

高等数值分析
Advanced Numerical Analysis

Dait

目 录

第一章 数学基础知识	1
1.1 线性空间	1
1.1.1 线性空间	1
1.1.2 线性空间的基和维度	1
1.2 范数	2
1.2.1 度量空间	2
1.2.2 赋范空间与范数	3
1.2.3 范数的等价性	5
1.3 内积	5
1.4 矩阵空间	8
1.4.1 矩阵范数	8
1.4.2 算子范数	9
1.4.3 扰动定理	11
第二章 函数插值和重构	12
2.1 一维多项式插值	12
2.1.1 Lagrange 插值	12
2.1.2 Lagrange 插值的收敛性	14
2.1.3 Newton 插值公式	15
2.1.4 Hermite 插值	16
2.2 分段插值	17
2.2.1 分段线性插值	17
2.2.2 分段三次 Hermite 插值	18
2.3 Fourier 插值	19
第三章 函数逼近	21
3.1 最佳平方逼近	21
3.1.1 法方程	21
3.1.2 正交多项式	22
3.2 最小二乘法	23
3.3 最佳一致逼近	24

第四章 数值积分	26
4.1 Newton-Cotes 公式	27
4.1.1 闭型 Newton-Cotes 公式	27
4.1.2 开型 Newton-Cotes 公式	28
4.1.3 积分法的一致稳定性	28
4.2 复合求积公式	29
4.3 Romberg 求积方法	30
4.3.1 Euler-Maclaurin 求积公式	30
4.3.2 Richardson 外推方法	31
4.3.3 Romberg 求积方法	31
4.4 Gauss 求积公式	32

第一章 数学基础知识

1.1 线性空间

1.1.1 线性空间

定义 1.1.1: 线性空间

给定一个数域 \mathbb{F} (本笔记只涉及实数域 \mathbb{R} 和复数域 \mathbb{C}) 和一个集合 V , 定义加法 $+: V \times V \rightarrow V$ 满足:

- 结合律: $(a + b) + c = a + (b + c)$,
- 零元: $a + 0 = a$,
- 逆元: $a + (-a) = 0$,
- 交换律: $a + b = b + a$;

数乘 $\cdot: \mathbb{F} \times V \rightarrow V$ 满足:

- 单位元: $1a = a$,
- 结合律: $(\lambda\mu)a = \lambda(\mu a)$,
- 分配率 1: $(\lambda + \mu)a = \lambda a + \mu a$,
- 分配率 2: $\lambda(a + b) = \lambda a + \lambda b$.

则称 V 在 \mathbb{F} 上构成一个线性空间 (linear space).

例 1.1.1: 线性空间的例子

- $C^n[a, b]$: 全体在 $[a, b]$ 上 n 次导数连续 (continuous) 的函数构成的集合.
- $\mathcal{P}_n = \{a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n \mid a_i \in \mathbb{F}\}$: n 次多项式函数空间.

1.1.2 线性空间的基和维度

定义 1.1.2: 线性无关

设 V 是线性空间, 给定其中 n 个元素 $x_1, \dots, x_n \in V$, 若

$$a_1x_1 + \cdots + a_nx_n = 0, \iff a_1 = \cdots = a_n = 0, \quad (1.1)$$

则称 x_1, \dots, x_n 线性无关 (linear independent). 反之, 称为线性相关.

例 1.1.2: 线性无关的例子

- \mathcal{P}_n 中 $\{1, x, \dots, x^n\}$ 是线性无关的;
- 所有 $[-\pi, \pi]$ 上的周期函数构成的函数空间是线性空间, 其中

$$\{1, \cos x, \sin x, \dots, \cos nx, \sin nx\}$$

线性无关.

定义 1.1.3: 线性空间的基和维度

给定线性空间 V 中的一组元素 $\{x_1, \dots, x_n\}$, 若 $\forall x \in V$ 都可以被唯一表示为其线性组合

$$x = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n, \quad (1.2)$$

则称 $\{x_1, \dots, x_n\}$ 构成一组基 (base), 且 V 的维度 $\dim(V) = n$.

定理 1.1.1

线性空间的维度与基的选取没有关系.

例 1.1.3: 典型线性空间的维度

- $\dim(\mathcal{P}_n) = n$;
- $\dim(\mathcal{C}[a, b]) = +\infty$.

1.2 范数

1.2.1 度量空间

定义 1.2.1: 度量空间

给定集合 M , 若映射 $d: M \times M \rightarrow \mathbb{R}$ 满足:

- 正定性: $d(x, y) \geq 0$, 且 $d(x, y) = 0 \iff x = y$;
- 交换性: $d(x, y) = d(y, x)$;
- 三角不等式: $d(x, y) + d(y, z) \geq d(x, z)$.

则称 M 是一个度量空间 (metric space) 或距离空间, d 为度量函数或距离函数.

定义 1.2.2: Cauchy 序列

对于序列 $\{x_n\}$, 若 $\forall \varepsilon > 0, \exists N \in \mathbb{N}$ 满足:

$$d(x_m, x_n) < \varepsilon, \quad \forall m, n > N, \quad (1.3)$$

则称 $\{x_n\}$ 为 Cauchy 序列 (Cauchy sequence).

定义 1.2.3: 度量空间的完备性

若 \forall Cauchy 序列 $\{x_n\} \subset M$, $\exists x \in M$ 满足:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d(x_n, x) = 0, \iff \lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x,$$

则称度量空间 M 是完备的 (complete).

注. 不严谨地说, 完备性要求: 所有收敛的序列都会收敛到 M 中.

例 1.2.1: 实数公理

实数集 \mathbb{R} 中的度量函数 $d(a, b) = |a - b|$ 是完备的.

定理 1.2.1: 完备化定理

若 (M, d) 是一个度量空间, 则存在唯一等距同构的完备化空间.

证明. 构造性证明, 令 \tilde{M} 是 M 中所有 Cauchy 序列 $\tilde{x} = \{x_n\}$ 的集合. 在 \tilde{M} 中定义等价关系 \sim :

$$\tilde{x} \sim \tilde{y} \iff \lim_{n \rightarrow \infty} d(x_n, y_n) = 0.$$

令 $[\tilde{x}] = \{\tilde{y} \mid \tilde{x} \sim \tilde{y}\}$ 表示 \tilde{x} 的等价类, $\hat{M} = \{[\tilde{x}] \mid \tilde{x} \in \tilde{M}\}$ 是 M 中所有 Cauchy 序列的等价类构成的集合. 定义 \hat{M} 上的度量为

$$\hat{d}([\tilde{x}], [\tilde{y}]) := \lim_{n \rightarrow \infty} d(x_n, y_n),$$

可证 (\hat{M}, \hat{d}) 是完备的度量空间. 且存在等距嵌入

$$i : M \rightarrow \hat{M}, x \mapsto [\{x, x, \dots\}].$$

即 i 是映射到对应常数序列的等价类. □

1.2.2 赋范空间与范数**定义 1.2.4: 赋范空间与范数**

若映射 $\|\cdot\| : S \rightarrow \mathbb{R}$ 满足:

- 正定性: $\|f\| \geq 0$, 且 $\|f\| = 0 \iff f = 0$;
- 齐次性: $\|\lambda f\| = |\lambda| \|f\|$;
- 三角不等式: $\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\|$.

则称 $(S, \|\cdot\|)$ 构成一个赋范空间 (normed space), $\|\cdot\|$ 是 S 的范数 (norm).

推论. 显然, 赋范空间也是度量空间, 只需定义

$$d(f, g) = \|f - g\|,$$

注. 完备的赋范空间称为 Banach 空间.

例 1.2.2: \mathbb{R}^n 的范数

$x = (x_1, \dots, x_n)^\top \in \mathbb{F}^n$ 的 p -范数为

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p}.$$

如

$$\|x\|_\infty = \max_i |x_i|, \quad (1.4a)$$

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|, \quad (1.4b)$$

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{1/2}, \quad (1.4c)$$

证明. 下面给出 (1.4a) 的证明. 记 $k = \arg \max_i |x_i|$, $\forall p > 0$

$$|x_k|^p \leq \sum_{i=1}^n |x_i|^p \leq n |x_k|^p,$$

两边开 p 次方, 并 $p \rightarrow \infty$, 即得 $\|x\|_\infty = |x_k|$. □

例 1.2.3: $C[a, b]$ 的范数

$f(x) \in C[a, b]$ 的 p -范数为

$$\|f\|_p = \left(\int_a^b |f(x)|^p dx \right)^{1/p}.$$

如

$$\|f\|_\infty = \max_{a \leq x \leq b} |f(x)|, \quad (1.5a)$$

$$\|f\|_1 = \int_a^b |f(x)| dx, \quad (1.5b)$$

$$\|f\|_2 = \left(\int_a^b |f(x)|^2 dx \right)^{1/2}, \quad (1.5c)$$

$C[a, b]$ 中, $\|\cdot\|_\infty$ 是完备的, 而 $\|\cdot\|_1$ 不是.

