Advanced Industrial Mathematics
Fall 2025

Ju Ming

jming@hust.edu.cn
Huazhong University of Science and Technology

October 26, 2025

插值问题

- 函数逼近问题：设函数$y=f(x)$定义在区间$[a,b]$上, 其具体的公式未知，已知坐标点$\{(x_i,y_i):y_i=f(x_i),0\leq i\leq n\}$。先希望找到一个性质较好（例如：比较光滑，形式简单）的函数$P(x)$, 使得

$$P(x_i)=y_i,0\leq i\leq n$$

作为$y=f(x)$的一个近似。

从几何上看，n 次插值多项式 $P_n(x)$，是一条n 次代数曲线，它通过曲线 $y = f(x)$ 上的 $n+1$个点 (x_i, y_i) $(i = 0, 1, \cdots, n)$.

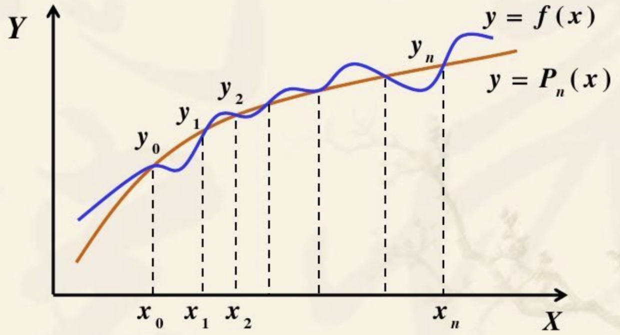

Figure: 用$y = P_n(x)$来逼近$y = f(x)$

Example 1.1.1

在上述函数逼近问题中，假设$y = f(x)$的插值逼近函数 $P_n(x)$为n阶多项式，即

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$$

试求出该插值多项式的形式。

Example 1.1.1

在上述函数逼近问题中，假设$y=f(x)$的插值逼近函数 $P_n(x)$为n阶多项式，即

$$P_n(x)=\sum_{i=0}^{n} a_i x^i$$

试求出该插值多项式的形式。

Ans: 由已知，

$$y_k=P_n(x_k)=\sum_{i=0}^{n} a_i x_k^i, 0\le k\le n$$

即

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \cdots\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

上式记为 $A\alpha = Y$， 显然$det(A)$是一个$(n+1)$阶范德蒙行列式。

$$det(A) = \prod_{n \geq i > j \geq 0} (x_i - x_j)$$

若$x_0, x_1, \cdots, x_n$互不相同，则$det(A) \neq 0$, 此时有唯一解

$$\alpha = A^{-1} Y$$

Theorem 1.1.1

满足$P_n(x_i) = y_i, 1 \leq i \leq n$的插值多项式存在且唯一。

拉格朗日（Lagrange）插值多项式

已知$\{(x_i, y_i)\}_{0\le i\le n}$, 这里$y_i = f(x_i)$ 考虑n次多项式

$$l_i(x) = \frac{\prod\limits_{0\le j\le n, j\ne i}(x - x_j)}{\prod\limits_{0\le j\le n, j\ne i}(x_i - x_j)}, \text{ 这里 } x_i \ne x_j, 0 \le i, j \le n$$

显然

$$l_i(x_i) = 1; l_i(x_j) = 0$$

定义$y = f(x)$的Lagrange(n次)插值多项式:

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) y_i = \sum_{i=0}^{n} c_i \prod_{0\le j\le n, j\ne i}(x - x_j)$$

此时，必有$L_n(x_i) = y_i, 0 \le i \le n$, l_i称为Lagrange基函数

Example 1.1.2

设$y = ln(x)$并给定如下函数表，求$P_4(x)$。

x_i	10	11	12	13	14
y_i	2.3026	2.3979	2.4849	2.5649	2.6391

Ans:

- 方法1: $\alpha = A^{-1}Y$, 有
  $\alpha = [0.3886, 0.3371, -0.0212, 0.0008, -0.0000]$
- 方法2: $L(x) = \sum_{i=0}^{4} c_i \prod_{4 \geq j \geq 0, i \neq j} (x - x_j)$, 这里

i	0	1	2	3	4
c_i	0.0959	-0.3996	0.6212	-0.4275	0.1100

Lagrange 插值多项式的截断误差

Theorem 1.1.2

设$f^{(n)}(x)$在$[a,b]$上连续，$f^{(n+1)}(x)$在(a,b)内存在，节点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$, $L_n(x)$是n阶*Lagrange*插值多项式，$\forall x \in [a,b]$, 截断误差（插值余项）

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

这里 $\xi \in (a,b), \omega_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$.

注意：

- 在上述误差估计式中，要求$f(x)$ $(n+1)$阶可导
- 若 $\max_{x\in(a,b)} |f^{(n+1)}(x)| \le M_{n+1}$, 则

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

Example 1.1.3

已知函数$y = e^{-x}$在$x = 1, 2, 3$的值，试估计线性插值，二次插值计算的$e^{2.1}$的截断误差

Definition 1.1.4

舍入误差（round-off error），是指运算得到的近似值和精确值之间的差异。

Newton 插值

Definition 1.2.1

$$f[x_i, x_j] = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j}$$

称为函数$f(x)$关于点x_i, x_j的一阶差商,

$$f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_j] - f[x_j, x_k]}{x_i - x_k}$$

称为函数$f(x)$关于点x_i, x_j, x_k的二阶差商, 类似地:

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

称为函数$f(x)$关于点$x_i, 1 \leq i \leq k$的k阶差商,

注意

- k阶差商由$k+1$个点构造而成
- 定义零阶差商为$f(x_0)$

Corollary 1.2.2

- k 阶差商可以表为$f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_k)$的线性组合， 事实上

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

- 差商具有对称性，即差商与节点顺序无关

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = f[x_1, x_0, \cdots, x_k] = \cdots = f[x_1, x_2, \cdots, x_k, x_0]$$

