高等数值分析

Advanced Numerical Analysis

Dait

目　录

第一章　数学基础知识

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 $+ : V \times V \to V$ 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 $\cdot : \mathbb{F} \times V \to V$ 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

- $\mathcal{C}^n[a,b]$：全体在 $[a,b]$ 上 n 次导数连续 (continuous) 的函数构成的集合.
- $\mathcal{D}^n[a,b]$：全体在 $[a,b]$ 上 n 次可导 (differentiable) 的函数构成的集合.
- $\mathcal{P}_n$：n 次多项式函数空间.
- 正实数 $\mathbb{R}_{>0}$ 构成一个线性空间，其加法为实数乘法，数乘为幂次.

定义 1.1.2: 线性无关

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

$$a_1 x_1 + \cdots + a_n x_n = 0, \tag{1.1}$$

只有零解，则称 $x_1, \ldots, x_n$ 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: 维度和基

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
$$x = a_1 x_1 + \cdots + a_n x_n, \tag{1.2}$$
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

定义 1.2.1: 度量空间

设 M 是一个集合，设映射 $d : M \times M \to \mathbb{R}$ 满足：
- $d(x, y) \geqslant 0$，且 $d(x, y) = 0 \iff x = y$;
- $d(x, y) = d(y, x)$；
- 三角不等式：$d(x, y) + d(y, z) \geqslant d(x, z)$.

则称 (M, d) 构成一个度量空间 (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：
$$d(x_n, x_{n+p}) < \varepsilon, \quad \forall p \in \mathbb{N}, \forall n > N, \tag{1.3}$$
则称 $\{x_n\}$ 为 Cauchy 序列.

定义 1.2.3: 度量空间的完备性

若对任意 M 中的 Cauchy 序列 $\{x_n\}$，$\exists x \in M$ 满足：

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

则称度量空间 M 是完备的.

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 $x = \{x_n\}$ 的集合. 在 $\tilde{M}$ 中定义等价关系 $\sim$：

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

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

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

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

$$i : M \to \hat{M}, \;\; x \mapsto [\{x, x, \ldots\}].$$

即映射到对应常数序列的等价类. □

定义 1.2.4: 赋范空间

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

- $\|f\| \geqslant 0$，且 $\|f\| = 0 \iff f = 0$；
- $\|\lambda f\| = |\lambda| \, \|f\|$；
- $\|f + g\| \leqslant \|f\| + \|g\|$.

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

显然，赋范空间也是度量空间，只需定义

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

完备的赋范空间称为 Banach 空间.

例 1.2.2: $\mathbb{R}^n$ 的范数

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

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

如

$$\|x\|_\infty = \max_i |x_i|, \tag{1.4a}$$

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

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

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

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

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

例 1.2.3: $C[a, b]$ 的范数

$f(x) \in \mathcal{C}[a, b]$ 的 p - 范数为

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

如

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

$$\|f\|_1 = \int_a^b |f(x)| \,\mathrm{d}x, \tag{1.5b}$$

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

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

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：

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

则称 $\|\cdot\|_\alpha, \|\cdot\|_\beta$ 等价.

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

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : S \times S \to \mathbb{F}, \tag{1.6}$$

满足：

- $\langle x, x \rangle \geqslant 0$，且 $\langle x, x \rangle = 0 \iff x = 0$;
- $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$;
- $\langle ax + by, z \rangle = a \langle x, z \rangle + b \langle y, z \rangle$.

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

内积诱导的范数：

$$\|x\| := \sqrt{\langle x, x \rangle}, \tag{1.7}$$

例 1.3.1: 内积实例

$\mathbb{R}^n$ 的内积为

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

$\mathcal{C}[a, b]$ 的内积为

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

定理 1.3.1: 内积空间线性无关的判定

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

$$G_n = \begin{bmatrix} \langle x_1, x_1 \rangle & \cdots & \langle x_1, x_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle x_n, x_1 \rangle & \cdots & \langle x_n, x_n \rangle \end{bmatrix}, \tag{1.8}$$

即 $\det G_n \neq 0$.