1.2.3 范数的等价性

定义 1.2.5: 范数的等价性

给定线性空间 S 上的两个范数 $\|\cdot\|_\alpha, \|\cdot\|_\beta$, 若 $\exists C_1, C_2 > 0$ 满足:

$$C_1 \|x\|_\alpha \leq \|x\|_\beta \leq C_2 \|x\|_\alpha,$$

则称 $\|\cdot\|_\alpha, \|\cdot\|_\beta$ 等价 (equivalent).

定理 1.2.2

有限维线性空间中, 任意两个范数都是等价的.

1.3 内积

定义 1.3.1: 内积

给定线性空间 S , 内积 (inner product) 是一个映射 $\langle \cdot, \cdot \rangle : S \times S \rightarrow \mathbb{F}$, 满足:

- 正定性: $\langle x, x \rangle \geq 0$, 且 $\langle x, x \rangle = 0 \iff x = 0$;
- 交换共轭: $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$;
- 对第一个变量线性: $\langle ax + by, z \rangle = a \langle x, z \rangle + b \langle y, z \rangle$.

若 $\langle x, y \rangle = 0$, 则称 x, y 是正交的 (orthogonal).

内积诱导的范数:

$$\|x\|_2 := \sqrt{\langle x, x \rangle}, \quad (1.6)$$

例 1.3.1: 内积实例

\mathbb{R}^n 的内积为

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i,$$

$C[a, b]$ 的内积为

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) \overline{g(x)} dx.$$

定理 1.3.1: 内积空间线性无关的判定

给定内积空间 S , $x_1, \dots, x_n \in S$ 是线性无关的 \iff Gramm 矩阵满秩:

$$G_n = \begin{bmatrix} \langle x_1, x_1 \rangle & \cdots & \langle x_1, x_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle x_n, x_1 \rangle & \cdots & \langle x_n, x_n \rangle \end{bmatrix}, \quad (1.7)$$

即 $\det(G_n) \neq 0$.

证明. 设 $a = (a_1, \dots, a_n)$ 满足 $aG_n = 0$, 则 $\forall k = 1, \dots, n$

$$(aG_n)_k = a_1 \langle x_1, x_k \rangle + \dots + a_n \langle x_n, x_k \rangle = \langle a_1 x_1 + \dots, a_n x_n, x_k \rangle = 0,$$

特别地,

$$\langle a_1 x_1 + \dots + a_n x_n, a_1 x_1 + \dots + a_n x_n \rangle = 0, \iff a_1 x_1 + \dots, a_n x_n = 0,$$

则 $\det(G_n) \neq 0 \iff N(G_n^\top) = \{0\} \iff a$ 只有零解. □

例 1.3.2

给定内积空间 S 的一组基 $\{x_1, \dots, x_n\}$, 则 $\forall x \in S$ 均可以写成

$$x = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n,$$

下面计算 a_1, \dots, a_n . 两边分别与 x_i 做内积:

$$\langle x, x_i \rangle = a_1 \langle x_1, x_i \rangle + \dots + a_n \langle x_n, x_i \rangle,$$

即

$$[\langle x, x_1 \rangle \ \dots \ \langle x, x_n \rangle] = [a_1 \ \dots \ a_n] G_n,$$

若基是正交的, 即 $\forall i \neq j, \langle x_i, x_j \rangle = 0$, 则

$$a_i = \frac{\langle x, x_i \rangle}{\langle x_i, x_i \rangle}.$$

定理 1.3.2: Schmidt 正交化

设 x_1, \dots, x_n 是一组线性无关的基, 为得到一组正交基, 定义

$$y_i = x_i - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\langle x_i, y_j \rangle}{\langle y_j, y_j \rangle} y_j. \quad (1.8)$$

则 y_1, \dots, y_n 是正交的.

定义 1.3.2: 带权内积

设 $\rho \in \mathcal{C}(a, b)$ 是一个几乎处处为正¹的函数, 且

$$\int_a^b \rho(x) dx < +\infty,$$

定义内积

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)\rho(x) dx. \quad (1.9)$$

¹即 $\{x | \rho(x) \leq 0\}$ 的 Lebesgue 测度为 0.

定义 1.3.3: 正交多项式

已知 $\{1, x, \dots, x^n\}$ 是线性无关的. 考虑 $C[a, b]$ 上的带权内积, Schmidt 正交化得到一组多项式函数

$$\psi_0(x), \psi_1(x), \dots, \psi_n(x),$$

显然, $\deg(\psi_i) = i$.

例 1.3.3: Legendre 多项式

权函数 $\rho = 1$, 区间 $[-1, 1]$, 得到 Legendre 多项式

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n. \quad (1.10)$$

- 内积

$$\langle P_n, P_m \rangle = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}. \quad (1.11)$$

- 递归关系

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x). \quad (1.12)$$

- 奇偶性

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x). \quad (1.13)$$

例 1.3.4: Chebyshev 多项式

权函数 $\rho(x) = (1-x^2)^{-1/2}$, 区间 $[-1, 1]$, 得到 Chebyshev 多项式

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x). \quad (1.14)$$

- 内积

$$\langle T_n, T_n \rangle = \begin{cases} \pi, & n = 0 \\ \pi/2, & n \geq 1 \end{cases} \quad (1.15)$$

- 递推关系

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x). \quad (1.16)$$

- 奇偶性

$$T_n(-x) = (-1)^n T_n(x); \quad (1.17)$$

- T_n 的 n 个实单根为 $\cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right)$, $(n+1)$ 个极值点为 $\cos\left(\frac{k}{n}\pi\right)$

- 当 $|x| \geq 1$ 时,

$$T_n(x) = \frac{1}{2} \left[\left(x + \sqrt{x^2 - 1} \right)^k + \left(x - \sqrt{x^2 - 1} \right)^k \right]. \quad (1.18)$$

1.4 矩阵空间

1.4.1 矩阵范数

定义 1.4.1: 矩阵范数

矩阵空间上的范数 $\|\cdot\| : \mathbb{F}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ 若满足

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\|, \quad (1.19)$$

则 $\|\cdot\|$ 称为矩阵范数 (matrix norm).

例 1.4.1: Frobenius 范数

定义 Frobenius 范数

$$\|A\|_F := \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |A_{ij}|^2}. \quad (1.20)$$

是一个矩阵范数.

证明. 由 Cauchy-Schwarz 不等式

$$\begin{aligned} \|AB\|_F &= \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left| \sum_{k=1}^n A_{ik} B_{kj} \right|^2} \leq \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left(\sum_{k=1}^n |A_{ik}|^2 \sum_{k=1}^n |B_{kj}|^2 \right)} \\ &= \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n |A_{ik}|^2 \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n |B_{kj}|^2} = \|A\|_F \|B\|_F. \quad \square \end{aligned}$$

注意到

$$\operatorname{tr}(A^\dagger A) = \sum_{i=1}^n (A^\dagger A)_{ii} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{ij}^\dagger A_{ji} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |A_{ji}|^2.$$

故

$$\|A\|_F = \sqrt{\operatorname{tr}(A^\dagger A)} = \sqrt{\operatorname{tr}(AA^\dagger)}. \quad (1.21)$$

定义 1.4.2: 矩阵范数与向量范数的相容

给定矩阵范数 $\|\cdot\|_M$ 和向量范数 $\|\cdot\|_V$, 若 $\forall A \in \mathbb{F}^{n \times n}, x \in \mathbb{F}^n$

$$\|Ax\|_V \leq \|A\|_M \|x\|_V, \quad (1.22)$$

则称他们是相容的. 在不引起混淆的情况下, 可以略去下标.

定理 1.4.1

Frobenius 范数与向量 2 - 范数相容.

证明.

$$\|Ax\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left| \sum_{j=1}^n A_{ij}x_j \right|^2} \leq \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n |A_{ij}|^2 \sum_{j=1}^n |x_j|^2 \right)} = \|A\|_F \|x\|_2. \quad \square$$

1.4.2 算子范数

定义 1.4.3: 算子范数

定义矩阵的算子范数 (operate norm)

$$N : \mathbb{F}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}, \quad A \mapsto \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}. \quad (1.23)$$

称算子范数是该向量范数诱导出来的矩阵范数.

