \dfrac{\dfrac{f(x_2)-f(x_1)}{(x_2-x_1)} - \dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}}{x_2-x_0}$
- 故 $A_3, A_4, \ldots\ldots, A_n$ 均可以此類推.

如何表示推導出來的係數 A_i

- 定義除差(DD)符號, 已知點X_j, X_{j+1}, X_{j+2},…..,X_{j+k}
- 令 $f[X_j] = f(X_j)$記為X_j的0次除差
- $f[X_j, X_{j+1}]=\dfrac{f[x_{j+1}]-f[x_j]}{x_{j+1}-x_j} = \dfrac{f(x_{j-1})-f(x_j)}{x_{j+1}-x_j}$ 記為X_j的1次除差
- $f[X_j, X_{j+1}, X_{j+2}]=\dfrac{f[x_{j+1}, x_{j+2}]-f[x_j, x_{j+1}]}{x_{j+2}-x_j}$ 記為X_j的2次除差
-
- $f[X_j, X_{j+1}.., X_{j+k}]= \dfrac{f[x_{j+1}\text{之k-1次除差} - x_j\text{之k-一次除差}]}{x_{j+k}-x_j}$
- 記為X_j之k次除差

TAMKANG UNIVERSITY SOFTWARE ENGINEERING GROUP
淡江軟體工程實驗室 http://www.tkse.tku.edu.tw

如何表示推導出來的係數 A_i

- 則$P_n(X)$之各係數A_i即為X_0之各級除差,
- 如$A_0 = f(X_0) = f[X_0]$是X_0之0次除差
- $A_1= \dfrac{f(x_1)-f(x_o)}{x_1-x_0}= \dfrac{f[x_1] - f[x_o]}{x_1-x_0}$ 是X_0之1次除差
- $A_2= \dfrac{\dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2-x_1} - \dfrac{f(x_1) - f(x_o)}{x_1-x_0}}{x_2-x_0}$

  $= \dfrac{[x_1\text{的1次除差} - x_0\text{的一次除差}]}{x_2-x_0}$
- 是X_0之2次除差

如何表示推導出來的係數 A_i

- 以此類推可得 $A_3=X_0$之3次除差，記為

$$A_3 = \frac{\dfrac{\dfrac{f(x_3)-f(x_2)}{x_3-x_2}-\dfrac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1}}{x_3-x_1}-\dfrac{\dfrac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1}-\dfrac{f(x_1)-f(x_o)}{x_1-x_0}}{x_2-x_0}}{x_3-x_0}$$

$$= \frac{[x_1\text{的2次除差} - x0\text{的2次除差}]}{x_3-x_0}$$

- 繼續以此類推可得 $A_i=X_0$之 i 次除差 = ??

如何表示推導出來的係數 A_i

- 如何求出牛頓形式的A_i, i=0,1,2,….,n.
- 方法A:代入除差公式計算
  - 對每個Ai= $\dfrac{x_1\text{之i-1次DD}-x_0\text{的i-1次DD}}{x_i-x_0}$
  - 再求X_1之i-1次DD及X_0之i-1次DD

$$= \frac{x_2\text{之i-2次DD}-x_1\text{的i-2次DD}}{x_i-x_1}$$

- 同理X_0之i-1次DD= $\dfrac{x_1\text{之i-2次DD}-x_0\text{的i-2次DD}}{x_{i-1}-x_0}$
- 以此類推計算每一層級

如何表示推導出來的係數 A_i

- 方法B: 利用除差表 (DD表)計算

Xi	0次DD	1次DD	2次DD	• • •	n次DD
X_0	$f(X_0)$	$\frac{f(X_1)-f(X_0)}{X_1-X_0}$	$\frac{\square-\square}{x_2-x_0}$		$\frac{\square-\square}{x_n-x_0}$
X_1	$f(X_1)$	$\frac{f(X_2)-f(X_1)}{X_2-X_1}$			
X_2	$f(X_2)$	$\frac{f(X_3)-f(X_2)}{X_3-X_2}$			
X_3	$f(X_3)$	$\frac{f(X_4)-f(X_3)}{X_4-X_3}$			
⋮					
X_{n-1}	$f(X_{n-1})$	$\frac{f(X_n)-f(X_{n-1})}{X_n-X_{n-1}}$			
X_n	$f(X_n)$				

牛頓形式內插多項式

- 綜上所述，推算牛頓形式內插多項式的步驟為
  - 由已知點建立除差表,
  - 取指定的起始點為X_0， 即已知點個數中，由X_0起取(n+1)個點
  - 建立牛頓內插多項式,
  - 取DD表中X_0對應之橫列中各項值代入各係數
  - A_0~A_n即得
  - 此內插多項式稱為牛頓除差內插多項式
  - 將欲計算之$f(X)$的X值代入以建立之牛頓除差內插多項式計算之