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

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

特别的，

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

则 $\det G_n \neq 0 \iff \mathrm{N}(G_n^\top) = \{0\} \iff a$ 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

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

下面计算 $a_1, \dots, a_n$. 两边分别与 x_i 做内积：

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

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

$$y_i = x_i - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\langle x_i, y_j \rangle}{\langle y_j, y_j \rangle} y_j. \tag{1.9}$$

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[I]的函数，且

$$\int_a^b \rho(x) \, \mathrm{d}x < +\infty,$$

定义内积

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) g(x) \rho(x) \, \mathrm{d}x. \tag{1.10}$$

[I] 即 $\{x | \rho(x) \leqslant 0\}$ 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 $\mathcal{C}[a, b]$ 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

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} (x^2 - 1)^n. \tag{1.11}$$

- 内积

$$\langle P_n, P_m \rangle = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}. \tag{1.12}$$

- 递归关系

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x). \tag{1.13}$$

- 奇偶性

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x). \tag{1.14}$$

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

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x). \tag{1.15}$$

- 内积

$$\langle T_0, T_0 \rangle = \pi; \quad \langle T_n, T_n \rangle = \pi/2, \ \ n \geqslant 1; \tag{1.16}$$

- 递推关系

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x). \tag{1.17}$$

- 奇偶性

$$T_n(-x) = (-1)^n T_n(x); \tag{1.18}$$

- T_n 的 n 个实单根为 $\cos\left(\dfrac{2k-1}{2n}\pi\right)$，$(n+1)$ 个极值点为 $\cos\left(\dfrac{k}{n}\pi\right)$
- 当 $|x| \geqslant 1$ 时，

$$T_n(x) = \frac{1}{2}\left[\left(x + \sqrt{x^2 - 1}\right)^k + \left(x - \sqrt{x^2 - 1}\right)^k\right]. \tag{1.19}$$

1.4　矩阵空间

定义 1.4.1: 矩阵范数

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

$$\|AB\| \leqslant \|A\| \, \|B\|, \tag{1.20}$$

则称该范数为矩阵范数.

例 1.4.1: Frobenius 范数

定义 Frobenius 范数

$$\|A\|_{\mathrm{F}} := \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|A_{ij}|^2}. \tag{1.21}$$

是一个矩阵范数.

证明. 由 Cauchy-Schwarz 不等式

$$\begin{aligned}\|AB\|_{\mathrm{F}} &= \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\left|\sum_{k=1}^{n}A_{ik}B_{kj}\right|^2} \leqslant \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{k=1}^{n}|A_{ik}|^2\sum_{k=1}^{n}|B_{kj}|^2\right)} \\ &= \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}|A_{ik}|^2\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}|B_{kj}|^2} = \|A\|_{\mathrm{F}}\,\|B\|_{\mathrm{F}}\,.\end{aligned}$$

□

注意到

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

故

$$\|A\|_{\mathrm{F}} = \sqrt{\mathrm{tr}(A^\dagger A)} = \sqrt{\mathrm{tr}(AA^\dagger)}. \tag{1.22}$$

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 $\forall A\in\mathbb{F}^{n\times n}, x\in\mathbb{F}^n$

$$\|Ax\|_V \leqslant \|A\|_M\,\|x\|_V\,, \tag{1.23}$$

则称他们是相容的. 在不引起混淆的情况下，可以略去下标.

例 1.4.2

Frobenius 范数与向量 2 - 范数相容.

证明.

$$\|Ax\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left|\sum_{j=1}^{n}A_{ij}x_j\right|^2} \leqslant \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n}|A_{ij}|^2\sum_{j=1}^{n}|x_j|^2\right)} = \|A\|_{\mathrm{F}}\,\|x\|_2\,.$$

□

定义 1.4.3: 算子范数

定义矩阵的算子范数 (operate norm)

$$N:\mathbb{F}^{n\times n}\to\mathbb{R},\quad A\mapsto\sup_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|}{\|x\|}. \tag{1.24}$$

称算子范数是该向量范数诱导出来的矩阵范数.