注. 注意 $N(I) = 1$. 故 Frobenius 范数不是算子范数.

定理 1.4.2

$N(\cdot)$ 是一个矩阵范数, 并与向量范数相容.

证明. 易得 $\forall x \neq 0, \|Ax\| \leq N(A) \|x\|$.

$$N(AB) = \sup_{x \neq 0} \frac{\|ABx\|}{\|x\|} \leq \sup_{x \neq 0} \frac{N(A) \|Bx\|}{\|x\|} = N(A)N(B). \quad \square$$

定义 1.4.4: 谱半径

矩阵 A 全体特征值的集合称为 A 的谱, 记作 $\sigma(A)$, 特征值模的最大值称为谱半径, 记作 $\rho(A)$.

例 1.4.2

设 $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$, 则 p -向量范数诱导出来的矩阵范数为:

$$\|A\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^n |A_{ij}|, \quad (1.24a)$$

$$\|A\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^n |A_{ij}|, \quad (1.24b)$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^\dagger A)}, \quad (1.24c)$$

证明. 先证明 (1.24b), 将 A 写作列向量的形式 (A_1, \dots, A_n) , 令 $k = \arg \max_j \|A_j\|_1$,

则 $\forall x \in \mathbb{F}^n$ 且 $\|x\|_1 = \sum_{j=1}^n |x_j| = 1$, 有

$$\|Ax\|_1 = \left\| \sum_{j=1}^n A_j x_j \right\|_1 \leq \sum_{j=1}^n |x_j| \|A_j\|_1 \leq \|A_k\|_1 \sum_{j=1}^n |x_j| = \|A_k\|_1 \|x\|_1 = \|A_k\|_1,$$

特别地, 取 $x = e_k$ 可使等号成立, 故

$$\|A\|_1 = \sup_{\|x\|_1=1} \|Ax\|_1 = \|A_k\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^n |A_{ij}|;$$

然后证明 (1.24a), 令 $k = \arg \max_i \sum_{j=1}^n |A_{ij}|$, $\forall x \in \mathbb{F}^n$ 且 $\|x\|_\infty = \max_j |x_j| = 1$, 有

$$\|Ax\|_\infty = \max_i \left| \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j \right| \leq \max_i \sum_{j=1}^n |A_{ij}| |x_j| \leq \max_i \sum_{j=1}^n |A_{ij}| \max_j |x_j| = \sum_{j=1}^n |A_{kj}|.$$

特别地, 取 $x_j = \text{sgn}(A_{kj})$ 可使等号成立, 故

$$\|A\|_\infty = \sup_{\|x\|_\infty=1} \|Ax\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^n |A_{ij}|;$$

最后证明 (1.24c), 由 2 - 范数的性质:

$$\|A\|_2^2 = \sup_{\|x\|_2=1} \langle Ax, Ax \rangle = \sup_{\|x\|_2=1} \langle A^\dagger A x, x \rangle = \rho(A^\dagger A). \quad \square$$

定理 1.4.3

谱半径 $\rho(A)$ 和矩阵范数的关系:

$$\rho(A) \leq \|A\|. \quad (1.25)$$

证明. 考虑 A 的一个特征值 λ 和特征向量 x , 则

$$|\lambda| \|xx'\| = \|Axx'\| \leq \|A\| \|xx'\|.$$

于是 $\|A\| \geq |\lambda|$. □

定理 1.4.4

给定 $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$, $\epsilon > 0$, 存在算子范数 $\|\cdot\|$ 满足:

$$\|A\| \leq \rho(A) + \epsilon. \quad (1.26)$$

引理. 若 $\|\cdot\|_\alpha$ 是 \mathbb{F}^n 中的向量范数, $P \in \mathbb{F}^{n \times n}$ 非奇异, 则

$$\|\cdot\|_{P,\alpha} : x \mapsto \|Px\|_\alpha,$$

构成另一个向量范数, 诱导的算子范数为

$$\|A\|_{P,\alpha} = \|PAP^{-1}\|_\alpha.$$

证明. 令 P 将 A 相似变换为 Jordan 型, 即

$$PAP^{-1} = J = \text{diag}(J_1, \dots, J_r), \quad J_i = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & \lambda_i \end{bmatrix}$$

令 $D_\epsilon = \text{diag}(1, \epsilon, \dots, \epsilon^{n-1})$, 则

$$\hat{J} = D_\epsilon^{-1} J D_\epsilon = \text{diag}(\hat{J}_1, \dots, \hat{J}_r), \quad \hat{J}_i = \begin{bmatrix} \lambda_i & \epsilon & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \epsilon \\ & & & \lambda_i \end{bmatrix}$$

则

$$\|A\|_{D_\epsilon^{-1}P, \infty} = \|D_\epsilon^{-1}PAP^{-1}D_\epsilon\|_\infty = \|\hat{J}\|_\infty \leq \rho(A) + \epsilon. \quad \square$$

注. 对任意满足 $|\lambda| = \rho(A)$ 的特征值 λ , 对应 Jordan 块是对角的, 则存在一个算子范数满足

$$\|A\| = \rho(A).$$

1.4.3 扰动定理

一个矩阵不可逆的概率是很低的,¹那如何度量矩阵的奇异性?

定理 1.4.5: 扰动定理

给定扰动 B , 若 $\|B\| < 1$, 则 $I + B$ 可逆且

$$\|(I + B)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|B\|}. \quad (1.27)$$

证明. 若 $I + B$ 不可逆, 则 $\rho(B) \geq 1 > \|B\|$ 矛盾. 记 $D := (I + B)^{-1}$, 则

$$(I + B)D = I, \iff D = I - BD, \implies \|D\| \leq 1 + \|B\| \|D\|. \quad \square$$

定理 1.4.6: 扰动定理 · 二

给定 A, C , 若 A 非奇异且

$$\|C - A\| \leq \|A^{-1}\|^{-1},$$

则 C 也非奇异, 且

$$\|C^{-1}\| \leq \frac{1}{\|A^{-1}\|^{-1} - \|C - A\|}. \quad (1.28)$$

证明. 令 $B = I - A^{-1}C$ 即可. \square

¹因为多了一个 $\det(A) = 0$ 的限制条件.

第二章 函数插值和重构

基本问题 已知关于某函数 f 的一组信息，如何重构 f ? 事实上，由于信息缺失，无法准确重构。

定义 2.0.1: 重构

给定函数空间 X 上的一组线性无关泛函 ϕ_1, \dots, ϕ_n , $f \in X$ 且 $\phi_i(f)$ 已知，希望确定 $f^* \in Y \subset X$ 满足：

$$\phi_i(f^*) = \phi_i(f), \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.1)$$

Y 称为插值空间或重构空间， $\{\phi_i\}$ 为信息泛函。

例 2.0.1: 采样空间的选择

- 多项式函数空间

$$\mathcal{P}_n = \{a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n\},$$

- 样条函数 (spline) 空间：分段多项式函数；
- 三角多项式函数空间

$$\mathcal{Y}_n = \{a_0 + a_1 \cos x + b_1 \sin x + \dots + a_n \cos nx + b_n \sin nx\}.$$

2.1 一维多项式插值

2.1.1 Lagrange 插值

定义 2.1.1: Lagrange 插值

插值空间 Y 由 $n+1$ 个参数 a_0, \dots, a_n 标定，即

$$y = y(x; a_0, \dots, a_n).$$

给定一组插值节点 (采样点) x_i 和采样值 $f_i = f(x_i)$ ，希望确定参数满足

$$y(x_i) = f(x_i), \quad \forall i \in I. \quad (2.2)$$

定理 2.1.1: 多项式插值定理

给定 $n+1$ 个不同插值点 x_0, \dots, x_n , 存在唯一的多项式函数 $p_n \in \mathcal{P}_n$ 满足插值条件.