Pf: (1).数学归纳法 （2). 由(1)直接得到

差商表

x_i	$f(x_i)$	一阶差商	二阶差商		k阶差商
x_0	$f(x_0)$				
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0, x_1]$			
x_2	$f(x_2)$	$f[x_1, x_2]$	$f[x_0, x_1, x_2]$		
x_3	$f(x_3)$	$f[x_2, x_3]$	$f[x_1, x_2, x_3]$		
x_4	$f(x_4)$	$f[x_3, x_4]$	$f[x_2, x_3, x_4]$		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$
x_k	$f(x_k)$	$f[x_{k-1}, x_k]$	$f[x_{k-2}, x_{k-1}, x_k]$	$\cdots$	$f[x_0, x_1, \cdots, x_k]$

Table: 同列维尔法：每次用前一列同行的差商与前一列上行的差商再做差商

Newton 插值多项式

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

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

$$\cdots$$

$$f[x,x_0,\cdots,x_n]=\frac{f[x,x_0,\cdots,x_{n-1}]-f[x_0,\cdots,x_n]}{x-x_n}$$

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

所以

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

令

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

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

则

$$f(x)=P_n(x)+R_n(x)$$

其中$P_n(x)$称为Newton插值多项式，$R_n(x)$称为Newton插值多项式余项

Theorem 1.2.1

已知$(x_i,y_i), i=0,\cdots,n$,其中$y_i=f(x_i)$,则满足$y_i=P(x_i)$的插值多项式为

$$f(x)=P_n(x)+R_n(x)$$

Theorem 1.2.2

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

Pf: 利用插值多项式的唯一性

Theorem 1.2.3

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

Example 1.2.3

已知$y = f(x)$的插值点，求Newton三次插值多项式$P_3(x)$

i	0	1	2	3
x_i	0	1	2	3
y_i	1	3	9	27

差分与等距节点的Newton插值

Definition 1.3.1

$y = f(x)$的向前差分：

- 一阶向前差分：$\Delta f_k = f(x_{k+1}) - f(x_k)$
- 二阶向前差分：
  $\Delta^2 f_k = \Delta f_{k+1} - \Delta f_k = y_{k+2} - 2f(x_k + 1) + f(x_k)$
- m阶向前差分：$\Delta^m f_k = \Delta^{m-1} f_{k+1} - \Delta^{m-1} f_k$

Definition 1.3.2

$y = f(x)$的向后差分：

- 一阶向后差分：$\nabla f_k = f(x_k) - f(x_{k-1})$
- m阶向前差分：$\nabla^m f_k = \nabla^{m-1} f_k - \nabla^{m-1} f_{k-1}$

Definition 1.3.3

$y = f(x)$的中心差分：

- 一阶中心差分：$\delta f_k = f(x_k + h/2) - f(x_k - h/2)$
- m阶中心差分：$\delta^m f_k = \delta^{m-1} f_{k+1/2} - \delta^{m-1} f_{k-1/2}$

Definition 1.3.4

- 不变算子: $If(x_k) = f(x_k)$
- 位移算子: $Ef(x_k) = f(x_k + h) = f(x_{k+1})$
- 微分算子: $Df(x_k) = f'(x_k)$

Theorem 1.3.1

- $E^n f(x_k) = f(x_k + nh);\ I^n = I$
- $\Delta = E - I, \nabla = I - E^{-1}$
- $\delta = E^{1/2} - E^{-1/2} = E^{1/2}(I - E^{-1}) = E^{1/2}\nabla$
- $f \in P_n$, 则$\Delta^k f(x) \in P_{n-k}, k \leq n;\ \Delta^k f(x) = 0, k > n$
- 差分与函数函数值可互相线性表示: $\Delta^m f_k = \sum(-1)^{m-i} f_{k+i}$
- $f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \Delta^k y_0/(k!h^k)$

Newton 向前（后)等距插值公式(差分)

设 $x_k = x_0 + kh$, h为步长。

- 若 $x = x_0 + th, t \in (0,1)$, 则 Newton 向前公式为:

$$N_n(t) = y_0 + \sum_{i=1}^{n} \frac{t(t-1)\cdots(t-i+1)}{i!} \Delta^i y_0$$

$$R_n(t) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} t(t-1)\cdots(t-n)h^{n+1}$$

- $x = x_n + th, t \in (-1,0)$,则 Newton 向后公式为

$$N_n(t) = y_n + \sum_{i=1}^{n} \frac{t(t+1)\cdots(t+i-1)}{i!} \Delta^i y_0$$

$$R_n(t) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} t(t+1)\cdots(t+n)h^{n+1}$$

Hermite 插值

Q: 构造（Hermite）插值多项式函数$H(x)$，要求

$$\begin{cases} H(x_i) = f(x_i) = y_i \\ H'(x_i) = f'(x_i) = m_i \end{cases}, i = 0, 1, \cdots, n$$

Example 1.3.5

求一个三次多项式，使得

$$\begin{cases} H(x_i) = f(x_i) = y_i \\ H'(x_i) = f'(x_i) = m_i \end{cases}, i = 0, 1$$

Ans:Idea: 考虑

$$H_3(x) = \alpha_0(x)y_0 + \alpha_1(x)y_1 + \beta_0(x)m_0 + \beta_1(x)m_1$$

其中 $\alpha_i, \beta_i \in P_3$

Example 1.3.6

利用如下插值条件，构造相应的多项式

$$\begin{cases} H(x_i) = f(x_i) = y_i \\ H'(x_1) = f'(x_1) = m_1 \end{cases}, i = 0, 1, 2$$

Ans：考虑利用Newton插值公式

$$\begin{aligned} H(x) = & y_0 + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) \\ & + c(x)(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \end{aligned}$$

一般Hermite插值多项式

$$\begin{cases} H_{2n+1}(x_i) = f(x_i) = y_i \\ H'_{2n+1}(x_i) = f'(x_i) = m_i \end{cases}, i = 0, 1, \cdots, n$$

设

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i(x) y_i + \sum_{i=0}^{n} \beta_i(x) m_i$$

带入插值条件，可得

$$\alpha_i = \left(1 + 2(x_i - x) \sum_{j=0, j \neq i}^{n} \frac{1}{x_i - x_j} \right) l_i^2(x)$$

;

$$\beta_i = (x - x_i) l_i^2(x) m_i$$

Theorem 1.3.2

满足上述条件的$2n+1$阶*Hermite*插值多项式是唯一的

Theorem 1.3.3

*Hermite*插值多项式的误差

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

Definition 1.3.7

重节点的差商多项式

$$f[x, x, \cdots, x] = \lim_{x_i \to x, i=0,\cdots,n-1} f[x_0, x_1, \cdots, x_{n-1}, x] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$$