牛頓形式內插多項式

- 範例
  - 已知一化學實驗對一物質的溫度變化與體積膨脹大小之記錄如下表

溫度, X	-2	-1	0	1	
體積膨脹, Y	4	2	-1	1	

  - 請依上述結果，以牛頓形式內插多項式法計算$f(-0.8)$及$f(0.8)$
  - Ans:依牛頓形式內插多項式

$P_3(X) = a_0 + a_1(X- (-2)) + a_2(X- (-2))(X-(-1)) + a_3(X-(-2))(X-(-1))(X-0)$

除差表範例

Xi\j次DD	0次DD	1次DD	2次DD	3次DD
-2	4	-2	-0.5	1
-1	2	-3	2.5	
0	-1	2		
1	1			

- 故得$P_3(X) = 4 + (-2)(X+2) + (-0.5)(X+2)(X+1) + 1(X+2)(X+1)(X-0)$

⇨$f(-0.8) = P_3(-0.8) = 4 -2(-0.8 + 2) - 0.5(-0.8 + 2)(-0.8 + 1) + (-0.8 + 2)(-0.8 + 1)(-0.8) = 4 - 2.4 - 0.12 + (-0.192) = 1.288$

⇨$f(0.8) = P_3(0.8) = 4 -2(0.8 + 2) - 0.5(0.8 + 2)(0.8 + 1) + (0.8 + 2)(0.8 + 1)(0.8) = 4 – 5.6 – 2.52 + 4.032 = -0.088$

牛頓形式內插多項式

- 範例
  - 同前例之化學實驗對一物質的溫度變化與體積膨脹大小之記錄，但已知點多一點如下表

溫度, X	-2	-1	0	1	2
體積膨脹, Y	4	2	-1	1	8

  - 請改依上述結果，以牛頓形式內插多項式法計算$f(-0.8)$及$f(0.8)$
  - Ans:依牛頓形式內插多項式

$P_4(X) = a_0 + a_1(X-(-2)) + a_2(X-(-2))(X-(-1)) + a_3(X-(-2))(X-(-1))(X-0) + a_4(X-(-2))(X-(-1))(X-0)(X-1) = P_3(X) + a_4(X-(-2))(X-(-1))(X-0)(X-1)$

除差表範例

Xi\j次DD	0次DD	1次DD	2次DD	3次DD	4次DD
-2	4	-2	-0.5	1	-0.25
-1	2	-3	2.5	0	
0	-1	2	2.5		
1	1	7			
2	8				

- 故得$P_4(X) = 4 + (-2)(X+2) + (-0.5)(X+2)(X+1) + 1(X+2)(X+1)(X-0) + (-0.25)(X+2)(X+1)(X-0)(X-1) = P_3(X) + (-0.25)(X+2)(X+1)(X-0)(X-1)$

⇨$f(-0.8) = P_4(-0.8) = P_3(-0.8) + (-0.25)(-0.8+2)(-0.8+1)(-0.8-0)(-0.8-1) = 1.288 + (-0.0864) = 1.2016$

⇨$f(0.8) = P_4(0.8) = P_3(0.8) + (-0.25)(0.8+2)(0.8+1)(0.8-0)(0.8-1) = -0.088 + 0.2016 = 0.1136$

牛頓前差內插多項式

- 當已知點$X_0, X_1, \ldots\ldots, X_n$為等差數列時, 亦即存在一個d值, 使得$X_1=X_0+d$, $X_2= X_1+d =X_0+2d$,
- $X_i=X_0+i*d$, 且$X_n=X_0+n*d$, $i=0,1,2,\ldots,n$.
- 則相對的, X_1的函數值$f(X_1)$可以表示成$f(X_0+d)$, 若$f(X_1)-f(X_0)$可以看成$f(X_0+d)-f(X_0)$, 吾人可將之記為$\triangle f(X_0)$或$\triangle f_0$, 稱為X_0的一次前差(FD)
- 又吾人可延伸前差之定義如下

前差

- 令 $\triangle^0 f(X_0)=f(X_0)$稱為$X_0$之0次前差
- 而前述已知 $\triangle f(X_0) = f(X_0+d)-f(X_0) = f(X_1)-f(X_0)$
- 稱為X_0之1次前差
- 則 $\triangle^2 f(X_0)= \triangle (\triangle f(X_0))$
- $= \triangle (f(X_1)-f(X_0))$
- $= \triangle f(X_1)- \triangle f(X_0)$
- $=[f(X_2)-f(X_1)]-[f(X_1)-f(X_0)]$
- $=f(X_2)-2f(X_1)+f(X_0)$
- 稱為X_0之二次前差

前差

- 同理. $\triangle^3 f(X_0)=f(X_3)-3f(X_2)+3f(X_1)-f(X_0)$
- 其中$X_1=X_0+d$, $X_2=X_0+2d$, $X_3=X_0+3d$.
- 故得. $\triangle^k f(X_0)= \triangle(\triangle^{k-1} f(X_0))$
- $= \sum_{i=0}^{k} (-1)^i \binom{k}{i} * f(X_0+(k-i)*d)$
- 前差符號:
- $\triangle f(X_0)=f(X_1)-f(X_0)=f(X_0+d)-f(X_0)$
- $\triangle^0 f(X_0)=f(X_0)$
- $\triangle^k f(X_0)= \triangle(\triangle^{k-1} f(X_0))$
- $= \sum_{i=0}^{k} (-1)^i \binom{k}{i} * f(X_0+(k-i)*d)$