证明. 存在性: 采取直接构造的方法. 定义插值基函数 $\ell_i \in \mathcal{P}_n$:

$$\ell_i(x) := \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}. \quad (2.3)$$

易验证, ℓ_i 满足:

$$\ell_i(x_j) = \delta_{ij}. \quad (2.4)$$

故插值多项式为

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \ell_i(x). \quad (2.5)$$

唯一性: 若还存在 $q_n \in \mathcal{P}_n$ 满足插值条件, 则 $p_n - q_n \in \mathcal{P}_n$ 且有 x_0, \dots, x_n 共 $n+1$ 个零点, 故 $p_n - q_n \equiv 0$. \square

定义 2.1.2: 余项

定义插值函数 $p_n(x)$ 与被插值函数 $f(x)$ 之间的差为余项 (remainder)

$$R_n(x) := f(x) - p_n(x). \quad (2.6)$$

定理 2.1.2: 中值定理与余项

若 $f \in \mathcal{C}^{n+1}[a, b]$, 则 $\forall x \in [a, b], \exists \xi(x) \in (a, b)$ 使得

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i). \quad (2.7)$$

证明. 当 $x = x_i$ 时, $R_n(x_i) = 0$ 显然成立; 给定 $x \in [a, b]$ 且 $x \neq x_i$, 定义

$$g(t) := R_n(t) - \frac{\prod_{i=0}^n (t - x_i)}{\prod_{i=0}^n (x - x_i)} R_n(x),$$

则 $g \in \mathcal{C}^{n+1}[a, b]$ 且在 $[a, b]$ 上有 x_0, \dots, x_n, x 共 $n+2$ 个零点, 在其划分的 $n+1$ 个区间中应用 Rolle 定理: 对应存在 $\xi_1^{(1)}, \dots, \xi_{n+1}^{(1)}$ 使得

$$g'(\xi_i^{(1)}) = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n+1,$$

继续对 $\xi_0^{(1)}, \dots, \xi_{n+1}^{(1)}$ 划分的 n 个区间上应用 Rolle 定理, 直到 $g^{(n+1)}(\xi_0^{(n+1)}) = 0$:

$$g^{(n+1)}(\xi_0^{(n+1)}) = f^{(n+1)}(\xi_0^{(n+1)}) - \frac{(n+1)!}{\prod_{i=0}^n (x - x_i)} R_n(x) = 0.$$

取 $\xi = \xi_0^{(n+1)}$ 即证. \square

推论. 若 $f \in \mathcal{C}^{n+1}[a, b]$, $h = \max(x_{i+1} - x_i)$ 则

$$\|R_n\|_\infty \leq \frac{h^{n+1}}{4(n+1)} \|f^{(n+1)}\|_\infty. \quad (2.8)$$

2.1.2 Lagrange 插值的收敛性

当什么条件下, $n \rightarrow \infty$, 误差 $\|R_n\|_\infty \rightarrow 0$?

定理 2.1.3: Lagrange 插值收敛性的一个充分条件

若被插值函数的任意阶导数一致有界, 则误差收敛到 0.

例 2.1.1

给定 $f(x) = \sin x$, $x \in [0, \pi]$, 由于 $\forall x \in [0, \pi]$

$$|f^{(n+1)}(x)| \leq 1, \quad \left| \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right| \leq \pi^{n+1},$$

故

$$|R_n(x)| \leq \frac{\pi^{n+1}}{(n+1)!} \rightarrow 0,$$

说明 Lagrange 插值多项式 p_n 在 $[0, \pi]$ 上一致收敛到 f .

例 2.1.2: Runge 现象

Runge 函数 $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$ 在 $[-1, 1]$ 上等距插值.

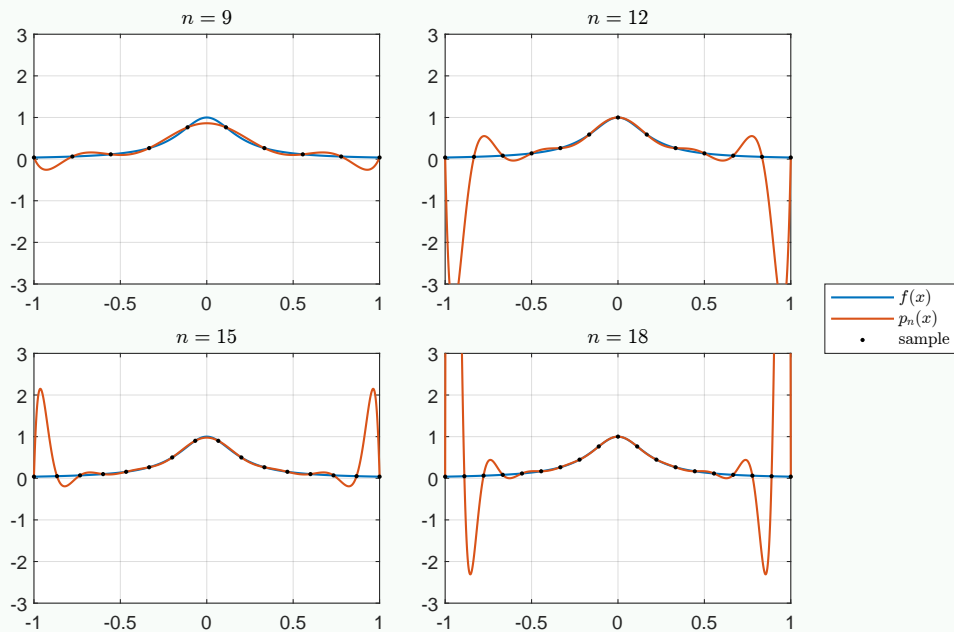


图 2.1: 等距插值 Runge 现象

显然 $f(x)$ 在 \mathbb{R} 上是解析的, 但在 \mathbb{C} 上存在奇点 $\pm i/5$.

改用 $n+1$ 阶 Chebyshev 多项式零点

$$\cos\left(\frac{\pi}{2(n+1)}\right), \cos\left(\frac{3\pi}{2(n+1)}\right), \dots, \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2(n+1)}\right),$$

作为插值节点, 可以消去 Runge 现象.

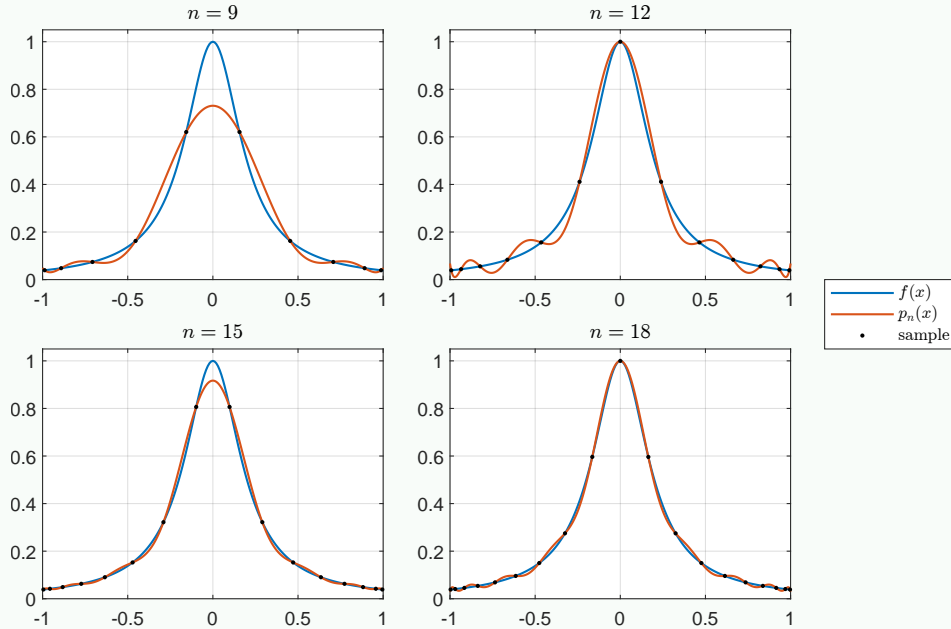


图 2.2: Chebyshev 多项式零点插值

2.1.3 Newton 插值公式

定义 2.1.3: 均差

定义 f 在节点集 i_0, i_1, \dots, i_k 上的 k 阶均差 (divided differences) 递归地定义为:

$$f[x_{i_0}, \dots, x_{i_k}] := \frac{f[x_{i_1}, \dots, x_{i_k}] - f[x_{i_0}, \dots, x_{i_{k-1}}]}{x_{i_k} - x_{i_0}}. \quad (2.9)$$

特别地, f 在 x_i 上的零阶均差 $f[x_i] := f(x_i)$.

推论. k 阶均差 $f[x_0, \dots, x_k]$ 是 $f(x_0), \dots, f(x_k)$ 的线性组合:

$$f[x_0, \dots, x_k] = \sum_{i=0}^k \frac{f(x_i)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)}. \quad (2.10)$$

因此, 均差对于节点是对称的, 即任意改变节点的顺序, 均差的值不变.