注意 $N(I)=1$．故 Frobenius 范数不是算子范数．

定理 1.4.1

$N(\cdot)$ 是一个矩阵范数，并与向量范数相容．

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

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

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 1.4.3

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

$$\|A\|_\infty=\max_i\sum_{j=1}^n|A_{ij}|,\tag{1.25a}$$

$$\|A\|_1=\max_j\sum_{i=1}^n|A_{ij}|,\tag{1.25b}$$

$$\|A\|_2=\sqrt{\rho(A^\dagger A)},\tag{1.25c}$$

证明．先证明 (1.25b)，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

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

特别的，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 (1.25a)，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

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

特别的，取 $x_j=\mathrm{sgn}(A_{kj})$ 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 (1.25c)，由 2 - 范数的性质：

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

定理 1.4.2

谱半径 $\rho(A)$ 和矩阵范数的关系：

$$\rho(A) \leqslant \|A\|. \tag{1.26}$$

证明. 考虑 A 的一个特征值 λ 和特征向量 x，则

$$|\lambda|\,\|xx'\| = \|Axx'\| \leqslant \|A\|\,\|xx'\|.$$

于是 $\|A\| \geqslant |\lambda|$. $\square$

定理 1.4.3

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

$$\|A\| \leqslant \rho(A) + \epsilon. \tag{1.27}$$

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

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

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

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

则

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

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

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

奇异性与扰动　一个矩阵不可逆的概率是很低的，[I]那如何度量矩阵的奇异性？

定理 1.4.4: 扰动定理

给定扰动 B，若 $\|B\| < 1$，则 $I+B$ 可逆且

$$\|(I+B)^{-1}\| \leqslant \frac{1}{1-\|B\|}. \tag{1.28}$$

证明. 若 $I+B$ 不可逆，则 $\rho(B) \geqslant 1 > \|B\|$ 矛盾.

记 $D := (I+B)^{-1}$，则

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

□

定理 1.4.5: 扰动定理 · 二

给定 A, C，若 A 非奇异且

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

则 C 也非奇异，且

$$\|C^{-1}\| \leqslant \frac{1}{\|A^{-1}\|^{-1} - \|C-A\|}. \tag{1.29}$$

证明. 令 $B = I - A^{-1}C$ 即可. □

[I]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

若 $\{\phi_\alpha\}_{\alpha\in I}$ 是函数空间 X 上的一组线性无关泛函，给定某 $f\in X$ 且 $\phi_\alpha(f)$ 已知，希望确定 $f^*\in Y\subset X$ 满足：

$$\phi_\alpha(f^*)=\phi_\alpha(f),\quad \forall\alpha\in I. \tag{2.1}$$

Y 称为插值空间或重构空间，$\{\phi_\alpha\}_{\alpha\in I}$ 为信息泛函.

例 2.0.1: 采样空间的选择

- 多项式函数空间
$$\mathcal{P}_n=\{a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n\},$$
- 样条函数空间
- 三角多项式函数空间

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

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

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

定理 2.1.1: 多项式插值定理

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

证明. 采取直接构造的方法. 定义插值基函数

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

满足：

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

则插值多项式为

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

□

定义 2.1.2: 余项

定义插值函数 $P_n(x)$ 与原函数 $f(x)$ 之间的差为余项

$$R_n(x):=f(x)-P_n(x). \tag{2.6}$$

定理 2.1.2

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

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

推论. 若 $f\in\mathcal{C}^{n+1}[a,b]$，则

$$\|R_n\|_\infty\leqslant\frac{\left\|f^{(n+1)}\right\|_\infty}{4(n+1)}\max_{i,j}|x_i-x_j|\,. \tag{2.8}$$

2.1.2　Newton 插值公式

定义 2.1.3: 均差

定义 f 在 x_i 上的零阶均差 $f[x_i]:=f(x_i)$，在节点集 $i_0,i_1,\dots,i_k$ 上的 k - 阶均差：

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

定理 2.1.3: Newton 插值公式

利用均差迭代得到

$$\begin{aligned}P_{i_0\cdots i_k}(x) &= P_{i_0\cdots i_{k-1}}(x) + f[x_{i_0},\dots,x_{i_k}](x-x_{i_0})\cdots(x-x_{i_{k-1}})\\ &= f[x_{i_0}] + f[x_{i_0},x_{i_1}](x-x_{i_0}) + \cdots\\ &\quad + f[x_{i_0},\dots,x_{i_k}](x-x_{i_0})\cdots(x-x_{i_{k-1}}).\end{aligned} \tag{2.10}$$

定义 2.1.4: Hermite 插值问题

给定 $(\xi_i, f_i^{(k)})$，$i=0,1,\dots,m$，$k=0,1,\dots,n_i-1$，且

$$\xi_0 < \xi_1 < \cdots < \xi_m,$$

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

$$P^{(k)}(\xi_i) = f_i^{(k)}, \quad i=0,1,\dots,m,\ k=0,1,\dots,n_i-1. \tag{2.11}$$

定理 2.1.4

Hermite 插值问题的解存在且唯一.