除差與前差的關係

- $f[X_0]=f(X_0)= \triangle^0 f(X_0)$, X_0之0次除差 = 0次前差
- $f[X_0,X_1]= \dfrac{f(x_1)-f(x_o)}{x_1-x_0} = \dfrac{\triangle f(x_0)}{x_0+d - x_0}$
- 故得X_0的1次除差=$\dfrac{1\text{次前差}}{d}$
- 又$f[X_0, X_1, X_2] = \dfrac{\dfrac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1} - \dfrac{f(x_1)-f(x_o)}{x_1-x_0}}{x_2-x_0}$

除差與前差的關係

- $$f[X_0, X_1, X_2] = \frac{\dfrac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1} - \dfrac{f(x_1)-f(x_o)}{x_1-x_0}}{x_2-x_0}$$

$$= \frac{\dfrac{\triangle f(x_1)}{x_0+2d-(x_0+d)} - \dfrac{\triangle f(x_0)}{x_0+d-x_0}}{x_0+2d-x_0}$$

$$= \frac{\dfrac{\triangle f(x_1)-\triangle f(x_0)}{d}}{2d} = \frac{\triangle^2 f(x_0)}{2d^2}$$

- 故得2次除差=$\dfrac{2\text{次前差}}{2d^2}$

除差與前差的關係

- $$f[X_0, X_1, X_2, X_3] = \frac{\dfrac{f[x_2, x_3]-f[x_1, x_2]}{x_3-x_1} - \dfrac{f[x_1, x_2]-f[x_0, x_1]}{x_2-x_0}}{x_3-x_0}$$

$$= \frac{\dfrac{\triangle^2 f(x_1)}{x_0+3d-(x_0+d)} - \dfrac{\triangle^2 f(x_0)}{x_0+2d-x_0}}{x_0+3d-x_0}$$

$$= \frac{\dfrac{\triangle^2 f(x_1)-\triangle^2 f(x_0)}{2d}}{3d} = \frac{\dfrac{\triangle^3 f(x_0)}{d}}{6d^2} = \frac{\triangle^3 f(x_0)}{6d^3}$$

- 故得3次除差=$\dfrac{3\text{次前差}}{6d^3} = \dfrac{3\text{次前差}}{3!d^3}$

除差與前差的關係

- 依此類推, 可得$f[X_0, X_1,\ldots, X_k]= \dfrac{\triangle^k f(x_0)}{k!d^k}$
- 亦即, X_0之k次除差 = X_0之k次前差/($k!d^k$)
- 由此, 可以進一步將牛頓除差內插多項式以前差符號表示。可得, 對已知點$X_0, X_1,\ldots,X_n$, 呈等差數列間距值為d, 且令欲求之$X=X_0+r*d$, r不一定是整數, 則牛頓除差內插多項式於(X_0~X_n)

由除差內插多項式到前差內插多項式

$$P_n(X)=A_0+A_1(X-X_0)+A_2(X-X_0)(X-X_1)+$$
$$A_3(X-X_0)(X-X_1)(X-X_2)+\ldots\ldots\ldots+$$
$$A_n(X-X_0)(X-X_1)\ldots\ldots(X-X_{n-1})$$
$$=f[X_0]+f[X_0,X_1](X-X_0)+f[X_0,X_1,X_2](X-X_0)(X-X_1)+$$
$$f[X_0,X_1,X_2,X_3](X-X_0)(X-X_1)(X-X_2)+\ldots\ldots\ldots..+$$
$$f[X_0,X_1,\ldots,X_n](X-X_0)(X-X_1)\ldots(X-X_{n-1})$$

以前差與除差關係代入得

$$= \triangle^0 f(X_0)+ \frac{\triangle f(x_0)}{d}(X-X_0)+\frac{\triangle^2 f(x_0)}{2!d^2}(X-X_0)(X-X_1)+$$
$$\frac{\triangle^3 f(x_0)}{3!d^3}(X-X_0)(X-X_1)(X-X_2)+\ldots.+$$
$$\frac{\triangle^n f(x_0)}{n!d^n}(X-X_0)(X-X_1)\ldots\ldots(X-X_{n-1})$$

由除差內插多項式到前差內插多項式

以$X=X_0+r*d$、X_i 以$X_0 + i*d$ ，$i = 1, 2, \ldots, (n-1)$代入得

$$P_n(X)= \triangle^0 f(X_0)+ \frac{\Delta f(x_0)}{d} (\cancel{X_0}+r*d-\cancel{X_0})+$$

$$\frac{\Delta^2 f(x_0)}{2d^2} (\cancel{X_0}+r*d-\cancel{X_0})(\cancel{X_0}+r*d-(\cancel{X_0}+d))+$$

$$\frac{\Delta^3 f(x_0)}{3!d^3} (\cancel{X_0}+r*d-\cancel{X_0}) (\cancel{X_0}+r*d-(\cancel{X_0}+d))(\cancel{X_0}+r*d-(\cancel{X_0}+2d))+\ldots\ldots+$$

$$\frac{\Delta^n f(x_0)}{n!d^n} (\cancel{X_0}+r*d-\cancel{X_0})(\cancel{X_0}+r*d-(\cancel{X_0}+d))\ldots\ldots\ldots(\cancel{X_0}+r*d-(\cancel{X_0}+(n-1)d))$$