Example 1.3.8

根据插值条件，求4次Hermite插值多项式

x	H	H'	H''
0	-1	-2	
1	0	10	40

Runge现象

在科学计算领域，龙格现象（Runge）指的是对于某些函数，使用等距节点构造高阶插值多项式时，在插值区间的边缘的误差可能很大的现象。它是由Runge在研究多项式差值的误差时发现的，这一发现表明，并不是插值多项式的阶数越高，效果就会越好。
例如

$$f(x) = \frac{1}{1+25x^2}, x \in [-1, 1]$$

造成Runge现象的根本原因是，被插值函数的解析区域过小。上面的龙格函数虽然在实数域上有任意阶导数，但在$x = \pm 0.2i$处是不解析的，因此造成了龙格现象。
可以参考*Approximation Theory and Approximation Practice, Extended Edition(SIAM 2020)* by LNT

Runge现象的克服

- chebyshev节点
- 分段低阶插值函数（分段线性函数，分段Hermite，分段spline函数等）

带权内积

Definition 2.0.1

若定义在$[a, b]$上的函数$\rho(x)$满足

- $\rho \geq 0, a \leq x \leq b$
- $\int_a^b \rho|x|^{<}\infty, n = 0, 1, \cdots$
- $\forall f \geq 0$, 若 $\int_a^b \rho f = 0$, 则 $f \equiv 0$

称$\rho(x)$为定义在$[a, b]$上的**权函数**

Example 2.0.2

$(1).\rho(x) = 1, x \in [0, 1]$
$(2).\rho(x) = e^{-x^2}, x \in (-\infty, \infty)$
$(3).\rho(x) = 1/\sqrt{1 - x^2}, x \in (-1, 1)$

Definition 2.0.3

$f, g \in C([a,b])$，ρ为$[a,b]$上的权函数，令

$$(f,g) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx$$

此时(f,g)称为函数f和g在$[a,b]$上的以权为ρ带权内积

注意：内积的性质在矩阵论内积空间部分已有介绍

Theorem 2.0.1

- $(f,g) = (g,f)$
- $(\lambda f, g) = \lambda (f,g), \forall \lambda \in R$
- $(f_1 + f_2, g) = (f_1, g) + (f_2, g)$
- $(f,f) \geq 0$，且$(f,f) = 0 \ iff \ f = 0$

Definition 2.0.4

范数：

$$\|f\|^2 = (f,f) = \int_a^b \rho(x) |f(x)|^2 dx$$

Theorem 2.0.2

- $|(f,g)| \le \|f\|\|g\|$
- $\|f+g\| \le \|f\| + \|g\|$
- $\|f+g\|^2 + \|f-g\|^2 = 2(\|f\|^2 + \|g\|^2)$

Definition 2.0.5

$(f,g)=0$, 则称f与g正交

Definition 2.0.6

假设函数列$\{\phi_k\}_{k=1}^n \subset C([a,b])$,若

$$\sum_{i=1}^n c_i\phi_i(x) = 0 \Leftrightarrow c_k = 0, k = 1, \cdots, n$$

则称 $\{\phi_i\}_{i=1}^n$线性无关，否则线性相关。

Definition 2.0.7

定义

$$span\{\phi_1, \phi_2, \cdots, \phi_n\} := \{\sum_{i=1}^{n} c_i\phi_i, \forall c_i \in R, 1 \leq i \leq n\}$$

Theorem 2.0.3

$\{\phi_k\}_{k=1}^{n}$线性当且仅当 $det\left([(\phi_1, \phi_j)]_{1\leq i\leq n, 1\leq j\leq n}\right) \neq 0$

最佳二次（平方）逼近

- 请回忆矩阵论中最佳二次逼近问题
- 设$f \in C([a,b])$, 求出一个n多项式$s_n^*(x)$,使得

$$\|f(x) - s_n^*\| = \min_{\forall p_n \in P_n} \|f(x) - p_n(x)\|$$

- 设$f \in C([a,b])$, 求出一个$s_n^*(x) \in span\{\phi_1, \cdots, \phi_n\}$,使得

$$\|f(x) - s_n^*\| = \min_{\forall p_n \in span\{\phi_1, \cdots, \phi_n\}} \|f(x) - p_n(x)\|$$

设$s_n^*(x)=\sum_{i=1}^n \alpha_i\phi_i(x)$, 则

$$R_n(\alpha_1,\cdots,\alpha_n)=\|f-s_n^*\|^2=\int_a^b \rho(x)\left(f(x)-\sum_{i=1}^n \alpha_i\phi_i(x)\right)^2 dx$$

$$\Rightarrow \frac{\partial R_n}{\partial \alpha_i}=0, 1\le i\le n$$

$$\Rightarrow (f,\phi_k)=\sum_{i=1}^n \alpha_i(\phi_i,\phi_k), 1\le k\le n$$

即

$$\begin{pmatrix} (\phi_1,\phi_1) & \cdots & (\phi_n,\phi_1) \\ (\phi_1,\phi_2) & \cdots & (\phi_n,\phi_2) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ (\phi_1,\phi_n) & \cdots & (\phi_n,\phi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,\phi_1) \\ (f,\phi_2) \\ \vdots \\ (f,\phi_n) \end{pmatrix}$$

记为 $A\alpha=F$

Theorem 2.0.4

若 α满足上述线性方程， 则 $s_n^*(x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \phi_i(x)$为最佳二次逼近.此时误差:

$$\|f - s^*\|^2 = \|f\|^2 - (f, s^*)$$

Example 2.0.8

- 设$\rho = 1$, $\phi_i = x^i, 0 \leq i \leq n$, 求$f$在$span\{\phi_0, \phi_1, \cdots, \phi_n\}$上的最佳二次逼近。
- 设$f(x) = \sqrt{x}, n = 1$