证明. 定义拓展均差:

$$\begin{aligned}f[x_0,x_1,\dots,x_n] := &\int_0^{t_0}\int_0^{t_1}\cdots\int_0^{t_{n-1}}\\ &f^{(n)}(t_n(x_n-x_{n-1})+\cdots+t_1(x_1-x_0)+t_0x_0)\,\mathrm{d}t_n\cdots\mathrm{d}t_2\mathrm{d}t_1.\end{aligned} \tag{2.12}$$

有递推式:

$$f[x_0,\dots,x_n] = \frac{f[x_0,\dots,x_{n-2},x_n] - f[x_0,\dots,x_{n-1}]}{x_n - x_{n-1}}. \tag{2.13}$$

即证. □

定理 2.1.5: 性质

如果 f 足够光滑，则

$$\lim_{\epsilon_i\to 0} f[x_0^{\epsilon_0},\dots,x_n^{\epsilon_n}] = f[x_0,\dots,x_n], \tag{2.14}$$

如果 $f\in\mathcal{C}[a,b]$，$x_0,\dots,x_n\in[a,b]$，则 $f[x_0,\dots,x_n]$ 可以写成

$$f[x_0,\dots,x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}, \quad \xi\in I(x_0,\dots,x_n), \tag{2.15}$$

特别的，n - 阶均差:

$$f[\underbrace{x,\dots,x}_{n+1}] = \frac{f^{(n)}(x)}{n!} \tag{2.16}$$

如果 $x \neq y_0$，则

$$f[x, y_0, \ldots, y_n] = \frac{f[x, y_1, \ldots, y_n] - f[y_0, \ldots, y_n]}{x - y_0}, \tag{2.17}$$

导数：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f[x_0, \ldots, x_n, x] = f[x_0, \ldots, x_n, x, x]. \tag{2.18}$$

例 2.1.1

计算 $f[a, a, b, b]$：

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

定理 2.1.6: Hermite 插值问题的 Newton 公式

插值多项式为

$$P(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + \cdots + f[x_0, \ldots, x_n](x - x_0)\cdots(x - x_{n-1}). \tag{2.19}$$

其中 $x_0, \ldots, x_n$ 是以下序列的任意置换

$$\underbrace{\xi_0, \ldots, \xi_0}_{n_0}, \cdots, \underbrace{\xi_m, \ldots, \xi_m}_{n_m}.$$

定理 2.1.7: 误差函数

如果 $f \in \mathcal{D}^{n+1}$，则对每个 $\bar{x}$，$\exists \xi \in I[x_0, \ldots, x_n, \bar{x}]$ 使得

$$R(\bar{x}) = f(\bar{x}) - P_{0\cdots n}(\bar{x}) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)\cdots(x - x_n). \tag{2.20}$$

证明. 设 $Q(t)$ 是 $x_0, \ldots, x_n, \bar{x}$ 的插值多项式，则

$$Q(t) - P_{0\cdots n}(t) = f[x_0, \ldots, x_n, \bar{x}](t - x_0)\cdots(t - x_n),$$

令 $t = \bar{x}$ 即得. □

当什么条件下，$n \to \infty$，误差 $R \to 0$？

定理 2.1.8: 误差收敛性的一个充分条件

记 $\delta := |I(x_0,\dots,x_n)|$，$\tilde{x}$ 为 I 的中心．如果 f 在 $B(\tilde{x},2\delta)$ 上复解析，则插值法在 I 上是收敛的．

证明．设 M 为 f 在 $\Omega=B(\tilde{x},1.9\delta)$ 上的上界，则

$$\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint_{\partial\Omega}\frac{f(z)}{(z-\xi)^{n+2}}\,\mathrm{d}z, \tag{2.21}$$