由除差內插多項式到前差內插多項式

$$= \Delta^0 f(X_0)+ \frac{\Delta f(x_0)}{\cancel{d}} r\cancel{d}+ \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2\cancel{d^2}} r(r-1)\cancel{d^2}+$$

$$\frac{\Delta^3 f(x_0)}{3!\cancel{d^3}} r(r-1)(r-2)\cancel{d^3}+\ldots\ldots+$$

$$\frac{\Delta^n f(x_0)}{n!\cancel{d^n}} r(r-1)(r-2)\ldots\ldots(r-n+1)\cancel{d^n}$$

得$P_n(X)= \sum_{i=0}^{n} \frac{r!\Delta^i f(x_0)}{i!(r-i)!}$

稱$P_n(X)$為牛頓前差內插多項式.

- 即牛頓內插多項式, 以前差符號表示.

前差表

- 如何求各項$\Delta^i f(x_0)$？
  - 可使用前差表計算出來
  - 前差表類似除差表，但是沒有除法計算

相減

Xi	0次FD	1次FD	2次FD	• • •	n次FD
X_0	$f(X_0)$	$\Delta f(x_0)$	$\Delta^2 f(x_0)$		$\Delta^n f(x_0)$
X_1	$f(X_1)$	$\Delta f(x_1)$	$\Delta^2 f(x_1)$		
X_2	$f(X_2)$	$\Delta f(x_2)$	$\Delta^2 f(x_2)$		
X_3	$f(X_3)$	$\Delta f(x_3)$	$\Delta^2 f(x_3)$		
⋮	⋮	⋮			
X_{n-1}	$f(X_{n-1})$	$\Delta f(x_{n-1})$			
X_n	$f(X_n)$				

前差內插多項式

- 已知點:(0.2, -1.6094), (0.4, -0.9163), (0.6, -0.5108)
  (0.8, -0.2231), (1.0, 0.0), (1.2, 0.1823)
  以前差形式取0.4, 0.6, 0.8, 1.0求$f(0.73)$
- Sol: 先求前差表

X	0次FD	1次FD	2次FD	3次FD	4次FD	5次FD
0.2	-1.6094	0.6931	-0.2876	0.1698	-0.1166	0.0872
0.4	-0.9163	0.4055	-0.1178	0.0532	-0.0294	
0.6	-0.5108	0.2877	-0.0646	0.0238		
0.8	-0.2231	0.2231	-0.0408			
1.0	-0.0	0.1823				
1.2	-0.1823					

前差內插多項式

已知點$(X_0, f(X_0)), (X_1, f(X_1)), \ldots, (X_n, f(X_n))$

且$X_0, X_1, \ldots, X_n$為等差數列,間距值為 d = 0.2, 則

$$P_n(X)= \sum_{i=0}^{n} C_i^r \Delta^i f(x_0)$$

其中$X=X_0 + r*d$ 代入

$P_3(X) \fallingdotseq f(X)$

以前差形式寫出$P_3(X)=f(X)$

$$P_3(X)= \binom{r}{0} \Delta^0 f(X_0)+\binom{r}{1} \Delta^1 f(X_0)+\binom{r}{2}\Delta^2 f(X_0)+\binom{r}{3} \Delta^3 f(X_0)$$

$$= \binom{r}{0}(-0.9163)+\binom{r}{1}(0.4055)+\binom{r}{2}(-0.1178)+\binom{r}{3}(-0.0532)$$

前差內插多項式

- $r =? = (X-X_0)/d = (0.73-0.4)/0.2 = 0.33/0.2 = 1.65$
- $\binom{r}{i}= \dfrac{r!}{i!(r-i)!} = \dfrac{r(r-1)(r-2)\cdots(r-i+1)}{i!}$
- 則$P_3(X) =1*(-0.9163)+\dfrac{1.65}{1}*(0.4055)+\dfrac{(1.65)(0.65)}{2*1}*(-0.1178)+\dfrac{(1.65)(0.65)(1.65-2)}{3*2*1}*(0.0532)$

  $=-0.3137$

前差內插多項式

- 若加延伸一點1.2, 以$P_4(0.73)$近似$f(0.73)$, 則

$$P_4(X)=P_3(X)+\binom{r}{4}(-0.0294) = -0.3137 + \frac{(1.65)(1.65-1)(1.65-2)(1.65-3)}{4!}*(-0.0294)= -0.3143$$

後差內插多項式

- 方法同前差內插多項式
- 但基準點由X_0改為X_n
- 又$X = X_n - r*d$
- 且各項$\Delta^i f(X_n)$就改取前差表之下斜邊即得各項後差值

討論

- 一般而言，使用內插法時，增加估算的點數可以提高估計值的精確度
- 但點數取的太多，且與所求的點距離太遠的話，反而會使估計值的誤差加大

TAMKANG UNIVERSITY SOFTWARE ENGINEERING GROUP
淡江軟體工程實驗室 http://www.tkse.tku.edu.tw