定理 2.1.4: Newton 插值公式

利用均差迭代得到 n 次 Newton 插值多项式:

$$p_n(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots + f[x_0, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}). \quad (2.11)$$

其余项为

$$R_n(x) = f[x, x_0, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_n). \quad (2.12)$$

对均差形式的余项应用定理 2.1.2 得到:

定理 2.1.5: 中值定理与均差

如果 $f \in C[a, b]$, $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$, 则 $\exists \xi \in I(x_0, \dots, x_n)$,

$$f[x_0, \dots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}. \quad (2.13)$$

推论. 特别地, n 阶均差:

$$f[\underbrace{x, \dots, x}_{n+1}] = \frac{f^{(n)}(x)}{n!} \quad (2.14)$$

推论. 均差的导数:

$$\frac{d}{dx} f[x_0, \dots, x_n, x] = f[x_0, \dots, x_n, x, x]. \quad (2.15)$$

定理 2.1.6: Neville 算法

给定插值节点 x_0, \dots, x_n , 定义 $p_{i,j} \in \mathcal{P}^{j-i}$ 为满足节点 x_i, \dots, x_j 插值条件的多项式插值函数, 则递归地, 有 $p_{i,i}(x) \equiv f(x_i)$,

$$p_{i,j}(x) = \frac{(x - x_i)p_{i+1,j}(x) + (x_j - x)p_{i,j-1}(x)}{x_j - x_i}, \quad (2.16)$$

2.1.4 Hermite 插值

现推广 Lagrange 插值的概念: 除了要求插值函数在节点上相等外, 还要求在节点上的导数值相等.

定义 2.1.4: Hermite 插值问题

给定插值节点 $x_0 < x_1 < \dots < x_m$ 及插值条件

$$(x_i, f^{(k)}(x_i)), \quad i = 0, 1, \dots, m, \quad k = 0, 1, \dots, n_i - 1$$

确定次数为 $n = \sum_{i=0}^m n_i - 1$ 的多项式函数 $p \in \mathcal{P}_n$ 满足插值条件.

定理 2.1.7

Hermite 插值问题的解存在且唯一.

证明. 定义拓展均差:

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] := \int_0^{t_0} \int_0^{t_1} \cdots \int_0^{t_{n-1}} f^{(n)}(t_n(x_n - x_{n-1}) + \cdots + t_1(x_1 - x_0) + t_0 x_0) dt_n \cdots dt_2 dt_1. \quad (2.17)$$

有递推式:

$$f[x_0, \dots, x_n] = \frac{f[x_0, \dots, x_{n-2}, x_n] - f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_{n-1}}. \quad (2.18)$$

即证. \square

例 2.1.3: 均差表

给定 $f(a), f'(a), f(b), f'(b)$, 则插值函数

$$p_3(x) = f(a) + f[a, a](x - a) + f[a, a, b](x - a)^2 + f[a, a, b, b](x - a)^2(x - b).$$

计算到 $f[a, a, b, b]$, 给出均差表:

0	1	2	3
$f(a)$	$f[a, a] = f'(a)$	$f[a, a, b] = \frac{f[a, b] - f[a, a]}{b - a}$	$f[a, a, b, b] = \cdots$
$f(a)$	$f[a, b] = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}$	$f[a, b, b] = \frac{f[b, b] - f[a, b]}{b - a}$	
$f(b)$	$f[b, b] = f'(b)$		

2.2 分段插值

2.2.1 分段线性插值

定义 2.2.1: 分段线性插值

给定节点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 及 $f(x_i)$, 求插值函数 φ 满足:

- $\varphi \in \mathcal{C}[a, b]$ 是连续函数;
- $[x_i, x_{i+1}]$ 上 $\varphi \in \mathcal{P}_1$ 是线性函数;
- $\varphi(x_i) = f(x_i)$.

满足前两个性质的函数组成插值空间 Φ , 且 $\dim(\Phi) = n + 1$.

定理 2.2.1

分段线性插值函数是存在且唯一的.

证明. 定义插值基函数

$$I_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, & x \in [x_{i-1}, x_i] \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}, & x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.19)$$

则

$$\varphi(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) I_i(x). \quad (2.20)$$

□

定理 2.2.2: 误差收敛性

定义 $h := \max_i (x_i - x_{i-1})$,

- 如果 $f \in \mathcal{C}[a, b]$, 则 $\lim_{h \rightarrow 0} \|f - \varphi\|_\infty = 0$;
- 如果 $f \in \mathcal{C}^1[a, b]$, 则 $\|f - \varphi\|_\infty \leq 2h \|f'\|_\infty$;
- 如果 $f \in \mathcal{C}^2[a, b]$, 则 $\|f - \varphi\|_\infty \leq h^2/8 \cdot \|f''\|_\infty$.

2.2.2 分段三次 Hermite 插值

定义 2.2.2: 分段三次 Hermite 插值

给定节点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 及 $f(x_i), f'(x_i)$, 求插值函数 φ 满足:

- $\varphi \in \mathcal{C}^1[a, b]$ 连续可导 (即 φ' 也连续);
- $[x_i, x_{i+1}]$ 上 $\varphi \in \mathcal{P}_3$ 是三次多项式函数;
- $\varphi(x_i) = f(x_i), \varphi'(x_i) = f'(x_i)$.

满足前两个性质的函数组成插值空间 Φ , 且 $\dim(\Phi) = 2n + 2$.

定义插值基函数, 在 $[x_i, x_{i+1}]$ 上

$$\alpha_i(x) = \left(1 + 2 \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right) \left(\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}\right)^2, \quad (2.21a)$$

$$\alpha_{i+1}(x) = \left(1 + 2 \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}\right) \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right)^2, \quad (2.21b)$$

$$\beta_i(x) = (x - x_i) \left(\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}\right)^2, \quad (2.21c)$$

$$\beta_{i+1}(x) = (x - x_{i+1}) \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right)^2, \quad (2.21d)$$

满足

$$\alpha_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad \alpha'_i(x_j) = 0, \quad (2.22a)$$

$$\beta_i(x_j) = 0, \quad \beta'_i(x_j) = \delta_{ij}. \quad (2.22b)$$

则

$$\varphi(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \alpha_i(x) + f'(x) \beta_i(x). \quad (2.23)$$

2.3 Fourier 插值

定义 2.3.1: Fourier 级数

周期函数展开成 Fourier 级数

$$f(x) \sim \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)]. \quad (2.24)$$

其中

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos(nx) dx, \quad (2.25a)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin(nx) dx. \quad (2.25b)$$

如果 $f \in \mathcal{C}^M$, 则 $a_n = \mathcal{O}(n^{-M})$, $b_n = \mathcal{O}(n^{-M})$, 且

$$\left\| f(x) - \left[\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^N [a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)] \right] \right\|_{\infty} = \mathcal{O}(N^{-M}).$$

定义 2.3.2: 三角多项式插值

给定周期为 2π 的函数 f 在节点 $x_i = 2\pi i/N$ 的值, 希望重构函数 ψ 满足 $\psi(x_i) = f(x_i)$.

寻找相多项式

$$p(x) = \beta_0 + \beta_1 e^{ix} + \cdots + \beta_{N-1} e^{i(N-1)x}. \quad (2.26)$$

定理 2.3.1: Fourier 插值

存在唯一的相多项式满足 Lagrange 插值条件且

$$\beta_j = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) \omega^{-kj}, \quad \omega = e^{2\pi i/N}. \quad (2.27)$$

对应三角多项式为

$$A_j = \frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f(x_k) \cos\left(\frac{2\pi kj}{N}\right), \quad (2.28a)$$

$$B_j = \frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f(x_k) \sin\left(\frac{2\pi kj}{N}\right), \quad (2.28b)$$

定义 2.3.3: 离散 Fourier 变换

式 (2.27) 中定义了一个线性变换, 变换矩阵为

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \cdots & \omega^{N-1} \\ 1 & \omega^2 & (\omega^2)^2 & \cdots & (\omega^2)^{N-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{N-1} & (\omega^{N-1})^2 & \cdots & (\omega^{N-1})^{N-1} \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

第三章 函数逼近

定义 3.0.1: 函数逼近

给定函数 $f \in C[a, b]$ 和子集 $\Phi \subset C[a, b]$ (如多项式函数), 寻找最佳逼近:

$$\varphi^* = \arg \min_{\varphi \in \Phi} \|f - \varphi\|. \quad (3.1)$$

注.