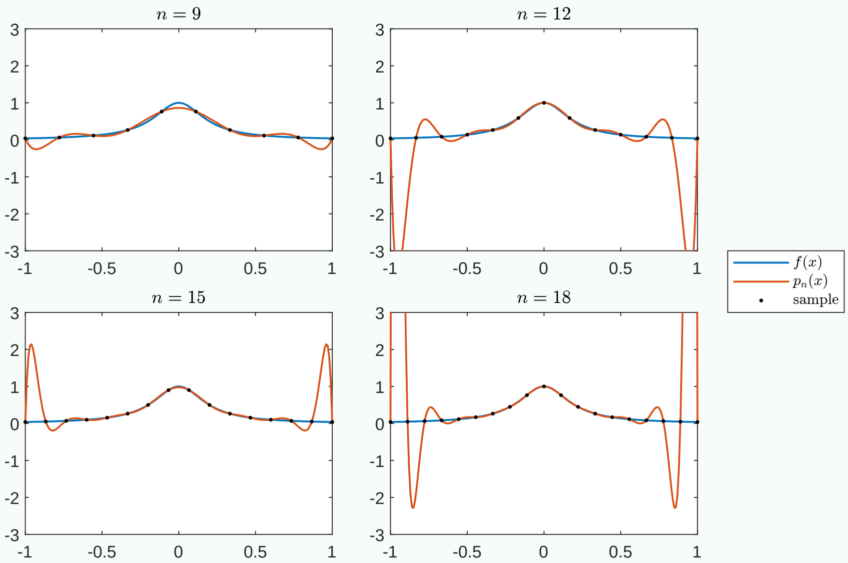
于是

$$|R(\bar{x})|\leqslant C\delta\frac{\delta^{n+1}}{(1.4\delta)^{n+2}}\to 0.$$

□

例 2.1.2: Runge 现象

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



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

2.2 分段插值

定义 2.2.1: 分段线性插值

设

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

给定 $f(x_i)$，找插值函数 φ 满足：

- $\varphi\in\mathcal{C}[a,b]$;
- φ 在 $[x_i,x_{i+1}]$ 上是线性函数．
- $\varphi(x_i)=f(x_i)$;

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

插值函数是存在且唯一的.

证明. 定义插值基函数

$$I_i(x) = \begin{cases} \dfrac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, & x \in [x_{i-1}, x_i] \\ \dfrac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}, & x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{2.22}$$

则

$$\varphi(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) I_i(x). \tag{2.23}$$

□

定理 2.2.2: 收敛性

定义 $h := \max_i (x_i - x_{i-1})$，

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

定义 2.2.2: 分片三次 Hermite 插值

2.3　Fourier 插值

定义 2.3.1: Fourier 级数

周期函数展开成 Fourier 级数

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

其中

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

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin(nx)\, \mathrm{d}x. \tag{2.25b}$$

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

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

定理 2.3.1

存在唯一的相多项式满足 Lagrange 插值条件且

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

对应三角多项式为

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

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

第三章　函数逼近

定义 3.0.1: 函数逼近

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

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

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：平方逼近 $\|\cdot\|_2$ 和一致逼近 $\|\cdot\|_\infty$．

3.1　最佳平方逼近

最佳平方逼近中，$\|\cdot\|_2$ 是由 $\mathcal{C}[a,b]$ 的某个内积 $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 诱导出的范数．设 $\varphi_0,\dots,\varphi_n$ 构成 Φ 的一组基，则

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

实函数情况，简单计算得到

$$\|f - \varphi\|_2^2 = \sum_{i,j} \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle a_i a_j - 2 \sum_{i=1}^{n} \langle \varphi_i, f \rangle a_i + \langle f, f \rangle .$$

是一个关于 $a_0,\dots,a_n$ 的二次函数，故 Hess 矩阵

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

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

$$\frac{\partial}{\partial a_i} \|f - \varphi\|_2^2 = 2 \left[\sum_{j=1}^{n} \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle a_j - \langle \varphi_i, f \rangle \right] = 0,$$

得到

定理 3.1.1: 法方程

$$\sum_{j=1}^{n} \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle a_j = \langle \varphi_i, f \rangle . \tag{3.3}$$

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

$$\|f\|_2^2 = \|\varphi^*\|_2^2 + \|f - \varphi^*\|_2^2 . \tag{3.4}$$