上述方法的缺点： 需要求A^{-1} ， 若A的尺度比较大或者病态矩阵，则求拟不是一个好的选择。

正交多项式

Definition 2.0.9

g_n为$[a,b]$上的n阶多项式， $n=0,1,\cdots,$ 若

$$(g_i,g_j)=\begin{cases}A_i(\neq 0), i=j\\ 0, i\neq j\end{cases}$$

则称$\{g_n\}$为$[a,b]$上的正交多项式

Theorem 2.0.5

$\{g_n, n=0,1,\cdots\}$为$[a,b]$上的正交多项式当且仅当对任意$k=1,\cdots,$

$$(g_k,p_j)=0$$

, 这里$p_j(x)$是$[a,b]$上任意不超过$k-1$阶的多项式

Theorem 2.0.6

- $\{g_n\}$线性无关
- g_n的有n个互异零点且属于(a, b)
- 若g_n首项为一，则

$$g_{n+1} = (x - B_n)g_n - C_n g_{n-1}$$

，这里 $B_n = \dfrac{(xg_n, g_n)}{(g_n, g_n)}$; $C_n = \dfrac{(g_n, g_n)}{(g_{n-1}, g_{n-1})}$

Legendre多项式和Chebyshev多项式

	$[a,b]$	ρ	$P_0(x)$	$P_n(x)$
Legendre多项式	$[-1,1]$	1	1	$\frac{n!}{(2n)!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$
Chevbyshev多项式	$[-1,1]$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	1	$\cos(n \arccos(x))$

若$\{\phi_n\}$为$[a,b]$上的正交多项式，则由最佳二次多项式的充要条件

$$\begin{pmatrix} (\phi_1,\phi_1) & \cdots & (\phi_n,\phi_1) \\ (\phi_1,\phi_2) & \cdots & (\phi_n,\phi_2) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ (\phi_1,\phi_n) & \cdots & (\phi_n,\phi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,\phi_1) \\ (f,\phi_2) \\ \vdots \\ (f,\phi_n) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \alpha_i = \frac{(f,\phi_i)}{(\phi_i,\phi_i)}, i = 1,\cdots,n$$

曲线拟合的最小二乘法

离散条件下的最佳平方逼近问题： 给定数据$(x_i, y_i), 1 \le i \le n$,
选取线性无关的函数组$\{\phi_i\}_{i=1}^m$ 以及权函数$w(x)$, 要求找到函数

$$\phi^*(x) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi_i(x) \in \Phi := span\{\phi_1, \cdots, \phi_m\}$$

使得

$$\sum_{i=1}^{n} w(x_i)\left(y_i - \phi^*(x_i)\right)^2$$

$$= \min I(\alpha_1, \cdots, \alpha_m) := \min_{\forall \phi \in \Phi} \sum_{i=1}^{n} w(x_i)\left(f(x_i) - \phi(x_i)\right)^2$$

Definition 2.0.10

设函数$f(x)$, $g(x)$; 已知$(x_i, f(x_i))$和$(x_i, g(x_i))$, $i = 1, \cdots, n$, 定义f和g的带权$w(x)$内积:

$$(f, g) = \sum_{i=1}^{n} w(x_i) f(x_i) g(x_i)$$

利用

$$I = (f - \phi, f - \phi),$$

$$\frac{\partial I}{\partial \alpha_j} = 0 \Rightarrow (f, \phi_j) = \sum_{j=1}^{m} \alpha_i (\phi_j, \phi_i), 1 \le j \le m$$

即

$$\begin{pmatrix} (\phi_1,\phi_1) & \cdots & (\phi_m,\phi_1) \\ (\phi_1,\phi_2) & \cdots & (\phi_m,\phi_2) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ (\phi_1,\phi_m) & \cdots & (\phi_m,\phi_m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,\phi_1) \\ (f,\phi_2) \\ \vdots \\ (f,\phi_m) \end{pmatrix}$$

(与积分格式下最佳二次逼近的系数方程一样,称为正规方程)

$$\Leftrightarrow A^T W A\alpha = A^T W Y$$

这里

$$A = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_1(x_n) \\ \phi_2(x_1) & \cdots & \phi_2(x_n) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \phi_m(x_1) & \cdots & \phi_m(x_n) \end{pmatrix}_{m\times n}$$

和$\alpha = (\alpha_1, \cdots, \alpha_m)^T, Y = (f(x_1), \cdots, f(x_m))^T, W = (w(x_1), \cdots, w(x_n))^T$

Theorem 2.0.7

$$A^T WA\alpha = A^T WY$$

的解α是最佳平方逼近函数$\phi^* \in \Phi$的系数, 即

$$\phi^*(x) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi_i(x)$$

此时，误差

$$R = \|f - \phi^*\|^2 = (f, f) - (f, \phi^*)$$

Example 2.0.11

多项式的最佳逼近，即$\phi_i(x) = x^i, 0 \le i \le m$.
此时

$$(\phi_i, \phi_j) = \sum_{l=1}^{n} w(x_l) x_l^{i+j};\ (f, \phi_i) = \sum_{l=1}^{n} w(x_l) f(x_l) x_l^i$$

注意：

$$A^T WA\alpha = A^T WY$$

的求解可以利用矩阵论的知识 $AY = b$ 不相容，则$Y = A^+ b$是最佳二乘解。 此时考虑A列或者行的线性无关性，化简公式

$$A^+ = C^H(CC^H)^{-1}(B^H B)^{-1}B^H$$

Example 2.0.12

exe3.4,3.5,3.6

正交多项式的最佳二次逼近

若$\{\phi_i\}_{i=1}^m$是正交多项式，即

$$(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} A_i, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases}$$

，则由最佳二次逼近的系数方程知

$$\alpha_i = \frac{(f, \phi_i)}{(\phi_i, \phi_i)}, i = 1, \cdots, m$$

此时，最佳二次逼近函数为

$$\phi^*(x) = \sum_{i=1}^{m} \frac{(f, \phi_i)}{(\alpha_i, \alpha_i)} \phi_i(x)$$

误差估计： 设$f = (f(x_1), \cdots, f(x_n))^T \in R^n$,
$\phi^* = (\phi^*(x_1), \cdots, \phi^*(x_n))^T \in R^n$,则误差

$$R^2 = \|f - \phi^*\|^2 = (f - \phi^*, f)$$

正交多项式的推导

- 设$\Phi = \{1, x, x^2, \cdots, x^n, \cdots\}$，如何推导相应的正交多项式
- 利用正交多项式的递推公式

$$g_{n+1} = (x - B_n)g_n - C_n g_{n-1}$$

，这里 $C_n = \dfrac{(xg_n, g_n)}{(g_{n-1}, g_{n-1})}$; $B_n = \dfrac{(g_n, g_n)}{(g_{n-1}, g_{n-1})}$