內插多項式的誤差

- $e_n(X) = f(X) - P_n(X) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} * \prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$

參閱 p256 ---(式子43)[或pp.229-230、式40]

- 其中$(\xi) \in (X_0, X_1, \ldots, X_n)$之間的值
- 則
- 由上例來看
- $P_3(X) = P_3(0.73) = -0.3137$,求 $e_3(X)=?$

內插多項式的誤差

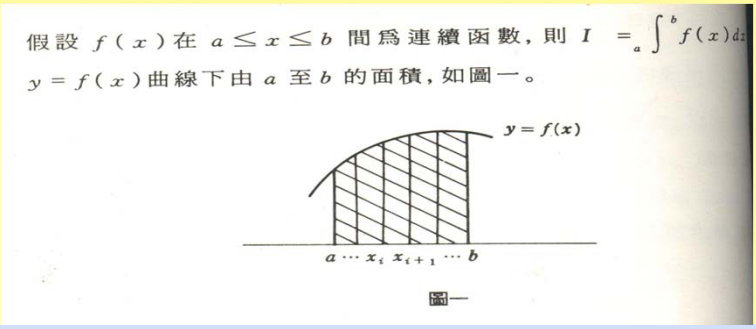
- 代入公式:
- $e_n(x) = \left| \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \right| \prod_{j=0}^{n}(x - x_j)$
- Question:
- 內插法標榜主要應用於$f(x)$未知或已知但是很複雜，所以無法計算$f(x)$，故改用內插多項式近似之
- 此時又如何計算$f^{(n+1)}(x)$？
- 反之如果當初有辦法計算$f(x)$的話，又何必以$P_n(x)$來近似?

合理的的推算P_n的誤差

- $P_n(x)$為$f(x)$在$X_0, X_1, \ldots\ldots, X_n$之內插多項式，若欲求$f(x)$ 的函數值，而以$P_n(x)$來估算之，則誤差應為
- $e_n(x) = | f(x) - P_n(x) |$
- 假設若X也為一已知點，亦即，已知點有$X_0, X_1, X_2, \ldots\ldots X_n, X$
- 不失一般性，此n+2個點仍可重新依序排列
- 則f(x)在此n+2個點之內插多項式
- 則為$P_{n+1}(x)$且由內插多項式可知$P_{n+1}(x) = f(x)$必成立，內插多項式的條件之一
- 故$e_n(x) = | f(x) - P_n(x) | = | P_{n+1}(x) - P_n(x) |$
- 雖然實際的已知點並不包含X 及其函數值$f(x)$，但上述的推算可以給我們一個方向，欲求內插多項式的誤差，可用延伸一個點來代表$f(x)$，故以$P_{n+1}(x)$來近似$f(x)$，亦即以$e_n(x) = | P_{n+1}(x) - P_n(x) |$來估算$P_n(x)$知誤差。

數值積分

- 積分形式
  - $I = \int_a^b f(x)dx$
  - [a, b]為一有限範圍，f(x)為一已知函數，**I**為f(x)在[a, b]區間內對x軸所成的面積，如圖所示


假設 $f(x)$ 在 $a \leq x \leq b$ 間爲連續函數，則 $I = \int_a^b f(x)dx$
$y = f(x)$ 曲線下由 a 至 b 的面積，如圖一。

圖一

數值積分

- 傳統的理論積分，計算十分複雜，因此數值積分引用前述的內插多項式P_n(x)取代f(x)來計算積分就容易的多
- 數值積分的一般形式如下
  - $I \cong \Sigma_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$
  - w_i其中 微積分重量
  - x_i為[a, b]間的積分點
- 數值積分的一般方法是將區間[a, b]分成許多的小區間，求出各小區間內f(x)曲線下的面積，再相加即得較精確的估計值

數值積分

- 數值積分方法可以分成兩大類：

1. 先將[a, b]間的小區間分好，通常選等距區間，或選在函數值容易計算的積分點上。再以這些已知積分點及各點上的函數值代入數值方法中求得積分結果。
2. [a, b]間的積分點非由我們選好再代入數值方法，而是由數值方法本身依我們所要求的精確度及區間數，選擇出落在能達到我們要求的最佳位置上的積分點，就能得到較精確的積分結果。

數值積分

- 第一類方法有
  - Newton-Cotes積分公式
    - TR法
    - SR法
    - 3/8R法
  - Romberg積分公式
- 本方法的特性
  - [a, b]區間的各點由計算者自行決定
  - 可用於f(x)未知的情形
  - 計算速度會較慢
  - 精確度較低