- Φ 一般是简单函数集合, 如多项式函数. 但 Φ 未必是线性空间.
- $f \notin \Phi$, 且关于 f 的信息可能有误差;
- 近似程度的度量: 平方 (squares) 逼近 $\|\cdot\|_2$ 和一致 (uniform) 逼近 $\|\cdot\|_\infty$.

3.1 最佳平方逼近

3.1.1 法方程

最佳平方逼近中, $\|\cdot\|_2$ 是由 $C[a, b]$ 的某个内积 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 诱导出的范数:

$$\|f\|_2 := \sqrt{\langle f, f \rangle}.$$

给定 Φ 的一组基 $\varphi_0, \dots, \varphi_n$, 则

$$\varphi = \sum_{i=0}^n a_i \varphi_i,$$

实函数情况, 简单计算得到

$$\|f - \varphi\|_2^2 = \sum_{i,j=0}^n \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle a_i a_j - 2 \sum_{i=0}^n \langle \varphi_i, f \rangle a_i + \langle f, f \rangle.$$

是一个关于 a_0, \dots, a_n 的二次函数, 故 Hess 矩阵

$$\nabla^2 \|f - \varphi\|_2^2 = 2 \begin{bmatrix} \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle & \cdots & \langle \varphi_0, \varphi_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_n, \varphi_0 \rangle & \cdots & \langle \varphi_n, \varphi_n \rangle \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

为对称正定矩阵, 因而 $\|f - \varphi\|_2^2$ 有最小值. 由

$$\frac{\partial}{\partial a_i} \|f - \varphi\|_2^2 = 2 \left[\sum_{j=0}^n \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle a_j - \langle \varphi_i, f \rangle \right] = 0,$$

得到

定理 3.1.1: 法方程

$$\begin{bmatrix} \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle & \cdots & \langle \varphi_0, \varphi_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_n, \varphi_0 \rangle & \cdots & \langle \varphi_n, \varphi_n \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \varphi_0, f \rangle \\ \vdots \\ \langle \varphi_n, f \rangle \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

注. 最佳平方逼近 φ^* 满足 $f - \varphi^* \perp \Phi$, 有

$$\|f\|_2^2 = \|\varphi^*\|_2^2 + \|f - \varphi^*\|_2^2. \quad (3.4)$$

例 3.1.1

给定 $\Phi = \text{span}(1, x^2)$, 求 $f = x$ 在 $[0, 1]$ 上的最佳平方逼近.

$$\begin{bmatrix} \langle 1, 1 \rangle & \langle 1, x^2 \rangle \\ \langle x^2, 1 \rangle & \langle x^2, x^2 \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle 1, x \rangle \\ \langle x^2, x \rangle \end{bmatrix}$$

解得 $\varphi^*(x) = a + bx^2$ 的系数

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1/3 \\ 1/3 & 1/5 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3/16 \\ 15/16 \end{bmatrix}.$$

3.1.2 正交多项式

定义 3.1.1: Hilbert 矩阵

考虑 $f \in C[0, 1]$ 在 \mathcal{P}_n 上的最佳平方逼近, $1, x, \dots, x^n$ 作为基, 法方程的系数矩阵为 Hilbert 矩阵

$$H_n := \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & \cdots & 1/(n+1) \\ 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & \cdots & 1/(2n+1) \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

这个矩阵是严重病态的.

注. 解决方法: 将 \mathcal{P}_n 的基改进为正交基 $\varphi_0, \dots, \varphi_n$, 即

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \|\varphi_i\|_2^2 \delta_{ij},$$

则系数矩阵是对角的,

$$\varphi^* = \sum_{i=0}^n \frac{\langle f, \varphi_i \rangle}{\|\varphi_i\|_2^2} \varphi_i. \quad (3.6)$$

定义 3.1.2: 广义 Fourier 级数

给定 $C[a, b]$ 上的一组正交归一函数 $\varphi_0, \varphi_1, \dots$, f 在 $\Phi_n := \text{span}(\varphi_0, \dots, \varphi_n)$ 中的最佳平方逼近为

$$f_n = \sum_{i=0}^n a_i \varphi_i, \quad a_i := \langle f, \varphi_i \rangle,$$

由于

$$\sum_{i=0}^n |a_i|^2 = \|f_n\|_2^2 \leq \|f\|_2^2, \implies \sum_{i=0}^{\infty} |a_i|^2 < \infty,$$

故 f_∞ 收敛且 $f_\infty \in \overline{\langle C[a, b], \|\cdot\|_2 \rangle}$, 称为广义 Fourier 级数.

注. 若 $\|\cdot\|_2$ 是权系数 ρ 的内积 $\langle \cdot, \cdot \rangle_\rho$ 诱导的范数, 则

$$\overline{\langle C[a, b], \|\cdot\|_2 \rangle} = \mathcal{L}_\rho^2[a, b] \quad (3.7)$$

定理 3.1.2

给定有界闭区间 $[a, b]$, 若 $f \in C[a, b]$ 在 \mathcal{P}_n 上的最佳平方逼近为 f_n , 则

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f - f_n\|_2 = 0. \quad (3.8)$$

这说明多项式函数是完备的.

定理 3.1.3: Legendre 多项式作最佳平方逼近

若内积为 $[-1, 1]$ 上的 $\rho \equiv 1$ 内积, 若 $f \in C^2[-1, 1]$, 则 $\forall \epsilon > 0$, $\exists N > 0$ 使得 $\forall n \geq N$

$$\|f - f_n\|_\infty \leq \frac{\epsilon}{\sqrt{n}}. \quad (3.9)$$

定理 3.1.4: 零平方误差最小

在所有首项系数为 1 的 n 次多项式中, Legendre 多项式 $P_n(x)$ 在 $[-1, 1]$ 与 0 的平方误差最小.

证明. $\forall f \in \mathcal{P}_n$ 且首项系数为 1, 有

$$f = P_n + a_{n-1}P_{n-1} + \dots + a_0P_0,$$

则

$$\|f\|_2^2 = \|P_n\|_2^2 + |a_{n-1}|^2 \|P_{n-1}\|_2^2 + \dots + |a_0|^2 \|P_0\|_2^2 \geq \|P_n\|_2^2. \quad \square$$

3.2 最小二乘法

给定 $\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$

定义 3.2.1: Haar 条件

$\forall \varphi_i \in \Phi$ 且 $\varphi_i \neq 0$ 在 x_0, \dots, x_m 上不同时为 0, 则称 Φ 满足 Haar 条件.

例 3.2.1

若 $m \geq n$, 则 \mathcal{P}_n 在 x_0, \dots, x_m 上满足 Haar 条件.

3.3 最佳一致逼近

考虑用多项式函数进行最佳一致逼近:

$$\varphi^* = \arg \inf_{\varphi \in \mathcal{P}_n} \|f - \varphi\|_{\infty}. \quad (3.10)$$

定义 3.3.1

称 $\|f - p_n\|_{\infty}$ 为 p_n 关于 f 的偏差. 若 $\exists x$ 使得

$$f(x) - p_n(x) = \pm \|f - p_n\|_{\infty}. \quad (3.11)$$

则称 x 为 p_n 关于 f 的正 (负) 偏差点.

定理 3.3.1: 最佳一致逼近的存在性

\mathcal{P}_n 关于 $f \in C[a, b]$ 的最小偏差可以达到.

证明. 记 $\varphi(f, p_n) = \|f - p_n\|_{\infty}$, 则 $\varphi(f, \cdot)$ 是关于 p_n 系数 a_0, \dots, a_n 的连续函数, 且 $\varphi(0; p_n)$ 在单位球面 $a_0^2 + \dots + a_n^2 = 1$ 上达到正最小值 μ .

$$\|f - p_n\|_{\infty} \geq \|p_n\|_{\infty} - \|f\|_{\infty} \geq \mu \sqrt{\sum_{i=0}^n a_i^2} - \|f\|_{\infty}.$$

当

$$\sum_{i=0}^n a_i^2 \geq \frac{4}{\mu^2} \|f\|_{\infty}^2$$

时, $\|f - p_n\|_{\infty} \geq \|f\|_{\infty}$, 故最佳一致逼近存在. \square

引理. 最佳一致逼近多项式 p_n^* 关于 f 的正负偏差点同时存在.

定义 3.3.2: Chebyshev 交错点

若 x_1, \dots, x_m 是 p_n 关于 f 的偏差点且轮流为正负, 则称其为一组 Chebyshev 交错点.

定理 3.3.2

p_n^* 是 f 的最佳一致逼近多项式 \iff 存在 $n+2$ 个 Chebyshev 交错点.