数值积分

数值积分问题： 已知定义在$[a,b]$上的函数$f(x)$，求$\{x_i, A_i\}_{i=0}^n$,其中$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$, $A_i \in R, 0 \le i \le n$ 使得

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$$

此时$I_n(f) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$称为积分公式

思路：

- 考虑已知$\{x_i\}$(如取等距节点$x_i = a + ih, h = (b-a)/2$),令$f(x) = x^i, 0 \le i \le n$时上式精确成立。
- 考虑插值多项式
- 考虑$\{x_i\}$未知，此时有$(2n+2)$个未知数$\{x_i, A_i\}_{i=0}^n$，令$f(x) = x^i, 0 \le i \le 2n+1$时积分公式精确成立

设积分公式 $\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 对 $f(x) = x^i, 0 \le i \le n$ 成立，即

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b-a \\ \frac{1}{2}(b^2-a^2) \\ \vdots \\ \frac{1}{n+1}(b^{n+1}-a^{n+1}) \end{pmatrix}$$

若$\{x_i\}_{i=0}^n$互异，则上式有唯一解，并确定出积分公式 $I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 对 $f(x) = x^i, 0 \le i \le n$ 精确成立，此时我们称积分公式的代数精度为n.

梯形公式和Simpson公式

- 梯形公式： 令 $x_0 = a, x_1 = b$, 此时

$$I_n(f) = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b))$$

代数精度=2

- Simpson公式，令$x_0 = a, x_1 = (a+b)/2, x_2 = b$,此时

$$I_n(f) = \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b))$$

代数精度=3

插值型求积公式

设$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} l_i(x)f(x_i)$为$n$阶Lagrange插值公式，依此定义$n$阶代数精度的插值型积分公式

$$\int_a^b L_n(x)dx=\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

这里 $A_i=\int_a^b l_i(x)dx, 0\leq i\leq n.$
此时余项

$$R_n(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx$$

这里$\omega_{n+1}(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i), \xi\in(a,b).$

Theorem 3.0.1

求积公式$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$的代数精度至少为$n$的充要条件时该求积公式为插值型求积公式。

Example 3.0.1

求

$$I(f) = \int_0^3 f(x)dx$$

3阶代数精度的求积公式.

求积公式的收敛性与稳定性

Definition 3.0.2

- 若
$$\lim_{n\to\infty} I_n(f) = I(f)$$
称求积公式$I_n(f)$收敛
- 若 $\tilde{f}(x_i) = f(x_i) + \delta_i, 0 \le i \le n$, 对$\forall\epsilon > 0$， 当 $\delta = \max\limits_{0\le i\le n} |\delta_i|$充分小时, 有 $|I_n(f) - I_n(\tilde{f})| < \epsilon$,称积分公式$I_n(f)$是稳定的

Theorem 3.0.2

积分公式$I_n(f) = \sum\limits_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$中，若$A_i > 0, 0 \le i \le n$， 则$I_n(f)$稳定.

Newton-Cotes 积分公式

令$x_i = a + ih, 0 \le i \le n, h = (b-a)/n$, 此时所构造出来的插值积分公式称为Newton-Cotes 积分公式

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

这里

$$A_i = \frac{(-1)^{n-i}}{n \cdot i!(n-i)!} \int_0^n \prod_{j=0}^{n} (t-j) dt$$

缺点：不稳定 (A_i不全为正)

Theorem 3.0.3

当$n = 2k, k \in N$,*Newton-Cotes*公式至少有$(2k+1)$阶代数精度.

Example 3.0.3

根据f的条件，构造相应的积分公式并判断误差

- f在$[a, b]$有2阶连续导数
- $f^{(4)}$在$[a, b]$存在且连续

Newton-Cotes公式：

- 不稳定， 对于某些函数，如 $f(x) = 1/(1+x)$，积分公式不收敛
- 解决思路：将区间$[a, b]$分段，每一段用低阶Newton-Cotes公式

(等距节点)复化求积公式

- 复化梯形公式:

$$I_n(f) = \frac{h}{2}(f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b))$$

$$R_n(f) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi)$$

- 复化Simpson公式

$$I_n(f) = \frac{h}{6}\left(f(a) + 4\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{i+1/2}) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\right)$$

$$R_n(f) = -\frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4 f^{(4)}(\xi)$$

Example 3.0.4

利用复化梯形公式与复化Simpson公式求

$$I(f) = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$$

并分析误差。

Romberg 算法

$$I_1(f) = \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))$$

可以证明：

$$I_{2^n}(f) = I_{2^{n-1}}(f) + \frac{b-a}{2^n}\sum_{i=1}^{2^{n-1}} f\left(a+(2i-1)\frac{b-a}{2^n}\right)$$

(Romberg 算法)

Gauss型求积公式

Definition 3.0.5

若不限定$\{x_i\}_{i=1}^n$,为求$\{x_i, A_i\}_{i=0}^n$,此时需要$(2n+2)$个方程。 令

$$I(f) = \int_a^b \rho(x) f(x) dx$$

求积公式

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$$

若$I_n(f) = I(f)$,当 $f(x) = x^i, 0 \leq i \leq 2n+1$，则$I_n(f)$称为Gauss型积分公式，$\{x_i\}_{i=0}^n$称为Gauss点，此时积分公式的代数精度为$(2n+1)$(相应$(n+1)$点的插值积分公式的代数精度仅为$n$)

Theorem 3.0.4

$\{x_i\}_{i=0}^n$为积分公式$I_n(f)$的$Gauss$点当且仅当

$$\int_a^b \rho(x)P(x)\omega_{n+1}(x)dx = 0$$

其中$P(x)$为任意阶数不超过n的多项式，$\omega_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j)$

Corollary 3.0.6

$\{\phi_i\}$是$[a, b]$上带权ρ的正交多项式函数列，此时$Gauss$型积分公式$I_n(f)$的$Gauss$点即为$\phi_{n+1}(x)$在$[a, b]$上的零点。