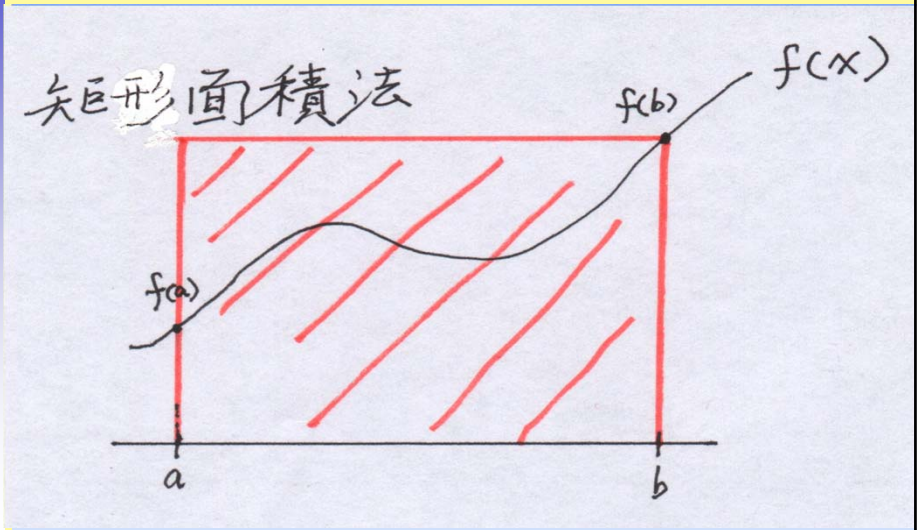
數值積分

- 第二類方法有
  - Gaussian Quadrature (GQ)積分公式
  - Legendre GQ (LGQ)積分公式
- 本方法的特性
  - [a, b]區間的各點由計算公式行決定
  - f(x)一定要已知
  - 計算速度會較快
  - 精確度較高

數值積分

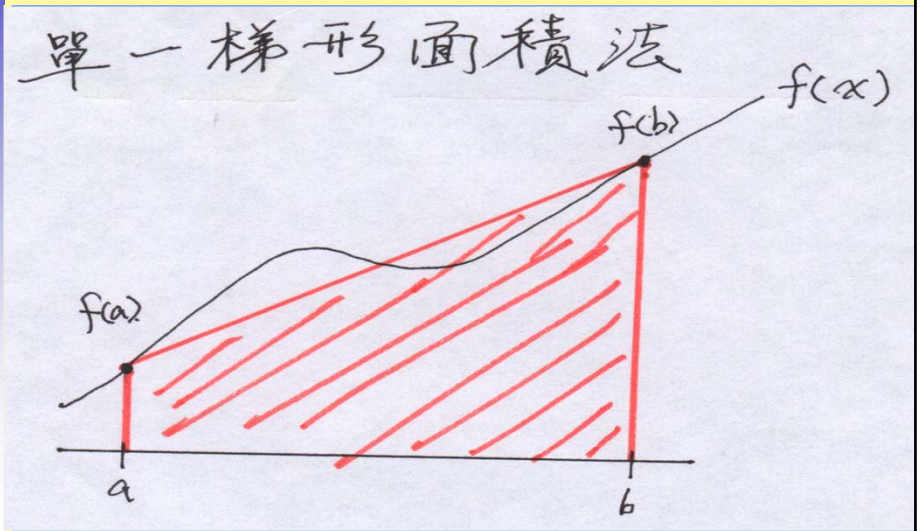
- 最簡單的數值積分：梯形法
  - 最簡略型：矩形面積法
  - 簡略型：單一梯形面積法
  - 梯形法：數個梯形面積之和
  - 圖示如下：

數值積分



TAMKANG UNIVERSITY SOFTWARE ENGINEERING GROUP
淡江軟體工程實驗室 http://www.tkse.tku.edu.tw

數值積分



數值積分

- 梯形法
  - 將積分範圍分成許多個小梯形，再分別計算每個梯形面積，在總和所有梯形面積為積分值
  - 故，欲求

$\mathbf{I} = \int_a^b f(x)dx$，先將[a, b]分成 n 個等距區間，

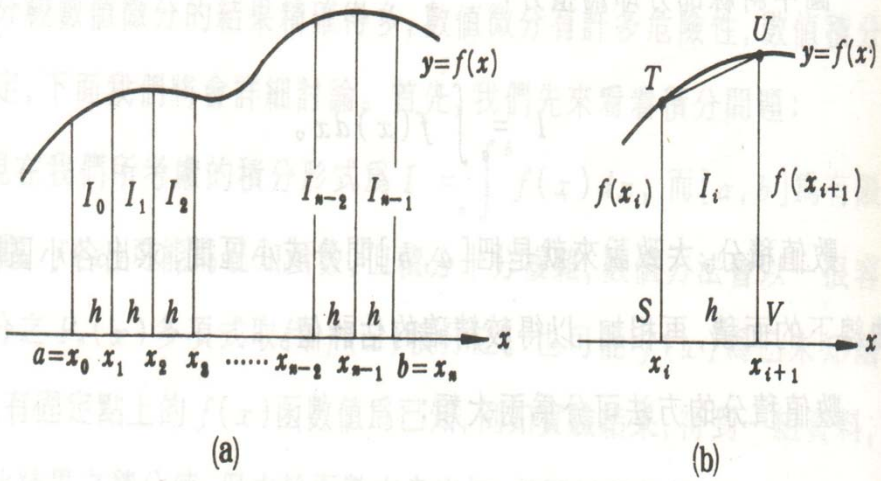
間距值 $\mathbf{h = (b-a)/n}$，如下圖(a)圖所示

  - 對任意一小區間$[x_i, x_{i+1}]$而言，其積分值為

$\mathbf{I_i} = \int_{Xi}^{Xi+1} f(x)dx$，i = 0, 1, 2, …n-1

  - 當 **h** 值很小時，則 $\mathbf{I_i}$ 可以用STUV四個點構成之梯形面積近似之。如下圖(b)圖所示
  - 其中該梯形面積 = $\dfrac{h*(y_i + y_{i+1})}{2}$ ，其中$y_i = f(x_i)$, $y_{i+1}=f(x_{i+1})$