推论. 最佳一致逼近多项式是一个 Lagrange 插值多项式, 其插值点在 (a, b) 内.

定理 3.3.3: 最佳一致逼近的唯一性

最佳一致逼近多项式是唯一的.

定理 3.3.4: 零偏差最小

在所有首项系数为 1 的 n 次多项式中, Chebyshev 多项式 $T_n(x)$ 在 $[-1, 1]$ 与 0 的偏差最小.

例 3.3.1: 最佳一次一致逼近多项式的求法

给定 $f \in C^2[a, b]$ 且 $f''(x) \neq 0$, 求 f 的最佳一次一致逼近多项式 $g = a_0 + a_1x$.
由 f'' 恒正或恒负可知 $f - g$ 在 (a, b) 上的极值点是唯一的, 记作 x^* ,

$$f'(x^*) - g'(x^*) = 0,$$

且 $\{a, x^*, b\}$ 是一组 Chebyshev 交错点, 故

$$f(a) - g(a) = -[f(x^*) - g(x^*)] = f(b) - g(b)$$

可确定 a_1, x^*, a_0 :

$$\begin{cases} a_1 = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}, \\ x^* = f'^{-1}(a_0), \\ a_0 = \frac{1}{2}[f(a) + f(x^*) - a_1(a + x^*)] \end{cases}$$

第四章 数值积分

给定函数 $f \in \mathcal{C}[a, b]$ 和权函数 $\rho(x)$ ，计算积分

$$I(f) \equiv \int_a^b f(x)\rho(x) dx, \quad (4.1)$$

但很多情况下，我们只知道关于 f 的部分信息，不能用 Newton-Leibniz 公式。因此我们希望构造一种不依赖于 f 具体表达式的近似积分方法。

定义 4.0.1: 数值积分

给定系列积分节点 x_0, \dots, x_n ，数值积分 $\tilde{I}(f)$ 一般具有如下形式：

$$\tilde{I}(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k). \quad (4.2)$$

其中 A_k 称为求积系数。积分方法 \tilde{I} 的误差为

$$E(f) := I(f) - \tilde{I}(f). \quad (4.3)$$

给定一种积分方法 \tilde{I} ，如何评价其优劣？

定义 4.0.2: 代数精确度

给定积分法 \tilde{I} ，若 $\forall f \in \mathcal{P}_n$ 均有 $E(f) = 0$ ；但 $\exists f \in \mathcal{P}_{n+1}$ 使得 $E(f) \neq 0$ ，则 \tilde{I} 的代数精确度为 n 。

定义 4.0.3: 插值型求积公式

给定系列插值节点 $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ ，由式 (2.5)，函数 f 的 n 次插值多项式为

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \ell_i(x) \approx f(x),$$

选定

$$I_n(f) \equiv I(p_n) = \sum_{i=0}^n I(\ell_i) f(x_i) \equiv \sum_{i=0}^n A_i^{(n)} f(x_i), \quad (4.4)$$

其中 $A_k^{(n)}$ 与 f 无关，称为求积系数。

4.1 Newton-Cotes 公式

考虑 $\rho \equiv 1$ 的情形.

4.1.1 闭型 Newton-Cotes 公式

定理 4.1.1: (闭型) Newton-Cotes 公式

取等距节点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$, 节点间距 $h := (b - a)/n$, 有

$$I_n(f) = (b - a) \sum_{k=0}^n C_k^{(n)} f(x_k), \quad (4.5)$$

其中 $C_k^{(n)}$ 称为求积 Cotes 系数, 由式 (2.3)

$$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \frac{1}{n} \int_0^n \prod_{j \neq k} (t - j) dt. \quad (4.6)$$

注. Cotes 系数不但与 f 无关, 也与积分区间 $[a, b]$ 无关. 且 $C_k^{(n)} = C_{n-k}^{(n)}$.

例 4.1.1: 前几个 Cotes 系数

n	$C_k^{(n)}$						
1	1	1			/		2
2		1	4	1		/	6
3		1	3	3	1		/ 8
4	7	32	12	12	7	/	90

例 4.1.2: $n = 1$: 梯形公式

$n = 1$ 时, 只有 a, b 两个求积节点, 得到梯形公式 (trapezoidal)

$$I_1(f) = \frac{b - a}{2} [f(a) + f(b)]. \quad (4.7)$$

若 $f \in C^2[a, b]$, 则 $\exists \xi \in [a, b]$, 积分误差

$$E_1(f) = -\frac{h^3}{12} f''(\xi). \quad (4.8)$$

梯形公式的代数精确度为 1.

例 4.1.3: $n = 2$: Simpson 公式

$n = 2$ 时, 有 $a, x_1 = (a + b)/2, b$ 三个求积节点, 得到 Simpson 公式:

$$I_2(f) = \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]. \quad (4.9)$$

若 $f \in C^4[a, b]$, 则 $\exists \xi \in [a, b]$, 积分误差

$$E_2(f) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi). \quad (4.10)$$

Simpson 公式的代数精确度为 3.

注. $n = 3$ 时称为 Simpson 3/8 公式

$$E_3(f) = -\frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi),$$

$n = 4$ 时称为 Boole 公式或 Cotes 公式

$$E_4(f) = -\frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi).$$

定理 4.1.2: Newton-Cotes 公式的代数精确度

当 n 为奇数时, 代数精确度为 $n + 1$; 当 n 为偶数时, 代数精确度为 n .

4.1.2 开型 Newton-Cotes 公式**定理 4.1.3: 开型 Newton-Cotes 公式**

取等距节点 $a = x_{-1} < x_0 < \dots < x_n < x_{n+1} = b$, 以 x_0, \dots, x_n 为插值节点.

例 4.1.4: $n = 0$: 中点公式

$n = 0$ 的开型 Newton-Cotes 公式称为中点公式:

$$I_0 = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right). \quad (4.11)$$

若 $f \in C^2[a, b]$, 则 $\exists \xi \in [a, b]$, 积分误差

$$E_0(f) = \frac{h^3}{3} f''(\xi). \quad (4.12)$$

注. 一般来说, 闭型 Newton-Cotes 公式的结果比相应的开型 Newton-Cotes 公式的结果要好.

4.1.3 积分法的一致稳定性

由于积分节点 $f(x_i)$ 可能存在误差, 需要考虑随着渐进参数 n 的增大, 积分法的稳定性.

定义 4.1.1: 一致稳定

对于线性积分方法 \tilde{I}_n , 若 $\forall n \in \mathbb{N}$, $\exists M > 0$ 使得

$$\sum_{k=0}^n |A_k^{(n)}| < M, \quad (4.13)$$

则称 \tilde{I}_n 是一致稳定的.

推论. 若 $\|f - g\|_\infty \leq \delta$, 且 \tilde{I}_n 一致稳定, 则

$$|\tilde{I}_n(f) - \tilde{I}_n(g)| = |\tilde{I}_n(f - g)| \leq \sum_{k=0}^n |A_k^{(n)}| \|f - g\|_\infty \leq M\delta.$$

定理 4.1.4: 一致稳定的判定

若 $\forall n, k$ 均有 $A_k^{(n)} > 0$ 且 \tilde{I}_n 的代数精确度至少为 0, 则 \tilde{I}_n 一致稳定.

注. $n \geq 8$ 时, Newton-Catos 积分法存在 $A_k^{(n)} < 0$, 故不是一致稳定的.

4.2 复合求积公式

对于一些函数 f 来说, 低阶 Newton-Catos 公式很不准确, 而高阶又存在数值不稳定问题. 为此需要新的求积方法, 一种思路是利用积分运算关于测度的可加性, 将积分区间分成若干小的区间进行分片求积.

定义 4.2.1: 复合求积公式

将积分区间 $[a, b]$ 划分成若干子区间, 再在每个子区间上采用低阶 Newton-Catos 公式.