Gauss型求积公式的推导:

- 利用正交多项式推导出Gauss点$\{x_i\}_{i=0}^n$
- 利用Lagrange积分公式计算$A_i = \int_a^b l_i(x)dx$

Example 3.0.7

求

$$I(f) = \int_0^1 f(x)dx$$

的两点Gauss积分公式

常用Gauss型求积公式

- Gauss-Legendre 公式: Legendre 多项式 $([-1,1],\rho=1)$

$$P_0=1, P_1=x, P_{n+1}=\frac{2n+1}{n+1}P_n(x)-\frac{n}{n+1}P_{n-1}(x)$$

n	节点数	x_k	A_k	代数精度
1	2	$\pm 1/\sqrt{3}$	1	3
2	3	$\pm\sqrt{3/5}$	5/9	5
		0	8/9	

Table: Gauss-Legendre 求积公式

Example 3.0.8

计算$\int_1^5 f(x)dx$,要求有5阶代数精度

- Gauss-Chebyshev 积分公式($(-1,1), \rho = 1/\sqrt{1-x^2}$)

$$T_0 = 1,\ T_1 = x,\ T_{n+1} = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

Gauss 点：$\quad x_i = \cos\frac{2i+1}{2(n+1)\pi}, i = 0, \cdots, n$

积分系数:$A_i = \dfrac{\pi}{n+1}$

Theorem 3.0.5

- 若f在$[a,b]$上有$(2(n+1))$可导,则*Gauss*型求积公式的误差为

$$R(f)=\frac{f^{2(n+1)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}^2(x)dx,\eta\in(a,b)$$

- *Gauss*型求积公式是稳定的
- 若$f\in C([a,b])$，则*Gauss*型求积公式收敛

证明：略

Example 3.0.9

- Gauss-Legendre公式，当$n=1$时的误差
- Gauss-Chebyshev公式，当$n=1$时的误差

4. ODE 问题的数值求解

常微分（ordinary differential equation）问题:

$$\begin{cases} y(x)' = f(x, y(x)) \\ y(a) = y_0 \end{cases}, x \in [a, b]$$

通常假设f满足Lipschtz条件

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq L|y_1 - y_2|$$

求解的基本思想

- 微分近似
- 积分近似
- Taylor 展式

Euler Scheme

设$x_n = a + nh, h = (b - a)/n$

- forward Euler (显式格式):

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

- backward Euler（隐式格式）:

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

- 梯形公式:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}))$$

隐式格式的实现

Algorithm for BE:

1. initial guess : $y_{n+1}^{(0)}$
2. while $|y_n^{(k+1)} - y_n^{(k)}| > \epsilon$, do 3, 4
3. $y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)})$
4. $k = k + 1$
5. $y_{n+1} = y_{n+1}^{(k+1)}$

收敛性(压缩映射定理): if $hl < 1$,then

$$|y_{n+1}^{(k+1)} - y_{n+1}^{(k)}| \leq (hL)^k |y_{n+1}^{(1)} - y_{n+1}^{(0)}| \to 0, k \to \infty$$

改进的隐格式

- 改进的向后Euler：

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n),$$

- 改进的梯形公式：

$$\bar{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)(\text{ 预测})$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1}))(\text{ 校正 })$$

误差与计算精度

Definition 4.0.1

- 局部误差指的是scheme中一步的误差，以Forward Euler为例:

$$\epsilon_l = y(x_{n+1}) - y(x_n) - hf(x_n, y(x_n))$$

- 全局误差指的是scheme算到最后的y_{n+1}时的累积误差，以Forward Euler 为例

$$\epsilon = y(x_{n+1}) - y(x_n) - hf(x_n, y_n)$$

- 若scheme $\epsilon_l = O(h^{p+1})$,则称该scheme有p阶精度

Example 4.0.2

求证梯形公式的精度$p = 2$, 向前向后Euler的精度$p = 1$

Runge-Kutta方法

由$y' = f(x,y)$，知道$f(x,y)$是函数$y = y(x)$在x的切线斜率。故$f(x_{n+1}, y_{n+1})$是$y = y(x)$在$x = x_{n+1}$的切线斜率.但是在计算中y_{n+1}不知道，因此可以考虑

$$f(x_{n+1}, y_{n+1}) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i k_i$$

这里$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i = 1$,

$$k_1 = f(x_n, y_n), k_i = f(x_n + \lambda_i h, y_n + \lambda_i h k_{i-1}), i = 2, \cdots, m$$

$\lambda_i \in [0,1]$. 此时考虑选取合适的$\{\alpha_i, \lambda_i\}_{i=2}^{m}$使得格式

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i k_i$$

尽可能精确。 可以证明，这种条件下不同m推导的scheme的局部精度不会超过m阶，甚至小于m

(2级)2阶R-K公式

设$f_n = f(x_n, y_n)$

- 中点公式：$\lambda_2 = 1/2, \alpha_1 = 0, \alpha_2 = 1$

$$y_{n+1} = y_n + h[f(x_n + h/2, y_n + hf_n/2)]$$

- Heun公式：$\lambda_2 = 2/3, \alpha_1 = 1/4, \alpha_2 = 3/4$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{4}[f_n + 3f(x_n + 2h/3, y_n + 2hf_n/3)]$$

- $\lambda_2 = 1, \alpha_1 = 1/2, \alpha_2 = 1/2$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[k_1 + f(x_n + h, y_n + hf_n)]$$

经典（4级）4阶Runge-Kutta公式

$$
\begin{cases}
y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\
k_1 = f(x_n, y_n) \\
k_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1) \\
k_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2) \\
k_4 = f(x_n + h, y_n + hk_3)
\end{cases}
$$