數值積分



數值積分

I 積分可寫爲：

$$
\begin{aligned}
I &= \sum_{i=0}^{n-1} I_i \\
&= \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx + \cdots\cdots + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx + \cdots\cdots \\
&\quad + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\,dx \\
&\cong \frac{h}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots\cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)] \\
&= \frac{h}{2}[y_0 + 2y_1 + \cdots\cdots + 2y_{n-1} + y_n] \\
&= I_{TR} \qquad (1)
\end{aligned}
$$

數值積分

- I_{TR}稱為梯形法(Trapezoidal Rule, 簡稱TR)所得之積分值
- 梯形法是數值積分方法中最簡單的方法，但誤差也會比較大
- 但因為簡單且最容易用來說明數值積分的基本觀念，故仍常被使用

數值積分

- 範例
  - 由已知的下列資料，使用TR法計算 $\mathbf{I} = \int_{0.3}^{1.5} f(x)dx$

X	0.3	0.5	0.7	0.9	1.1	1.3	1.5
f(X)	1.3499	1.6487	2.0138	2.4596	3.0042	3.6693	4.4817

  - Ans:

由已知資料可知 h = 0.2，$I = I_{TR}$

$$= \frac{h}{2}[f(0.3)+2f(0.5)+2f(0.7)+2f(0.9)+2f(1.1)+2f(1.3)+f(1.5)]$$

$$= \frac{0.2}{2}[1.3499+2(1.6487+2.0138+2.4596+3.0042+3.6693)+4.4817] = 3.1423$$

Newton-Cotes積分公式

- 利用Newton FD 內插多項式取代f(x)求積分
- 分析
  - 令[a, b] ，$x_0 = a$，$x_n = b$，$x_i = x_{i-1}+h$，或 $x_i = x_0+i*h$
  - 當**n=1**時，以第一個區間而言 $[x_0, x_1]$ ，兩個已知點求一次內插多項式，得

$P_1(x) = f(x_0) + \Delta f(x_0)*(^r{}_1) = f(x_0) + \Delta f(x_0)*r$

則 $\mathbf{I_0} = \int_{X0}^{X1} f(x)dx \cong \int_{X0}^{X1} P_1(x)dx$

$= \int_{X0}^{X1} (f(x_0) + \Delta f(x_0)*r)dx = \int_{X0}^{X1} (f_0 + \Delta f_0*r)dx$

  - 由Newton FD公式中已知，$x = x_0 + r*h$，且$dx = hdr$，
  - $x = x_0$時，r = 0
  - $x = x_1$時，r = 1

Newton-Cotes積分公式

代入 I_0 得

$I_0 \cong \int_0^1 (f_0 + \Delta f_0 * r) h dr$

$= h f_0 [r]^1_0 + h \Delta f_0 [r^2/2]^1_0$

$= h*(f_0 + 1/2 * \Delta f_0)$

$= h* (f_0 + 1/2*(f_1 - f_0))$

$= h/2 * (f_0 + f_1)$

$= h/2 * (y_0 + y_1)$

同理可得 $I_j \cong h/2 * (y_j + y_{j+1})$

$I = \Sigma^{n-1}_{j=0} I_j \cong h/2 * (y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \ldots + 2y_{n-1} + y_n)$

$= I_{TR}$

- 可得Newton-Cotes的一次積分公式即為梯形法

Newton-Cotes積分公式

- 梯形法的誤差
  - $E_{TR} = (-h^2/12) *(b - a)* f'(\xi)$ ，其中$a \le \xi \le b$，一般取最大值
  - 問題仍會發生在$f(x)$可能未知
  - 以課本的例一而言，若不告知$f(x)$為e^x者，其實無法求誤差

Newton-Cotes積分公式

- 利用Newton FD 內插多項式取代$f(x)$求積分
- 分析
  - 令[a, b] ，$x_0 = a$，$x_n = b$，$x_i = x_{i-1}+h$，或 $x_i = x_0+i*h$
  - 當**n=2**時，需以三個已知點求二次內插多項式，以第一、二個區間而言 $[x_0, x_1, x_2]$ ，得

$P_2(x) = f(x_0) + \Delta f(x_0)*\binom{r}{1} + \Delta^2 f(x_0)*\binom{r}{2}$

$= f(x_0) + \Delta f(x_0)*r + \Delta^2 f(x_0)*[r(r-1)/2]$

則 $\mathbf{I_0 = \int_{X0}^{X2} f(x)dx \cong \int_{X0}^{X2} P_2(x)dx}$

$\mathbf{= \int_{X0}^{X2} (f(x_0) + \Delta f(x_0)*r + \Delta^2 f(x_0)*\binom{r}{2})dx}$

