一、 绪论

1.1 误差（1）观测误差：如测量时的误差，本课程不研究（2）模型误差：将事物数学化时的误差，本课程不研究（3）方法误差（截断误差）：由于方法带来的误差。（4）舍入误差：由于计算机存储带来的误差。

1.2 误差衡量

绝对误差$|\Delta x| = |x - x^*|$； 相对误差：$\left|\frac{\Delta x}{x}\right| \approx |\frac{\Delta x}{x^*}|$

有效数字：从左边不为零的第一位开始计算。误差限$\Delta x \le 0.5 \times 10^{-m}$。（若最后一个有效数字在$10^{-m}$位上）． 如$|\pi - 3.14| \le \frac{1}{2} \times 10^{-2}$

若 n 位有效数字，则$|x - x^*| \le \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$

若近似数$x^* = \pm 10^m \times \left(a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}\right)$， 有效数字为 n 位，则相对误差限$\varepsilon_r^* \le \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$

1.3 多元函数误差估计

$$A = f(x_1, x_2, x_3 \dots x_n)$$

$\Delta A \approx \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^* (x_1 - x_1^*) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^* (x_2 - x_2^*) + \cdots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^* (x_n - x_n^*)$

即$\Delta A \approx \left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^*\right| \cdot |\Delta x_1| + \left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^*\right| \cdot |\Delta x_2| + \cdots + \left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^*\right| \cdot |\Delta x_n|$

误差上限：$\Delta A \le \max_{x_1}\left|\frac{\partial f}{\partial x_1}\right| \cdot |\Delta x_1| + \max_{x_2}\left|\frac{\partial f}{\partial x_2}\right| \cdot |\Delta x_2| + \cdots + \max_{x_n}\left|\frac{\partial f}{\partial x_n}\right| \cdot |\Delta x_n|$

1.4 数值计算的基本原则（1）选择数值稳定好的计算公式（2）防止被除数远大于除数（大数除小数）（3）防止相近的数相减。（4）防止大数吃掉小数。（5）简化计算步骤。

泰勒展开公式$\sum_{n=0}^{\infty} f^n(a)/n!\,(x-a)^n$

二、插值

1、定理：在[a, b]上满足$P_n(x_i) = f(x_i) = y_i \;\; i = 0,1,\dots n$的插值多项式$P_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$存在且唯一。

证明：考虑关于$(a_0, a_1 \dots a_n)$的线性方程组，共有 n+1 个未知数，n+1 个方程，且行列式

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

2、拉格朗日插值

$$L_n(x) = l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + \cdots + l_n(x)y_n$$

满足在$l_i(x)$仅有在x_i处取 1，其余点取 0，即$l_i(x_j) = \delta_{ij}$

$$l_i(x) = \frac{(x - x_0)\dots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\dots(x - x_n)}{(x_i - x_0)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_n)}$$

记$\omega_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$

$$\omega'_{n+1}(x_i) = (x_i - x_0)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_n)$$

则 $l_i = \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_i)\omega'_{n+1}(x_i)}$ $\quad L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_i)\omega'_{n+1}(x_i)} y_i$

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

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

计算复杂度：每个插值基函数分母有 n-1 次乘法，分子 n-1 次乘法，再加一个除法，故每个插值基函数中涉及到 2n-1 次运算

3、插值余项

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

推导过程：记$R_n(x) = f(x) - L_n(x)$，满足 $R(x_i) = 0, i = 0,1\dots n$。则有$R_n(x) = K(x)(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n) = K(x)\omega_{n+1}(x)$。将$x$视为常数，$t$视为变量，构造关于 t 的函数$\varphi(t) = f(t) - L_n(t) - K(x)\omega_{n+1}(t)$，则$\varphi^{(n+1)}(t)$在$[a,b]$上至少有 1 个零点，设

$$\varphi^{(n+1)}(\xi) = 0 = f^{(n+1)}(\xi) - 0 - K(x)(n+1)!$$

$$\Rightarrow K(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

3、均差和牛顿插值

$f[x_0, x_k] = \frac{f(x_k) - f(x_0)}{x_k - x_0}$（一阶） $f[x_0, x_1, x_k] = \frac{f[x_0,x_k] - f[x_0,x_1]}{x_k - x_1}$

$f[x_0, x_1 \dots x_m] = \frac{f[x_0 \dots x_{m-2}, x_m] - f[x_0 \dots x_{m-2}, x_{m-1}]}{x_m - x_{m-1}}$

均差计算：

$$\begin{array}{lllll} x_0 & f(x_0) & & & \\ x_1 & f(x_1) & f[x_0,x_1] & & \\ x_2 & f(x_2) & f[x_0,x_2] & f[x_0,x_1,x_2] & \\ x_3 & f(x_3) & f[x_0,x_3] & f[x_0,x_1,x_3] & f[x_0,x_1,x_2,x_3] \end{array}$$