Example 4.0.3

$$y' = 1 - \frac{2xy}{1+x^2}, y(0) = 0, 0 \le x \le 2$$

单步法的收敛性与稳定性

Definition 4.0.4
设格式 $y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n, y_n, h)$, $x_n = a + nh, h = (b-a)/n$ 若

$$\lim_{h\to 0} y_n = y(x_n)$$

称该格式**收敛**

Theorem 4.0.1
设单步法格式具有p阶精度，且

- ϕ对于y满足$Lipschtz$条件

$$|\phi(x,y,h) - \phi(x,\bar{y},h)| \leq L|y-\bar{y}|$$

- 初始值精确 $y_0 = y(a)$

则该单步法收敛，并且全局误差$e_n = |y(x_n) - y_n| = O(h^p)$

Corollary 4.0.5

高精度格式仅需提高局部精度

Example 4.0.6

分析

- 向前Euler格式
- 改进的Euler格式

的收敛性。

Corollary 4.0.7

若 $f(x, y(x)) = \phi(x, y(x), 0)$,则单步法格式的局部精度$p = 2$

Definition 4.0.8
显式单步法

$$y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n, y_n; h)$$

满足条件

$$y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n, y_n; h)$$

与ODE

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

相容

Theorem 4.0.2

- 显式单步法相容$\Leftrightarrow$单步法具有p阶精度
- 显式单步法的增量函数$\phi(x, y; h)$对y满足*Lipschitz*条件，则单步法相容$\Leftrightarrow$ 单步法收敛

稳定性

- 单步法

$$y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n, y_n; h)$$

，设y_n为单步法的精确解，$\bar{y}_n$是带着舍入误差的值，则为了使舍入误差不增长，

$$\frac{|y_{n+1} - \bar{y}_{n+1}|}{|y_n - \bar{y}_n|} \leq 1$$

Definition 4.0.9

设单步法

$$y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n, y_n; h)$$

求

$$y' = \lambda y, (\lambda \in C, Re(\lambda) < 0)$$

得到的解，

$$y_{n+1} = E(\lambda h) y_n,$$

若 $|E(\lambda h)| < 1$, 则称单步法绝对稳定

Definition 4.0.10

$$y' = \lambda y, (\lambda \in C, Re(\lambda) < 0)$$

称为模型方程

Example 4.0.11

求向前Euler法和改进的梯度法的绝对收敛区域和λ的范围

矩阵范数

Definition 5.0.1

设矩阵$A=[a_{ij}]_{n\times n}$，则有下列矩阵范数的定义：

- 矩阵的行范：

$$\|A\|_\infty=\max_{1\leq i\leq n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$

- 矩阵的列范：

$$\|A\|_1=\max_{1\leq j\leq n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$$

- 矩阵的2范：

$$\|A\|_2=\sqrt{\lambda_{max}(A^TA)}$$

- 矩阵的F范：

$$\|A\|_F=\sqrt{\sum_{i,j=1}^{n}a_{ij}^2}$$

线性方程组的解法:Gauss消元法

考虑线性方程组

$$Ax = b, A \in R^{n\times n}, x \in R^n, b \in R^n$$

Idea： 利用初等行变换，使得

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n-1} & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n-1}^{(1)} & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

- 利用上三角阵的性质，求出$x_n \to x_{n-1} \to \cdots \to x_1$
- Gauss消元法成立的充要条件为 $a_{ii}^{(i-1)} \neq 0, 1 \leq i \leq n$
- 计算复杂度(乘除法的次数): $\frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$

Example 5.0.2

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

Example 5.0.3

$$\begin{cases} 10^{-4}x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

Q: 如何使上述例子的解准确?
Ans: 主元消去法: 每一步行变换之后，作行交换，使得相应的主元$a_{ii}^{(i-1)}$最大

LU 分解与 Cholesky分解

Idea：

- LU分解， $A = LU$,其中L和U分别为下三角阵和上三角阵，且L的对角线为1
- Cholesky 分解： $A = LDL^T$,其中L为单位下三角阵， D为对角阵

误差分析

Definition 5.0.4

$\|A^{-1}\|\|A\|$称为A的条件数，记为 $cond(A)$

- b有(舍入)误差δb, 此时方程变为

$$A(x+\delta x) = b+\delta b$$

则

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le cond(A)\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

- A有(舍入)误差δA, 此时方程变为

$$(A+\delta A)x = b$$

则

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{cond(A)\|\delta A\|/\|A\|}{1-cond(A)\|\delta A\|/\|A\|}$$

迭代法：Jacobi迭代

Example 5.0.5

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 = 7 \\ -x_1 + 4x_2 = 5 \end{cases}$$

Jacobi迭代法：

1. $A = L + D + U$, L和U分别为A的主对角线下部和上部的元构成的矩阵，D为对角阵，其对角元素为A的主对角元
2. $x = -D^{-1}(L+U)x + D^{-1}b$
3. $x^{(k+1)} = -D^{-1}(L+U)x^{(k)} + D^{-1}b$

Gauss-Seidel迭代法

Jacobi的改进，即在利用$x^{(k)}$更新
$x^{(k+1)} = [x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \cdots, x_n^{(k+1)}]^T$ 时，希望利用已求出的$x_i^{(k+1)}$逐步更新

1. $A = L + D + U$
2. $Dx = b - Lx - Ux$
3. $D{\color{red}x^{(k+1)}} = b - L{\color{red}x^{(k+1)}} - Ux^{(k)}$
4. $x^{(k+1)} = (D + L)^{-1}(b - Ux^{(k)})$

迭代法的收敛分析

Theorem 5.0.1
假设迭代格式

$$x = Bx + F$$

该格式收敛当且仅当

$$\lim_{k\to\infty} B^k = 0$$

Definition 5.0.6
设矩阵$A \in R^{n\times n}$的特征根为$\{\lambda_i\}_{i=1}^n$, 则定义

$$\rho(A) := \max_{1\le i\le n}\{|\lambda_i|\}$$

为A的谱半径。

Theorem 5.0.2

$$\lim_{k\to\infty} B^k = 0$$

当且仅当$\rho(B) < 1$

Theorem 5.0.3

迭代格式

$$x_{k+1} = Bx_k + F$$

$x^* = Bx^* + F$, 则 $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = x^*$当且仅当$\rho(B) < 1$