$\mathbf{= \int_{X0}^{X1} (f_0 + \Delta f_0*r + \Delta^2 f(x_0)*[r(r-1)/2])dx}$

  - 由Newton FD公式中已知，$x = x_0 + r*h$，且$\boldsymbol{dx = hdr}$，
  - $x = x_0$時，$r = 0$
  - $x = x_1$時，$r = 1$
  - $x = x_2$時，$r = 2$

Newton-Cotes積分公式

代入 $\mathbf{I_0}$ 得

$\mathbf{I_0 \cong \int_0^2 (f_0 + \Delta f_0*r + \Delta^2 f_0*[r(r-1)/2])hdr}$

$\mathbf{= h f_0[r]^2_0 + h \Delta f_0 [r^2/2]^2_0 + h \Delta^2 f_0 [(r^3/6) - (r^2/4)]^2_0}$

$\mathbf{= h*(2*f_0 + 2*\Delta f_0 + 1/3*\Delta^2 f_0)}$

$\mathbf{= h/3*(f_0 + 4*f_1 + f_2)}$

$\mathbf{= h/3 * (y_0 + 4*y_1 + y_2)}$

同理可得 $\mathbf{I_j \cong h/3 * (y_j + 4*y_{j+1} + y_{j+2})}$

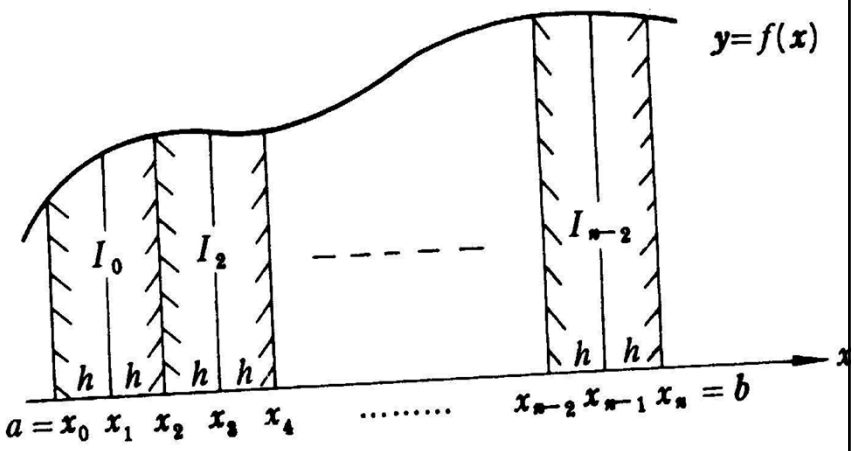
$\mathbf{I = \Sigma^{n-2}_{j=0,\ j為偶數} I_j \cong \Sigma^{n-2}_{j=0,\ j為偶數} h/3 * (y_j + 4*y_{j+1} + y_{j+2})}$

$\mathbf{= h/3 * (y_0+4y_1+2y_2+4y_3+\ldots+2y_{n-2}+4y_{n-1}+y_n)}$

$\mathbf{= I_{SR}}$

- **可得Newton-Cotes的二次積分公式即為Simpson法**

Newton-Cotes積分公式



Newton-Cotes積分公式

- Example
  - 以例一的資料利用SR法計算 $\mathbf{I} = \int_{0.3}^{1.5} f(x)dx$

X	0.3	0.5	0.7	0.9	1.1	1.3	1.5
f(X)	1.3499	1.6487	2.0138	2.4596	3.0042	3.6693	4.4817

  - **Ans:**

$\mathbf{I} \cong \mathbf{I}_{SR}$

$= (0.2/3)*[f(0.3)+4f(0.5)+2f(0.7)+4f(0.9)+2f(1.1)+4f(1.3)+f(1.5)]$

$= (0.2/3)*[1.3499 + 4*(1.6487) + 2*(2.0138) + 4*(2.4596) + 2*(3.0042) + 4*(3.6693) + 4.4817] = 3.13187$

Newton-Cotes積分公式

- SR法的誤差
  - $E_{SR} = (-h^4/120) *(b - a)* f^{(4)}(\xi)$ ，其中$a \le \xi \le b$，一般取最大值
  - 問題仍會發生在$f(x)$可能未知
  - 由SR之誤差公式可看出，若f(x)為三次式(含)以下之函式，SR法根本無誤差
  - SR法是Newton-Cotes公式中最精確的一個方法
  - 然而，SR法每次取兩個小區間，因此積分問題必須能被切割成偶數個小區間才可使用SR法
  - 如果是奇數區間怎麼辦才能使誤差變小？

Newton-Cotes積分公式

- 如何計算出誤差較小的Newton-Cotes數值積分
  - 如果已是偶數區間，直接使用SR法
  - 如果是奇數區間，則第一個區間(第一及第二個已知點點)使用TR法，其餘區間(偶數個，從第二個已知點到最後一個已知點)使用SR法