均差性质：

(1)解析表达式（用数学归纳法证明）

$f[x_0, x_1, \dots x_m] = \sum_{i=0}^{m} \frac{f(x_i)}{\omega'_{m+1}(x_i)}$

$= \sum_{i=0}^{m} \frac{f(x_i)}{(x_i - x_0)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_m)}$

(2)均差对节点有对称性（节点顺序可以交换）

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

证明：

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

插值余项：$R_n(x) = f[x, x_0, \dots, x_n]\omega_{n+1}(x)$

均差和导数的关系：$f[x, x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$

选择插值节点：优先选用离 x 近的节点插值。

计算复杂度：线性方程组求解：$O(n^3)$；拉格朗日法：$O(n^2)$；一次性使用全部节点的牛顿插值：$O(n^2)$；逐个添加的牛顿插值：$O(n)$

等距节点的牛顿插值公式：

设$x = x_0 + th, x_k = x_0 + kh$，则有$x - x_k = (t - k)h, t \in [0, n]$

牛顿前插公式：$f(x) \doteq f(x_0) + \Delta f_0 \cdot t + \frac{\Delta^2 f_0}{2} \cdot t(t-1) + \frac{\Delta^3 f_0}{3!} \cdot t(t-1)(t-2) + \cdots$

牛顿后插公式：$f(x) \doteq f(x_n) + \nabla f_n \cdot t + \frac{\nabla^2 f_n}{2} t(t+1) + \frac{\nabla^3 f_n}{3!} \cdot t(t+1)(t+2) + \cdots$

可证：$f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+m}] = \frac{1}{m!h^m}\Delta^m f_k = \frac{1}{m!h^m}\nabla^m f_{k+m}$ （数学归纳法，$f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+n+1}] = \frac{f[x_{k+1}, \dots, x_{k+n+1}] - f[x_k, \dots, x_{k+n}]}{x_{k+n+1} - x_k} = \frac{\frac{1}{n!h^n}(\Delta^n f_{k+1} - \Delta^n f_k)}{(n+1)h} = \frac{\Delta^{n+1} f_k}{(n+1)!h^{n+1}}$）

差分和导数的关系：$\frac{1}{n!h^n}\Delta^n f_k = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$

算符规则：$\Delta f_k = f_{k+1} - f_k$， $\nabla f_k = f_k - f_{k-1}$

$\delta f_k = f_{k+1/2} - f_{k-1/2}$，$\Delta^n f_k = \sum_{j=0}^{n}(-1)^j C_n^j f_{k+n-j}$，

$\nabla^n f_k = \sum_{j=0}^{n}(-1)^j C_n^j f_{k-j}$

4、埃尔米特插值

定理：满足$H_{2n+1}(x_i) = y_i\,, H'_{2n+1}(x_i) = y_i{}'$的$\le 2n+1$次多项式$H_{2n+1}$存在且唯一。

埃尔米特插值公式：这里$l_i^2(x)$是拉格朗日里那个

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

$$\begin{cases} \alpha_i(x) = \left[1 - 2(x - x_i)\sum_{\substack{j=0 \\ j \ne i}}^{n} \frac{1}{x_i - x_j}\right] l_i^2(x) \\ \beta_i(x) = (x - x_i) l_i^2(x_i) \end{cases}$$

插值余项：$R_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)$（证明方法：构造$\varphi(t) = f(t) - H_{2n+1} - K(x)\omega_{n+1}^2(t)$，求导 2n+2 次之后有 1 个零点$\xi$）

5、分段低次插值

（1）分段线性插值：把$[a,b]$分成 n 个子区间（一般等分），在每个子区间上线性插值。

$$|R(x)| \le \frac{1}{2}\max_{a \le x \le b}\left|f''(x)\right| \max_{x_k \le x \le x_{k+1}} |(x - x_k)(x - x_{k+1})|$$
$$\le \frac{1}{8}\max_{a \le x \le b}|f''(x)|\left(\frac{b-a}{n}\right)^2$$

（2）分段埃尔米特插值：每个小区间埃尔米特插值。$|R(x)| \le \frac{5}{384}\max_{a \le x \le b}\left|f^{(4)}(x)\right|\left(\frac{b-a}{n}\right)^4$