Example 5.0.7

Ex:6.14,6.15

Corollary 5.0.8

事实上:

$$\|x_k - x^*\| \approx \rho(B)^k \|x_0 - x^*\|$$

若

$$\frac{\|x_k - x^*\|}{\|x_0 - x^*\|} < \epsilon$$

则

$$k > \frac{\ln(\epsilon)}{\ln(\rho(B))}$$

$-\ln(\rho(B))$称为迭代速度

非线性方程（组）的数值解法：二分法

Q: 设函数$f(x)$在$[a,b]$上连续，求$f(x)=0$的解

Ans: 二分法

- $[a_1,b_1]\supset[a_2,b_2]\supset\cdots\supset[a_k,b_k]$'
- $f(a_k)f(b_k)<0$
- $b_k-a_k=\frac{1}{2^{k-1}}(b-a), x_k=\frac{a_k+b_k}{2}$
- $|x^*-x_k|\leq\frac{b-a}{2^k}$

缺点： 收敛速度很慢

迭代格式

Idea: 求方程$f(x)=0$, 确定函数ϕ使得$x=\phi(x)$, 此时迭代格式为$x_{k+1}=\phi(x_k)$

Example 6.0.1

$f(x)=x^3+4x^2-10$,求$f(x)=0$的根

- Q: 如何构造ϕ?
- Ans: 要求$|\phi'(x)|<1$,且$|\phi'(x)|$越小，收敛越快

Theorem 6.0.1

设函数$\phi(x)$满足

- $\forall x\in[a,b], a\le\phi(x)\le b$
- $\exists L\in[0,1)$,使得$|\phi'(x)|\le L,\forall x\in[a,b]$

则$x=\phi(x)$在(a,b)上由唯一解x^*，且对任意初始值$x_0\in[a,b]$,均有$x_k\to x^*,k\to\infty$,这里$x^*=\phi(x^*)$

Corollary 6.0.2

上述定理中，误差

$$|x_k - x^*| \le \frac{1}{1-L}|x_{k+1} - x_k|$$

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

Example 6.0.3

求$f(x) = x^3 - x - 1 = 0$在$x = 1.5$附近的根

Example 6.0.4

求$f(x) = e^x - x - 2 = 0$的迭代格式

局部收敛性

Definition 6.0.5
若存在$I=\{x:|x-x^*|<\delta\}$, 使得对任意的$\forall x_0 \in I$,迭代$x_{k+1}=\phi(x_k)$ 收敛，则称该格式具有局部收敛性

Definition 6.0.6
设$\lim\limits_{k\to\infty} x_k = x^*$, 定义误差$e_k=|x_k-x^*|$, 若

$$\lim_{k\to\infty}\frac{e_{k+1}}{e_k^p}=M\neq 0$$

称$\{x_k\}$具有p阶收敛

迭代法加速

- 若迭代法具有线性收敛率，即$\lim_{k\to\infty}\frac{e_{k+1}}{e_k}=M\neq 0$
- $$\frac{x^*-x_{k+2}}{x^*-x_{k+1}}\approx\frac{x^*-x_{k+1}}{x^*-x_k}\Rightarrow x_{k+1}=x_k-\frac{(x_{k+1}-x_k)^2}{x_{k+2}-2x_{k+1}+x_k}$$
- 该收敛法比$\{x_k\}$收敛速度快

Newton迭代法

Idea： 利用曲线$y=f(x)$的切线与x轴的交点去逼近$f(x)=0$的解（用切线代替曲线$y=f(x)$）

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

算法要求：初始值x_0要在$f(x)=0$的根附近（利用局部收敛性）

Theorem 6.0.2

$f(x^*)=0$

- f在x^*附近二阶可导
- $f'(x^*)\neq 0$

则$x_k\to x^*, k\to\infty$ 收敛率为2阶

Example 6.0.7

求方程$xe^x-1=0$的根

Example 6.0.8

求$\sqrt{2}$

Newton下山法

原因： Newton法需要利用局部收敛性，即初始值x_0要在真解x^*附近。如果不是，需要利用下山法： 选定$\lambda \in (0, 1]$

- $$\bar{x}_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$
- $$x_{k+1} = \lambda \bar{x}_{k+1} + (1 - \lambda) x_k$$

事实上，选取合适的λ，可以使迭代格式收敛，二不需要担心局部收敛性

Example 6.0.9

考虑 $f(x) = x^3 - x - 1 = 0$, 利用下山Newton迭代法求解。

Newton弦截法

Idea：利用线性Newton插值法替代$f(x)$求零点

$$0 = N(x) = f(x_k) + f[x_k, x_{k-1}](x - x_k)$$

$$\Rightarrow \text{Newton弦截法：} \quad x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f[x_k, x_{k-1}]}$$

优点：　无需求导$f'(x_k)$

Theorem 6.0.3

*Newton*弦截法的收敛率$p \geq \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618$

Example 6.0.10

求方程$xe^x - 1 = 0$的解

Muller 抛物线法

Idea：利用二阶Newton插值法替代$f(x)$求零点

$$N(x) = f(x_k) + f[x_k, x_{k-1}](x - x_k) + f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}](x - x_k)(x - x_{k-1})$$

由$N(x) = 0$

$$\Rightarrow \text{Muller 抛物线法：} \quad x_{k+1} = x_k - \frac{2f(x_k)}{\omega \pm \sqrt{\omega - 4f(x_k)f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}]}}$$

这里

$$\omega = f[x_k, x_{k-1}] - f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}](x_k - x_k)$$

可以证明Muller法的收敛阶$p \approx 1.839$

非线性方程组的Newton解法

Q:非线性方程组

$$\begin{cases} f_1(x_1,\cdots,x_n)=0 \\ f_2(x_1,\cdots,x_n)=0 \\ \cdots \\ f_n(x_1,\cdots,x_n)=0 \end{cases}$$

简记为

$$\mathbf{F}(\mathbf{x})=0$$

Newton迭代法

$$\mathbf{x}_{k+1}=\mathbf{x}_k-[\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)]^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$$

这里

$$\mathbf{F}'(\mathbf{x})=\begin{pmatrix} \partial f_1/\partial x_1 & \cdots & \partial f_1/\partial x_n \\ \partial f_2/\partial x_1 & \cdots & \partial f_2/\partial x_n \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \partial f_n/\partial x_1 & \cdots & \partial f_n/\partial x_n \end{pmatrix}$$

是**F**的Jacobi矩阵

Example 6.0.11

求下列非线性方程组的解$\mathbf{x} = [x_1, x_2]^T$

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3 = 0 \\ 2x_1^2 + x_2^2 - 5 = 0 \end{cases}$$