例 4.2.1: 复合梯形公式

取节点 $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, 子区间为 $[x_k, x_{k+1}]$, 区间间隔 $h_k = x_{k+1} - x_k$, 对每个子区间套用梯形积分公式 (4.7), 得到复合梯形公式为:

$$\begin{aligned} T_n(f) &= \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h_k}{2} [f(x_k) + f(x_{k+1})] \\ &= \frac{h_0}{2} f(x_0) + \frac{h_0 + h_1}{2} f(x_1) + \dots + \frac{h_{n-2} + h_{n-1}}{2} f(x_{n-1}) + \frac{h_{n-1}}{2} f(x_n). \end{aligned} \quad (4.14)$$

由式 (4.8) 和中值定理知, $\exists \xi_k \in [x_k, x_{k+1}], \eta \in [a, b]$ 使得

$$E_n(f) = -\frac{1}{12} \sum_{k=0}^{n-1} h_k^3 f''(\xi_k) = -\frac{1}{12} \sum_{k=0}^{n-1} h_k^3 f''(\eta), \quad (4.15)$$

当等距均分时, $h_0 = h_1 = \dots = h_{n-1} = h = (b - a)/n$, 有

$$E_n(f) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\eta). \quad (4.16)$$

例 4.2.2: 复合中点公式

对每个子区间套用中点积分公式 (4.11), 得到复合中点公式为:

$$H_n(f) = \sum_{k=0}^{n-1} h_k f(x_{k+1/2}), \quad x_{k+1/2} := \frac{x_k + x_{k+1}}{2}. \quad (4.17)$$

推论. 考虑每个子区间上增加一个节点 $x_{k+1/2}$, 得到递推公式:

$$T_{2n}(f) = \frac{T_n(f) + H_n(f)}{2}. \quad (4.18)$$

例 4.2.3: 复合 Simpson 公式

对每个子区间套用 Simpson 积分公式 (4.9), 得到复合 Simpson 公式为:

$$S_{2n}(f) = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h_k}{6} [f(x_k) + 4f(x_{k+1/2}) + f(x_{k+1})]. \quad (4.19)$$

若最大区间长度 $h := \max_k h_k$, 则 $\exists \eta \in [a, b]$ 使得

$$|E_{2n}(f)| \leq \frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\eta). \quad (4.20)$$

注. 复合梯形公式、复合中点公式、复合 Simpson 公式都是一致稳定的.

推论. 递推关系:

$$S_{2n}(f) = \frac{T_n(f) + 2H_n(f)}{3} = \frac{4T_{2n}(f) - T_n(f)}{3}. \quad (4.21)$$

4.3 Romberg 求积方法

4.3.1 Euler-Maclaurin 求积公式

定义 4.3.1: Bernoulli 多项式

Bernoulli 多项式递归定义: $B_0(x) = 1$,

$$B_k(x) = k \int_0^x B_{k-1}(t) dt - k \int_0^1 \int_0^x B_{k-1}(t) dt dx \quad (4.22)$$

Bernoulli 数 $B_k := B_k(0)$.

例 4.3.1: 前几个 Bernoulli 多项式

$$\begin{aligned} B_1(x) &= x - \frac{1}{2}, & B_2(x) &= x^2 - x + \frac{1}{6}, \\ B_3(x) &= x^3 - \frac{3}{2}x^2 + \frac{1}{2}x, & B_4(x) &= x^4 - 2x^3 + x^2 - \frac{1}{30}, \\ B_5(x) &= x^5 - \frac{5}{2}x^4 + \frac{5}{3}x^3 - \frac{1}{6}x, & B_6(x) &= x^6 - 3x^5 + \frac{5}{2}x^4 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{42}. \end{aligned}$$

定理 4.3.1: Euler-Maclaurin 求积公式

若 $f \in C^{2m+2}[a, b]$, 则有

$$I(f) = T_n(f) + \sum_{\ell=1}^m \frac{B_{2\ell}}{(2\ell)!} [f^{(2\ell-1)}(a) - f^{(2\ell-1)}(b)] h^{2\ell} + r_{m+1}, \quad (4.23)$$

其中 T_n 是复合梯形公式,

$$r_{m+1} = -\frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} (b-a) f^{(2m+2)}(\eta) h^{2m+2}, \quad \exists \eta \in (a, b). \quad (4.24)$$

4.3.2 Richardson 外推方法

由 Euler-Maclaurin 求积公式, 考虑复合梯形公式关于 $h < 1$ 的渐进级数

$$T_n(f) = I(f) + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^4 + \cdots + \tau_m h^{2m} + \mathcal{O}(h^{2m+2}).$$

当区间无限小时, $h \rightarrow 0$, $T_n(f) \rightarrow I(f)$ 是准确积分. 为了得到 $I(f)$ 的一个近似, 考虑

$$h_i = \frac{b-a}{n_i}, \quad i = 0, 1, \dots$$

且 $n_0 < n_1 < \cdots < n_m < \cdots$, 记关于 h^2 的插值多项式 $p_{i,j} \in \mathcal{P}^{j-i}$ 满足插值条件:

$$p_{i,j}(h_i) = T_{n_i}(f), \quad p_{i,j}(h_{i+1}) = T_{n_{i+1}}(f), \quad \dots, \quad p_{i,j}(h_j) = T_{n_j}(f),$$

由 Neville 算法 (2.16), 有递推关系: $p_{i,i}(h) = T_{n_i}(f)$,

$$p_{i,j}(h) = \frac{(h^2 - h_i^2)p_{i+1,j}(h) + (h_j^2 - h^2)p_{i,j-1}(h)}{h_j^2 - h_i^2},$$

定理 4.3.2: Richardson 外推方法

将外推值 $p_{0,i}(0)$ 作为 $I(f)$ 的一个近似, 记 $T_{i,j} := p_{i,j}(0)$, 有递推关系

$$T_{i,j} = T_{i+1,j} + \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j-1}}{n_j^2/n_i^2 - 1}. \quad (4.25)$$

4.3.3 Romberg 求积方法**定理 4.3.3: Romberg 求积方法**

对区间 $[a, b]$ 进行 $n_k = 2^k$ 等分 ($k = 0, 1, \dots$), 利用复合梯形公式计算 T_1^k , 再递推

$$T_{i+1}^k = \frac{4^i T_i^{k+1} - T_i^k}{4^i - 1}. \quad (4.26)$$

直到 T_{i+1}^0 满足精度要求.

特别地, T_1^0 为梯形公式, T_2^k 为复合 Simpson 公式.

4.4 Gauss 求积公式

考虑一般的带权积分 $\rho \neq 1$.

定理 4.4.1

给定插值节点 x_0, \dots, x_n , ℓ_0, \dots, ℓ_n 是插值基函数, 则当且仅当

$$A_k^{(n)} = I(\ell_k) = \int_a^b \ell_k(x) \rho(x) dx$$

时 $I_n(\cdot)$ 的代数精确度至少为 n .

证明. 充分性: $\forall f \in \mathcal{P}_n$, 有

$$f(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) \ell_k(x),$$

于是

$$I(f) = \sum_{k=0}^n f(x_k) I(\ell_k) = \sum_{k=0}^n A_k^{(n)} f(x_k) = I_n(f);$$

必要性: 若 $\forall f \in \mathcal{P}_n$ 均有 $I(f) = I_n(f)$, 则

$$I(f) - I_n(f) = \sum_{k=0}^n [I(\ell_k) - A_k^{(n)}] f(x_k) = 0,$$

特别地, 取 $f(x) = 1, x, \dots, x^n$, 得到一个 Vandermonde 矩阵, 从而 $A_k^{(n)} = I(\ell_k)$. □

定理 4.4.2

$n+1$ 个求积节点的求积公式 $I_n(\cdot)$ 代数精确度不超过 $2n+1$.

证明. 给定节点 x_0, \dots, x_n 定义

$$\omega_{n+1}(x) := \prod_{k=0}^n (x - x_k),$$

则 $I(\omega_{n+1}^2) > 0 = I_n(\omega_{n+1}^2)$, 说明代数精确度 $< 2n+2$. □

如何达到最大可能代数精确度 由 (2.7), 余项

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

故积分误差为

$$E_n(f) = \frac{1}{(n+1)!} I(f^{(n+1)}(\xi(x)) \omega_{n+1}(x)).$$

若 I_n 具有 $2n+1$ 次代数精确度, 即 $\forall f \in \mathcal{P}_{2n+1}$ 均有 $E_n(f) = 0$, 由于 $f^{(n+1)} \in \mathcal{P}_n$, 故

$$\omega_{n+1} \perp \mathcal{P}_n. \quad (4.27)$$

即 ω_{n+1} 为 $[a, b]$ 上权 ρ 的 $n+1$ 次正交多项式, 这可以通过选取节点得到.

定理 4.4.3: Gauss 求积公式

取 $[a, b]$ 上权 ρ 的 $n+1$ 次正交多项式的根 x_0, \dots, x_n 作为求积节点, 则

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^n I(\ell_k) f(x_k),$$

具有 $2n+1$ 阶代数精确度, 称为 Gauss 公式, 节点称为 Gauss 点.

定理 4.4.4

Gauss 求积公式是一致稳定的.

证明. 略

□