（3）三次样条插值：划分成 n 个区间。$S_i(x) = a_0^{(i)} + a_1^{(i)}x + a_2^{(i)}x^2 + a_3^{(i)}x^3$，共 4n 个未知数。联立方程：

$$\begin{cases} S_i(x_i) = y_i \\ S_i(x_{i+1}) = y_{i+1} \end{cases} \text{（2}n\text{个方程）}$$

$$\begin{cases} S'_i(x_{i+1}) = S_{i+1}{}'(x_{i+1}) \\ S''_i(x_{i+1}) = S_{i+1}{}''(x_{i+1}) \end{cases} (2n-2\text{ 个方程})$$

$$\begin{cases} S'_0(a) = 0 \\ S'_{n-1}(b) = 0 \end{cases} (2\text{ 个方程})$$

一般求取思路是先假设$S'(x_i)$已知，通过分段埃尔米特插值求解，然后利用二阶导连续，求$S'(x_i)$的值。有结论：$|R(x)| \le \frac{5}{384}M_4\left(\frac{b-a}{n}\right)^4$

（4）二次样条插值：以插值节点为中点划分区间，共 n+1 个区间，每个区间上为二次函数，共 3n+3 个未知量。联立方程：

$$\begin{cases} S_i(x_{i+1/2}) = S_{i+1}(x_{i+1/2}) \\ S_i{}'(x_{i+1/2}) = S_{i+1}{}'(x_{i+1/2}) \\ S_i(x_i) = y_i \end{cases}$$

一共 3n+1 个方程，加入 2 个边界条件，凑成 3n+3 个方程。

三、最佳逼近

1、误差度量：

（1）无穷范数（一致逼近、均匀逼近）$||f(x) - P(x)||_\infty = \max_{a \le x \le b}|f(x) - P(x)|$

（2）2 范数（均方逼近、平方逼近）$||f(x) - P(x)||_2 = \sqrt{\int_a^b [f(x) - P(x)]^2 dx}$

无穷范数比 2 范数条件更强。

2、最佳一致逼近

偏差$\max_{a \le x \le b}|f(x) - P_n(x)|$

切比雪夫定理：$P_n^*(x)$是$f(x) \in C[a,b]$的最佳一致逼近多项式$\Leftrightarrow P_n^*(x)$和$f(x)$在$[a,b]$上至少有 n+2 个正负相间的偏差点。（证明思路：充分性：假设有另一个最佳一致逼近多项式$Q_n(x)$，则在 n+2 个偏差点上，$P_n^*(x)$和$Q_n(x)$交叉变号，考虑到两者阶数为 n，故两者相等。）

推论 1：最佳一致逼近多项式是唯一的；推论 2：最佳一致逼近多项式是插值多项式。

最佳函数逼近的一般形式：n 次多项式，n+2 偏差点，先把偏差点的方程列出来(要么是边界点要么是极值点)，一共有 n+2 个偏差点，所以这里有 n+2 个方程，但同时耶多了 n+2 个未知数．此外极值点要求正负相间，所以可以列 n+2 个方程．一共有 2n+4 个方程，且有 2n+4 个未知数，故可解．

里米兹迭代逼近法：（1）选择$x_1, x_2, \dots, x_{n+2}$的近似初值；（2）代入方程$|f(x_k) - P_n(x_k)| = E_n$得到$P_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$；（3）用得到的$P_n(x)$和$f(x)$计算偏差点。（4）重复（2）和（3）直到收敛。

一致逼近误差：即为偏差点的偏差值。

3、切比雪夫多项式

$$T_n(x) = \cos(n\,arccos(x))$$
$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

$T_0(x) = 1; T_1(x) = x;\ T_2(x) = 2x^2 - 1; T_3(x) = 4x^3 - 3x;\ T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$

1)$T_n(x)$在$x_k = cos\frac{k\pi}{n}, k = 0,1,\dots,n$处交替取 1 和-1。

2)$T_n(x)$在$[-1,1]$上有 n 个零点。

3)$T_n(x)$在$[-1,1]$上带权$1/\sqrt{1-x^2}$正交

$$\int_{-1}^{1}\frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx = \begin{cases} 0 & n \ne m \\ \frac{\pi}{2} & n = m \ne 0 \\ \pi & n = m = 0 \end{cases}$$

用切比雪夫多项式求最佳一致逼近多项式：若$f(x)$比$P_n(x)$高 1 次，可以令$f(x) - P_n(x) = kT_{n+1}(x)$。如果$f(x)$定义域为$[a,b]$，要进行区间变换，令$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t, t \in [-1,1]$

直接变换函数有些复杂，由于我们知道近似最佳一致逼近就是在寻找插值节点，所以我们可以直接将插值节点进行线性变换.

4、最小零偏差多项式定理

$\omega_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$是与 0 的偏差最小的 n 次多项式。（证明思路：先用切比雪夫多项式证明$x^n - \frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$是与$x^n$偏差最小的 n-1 阶多项式，然后说明$\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$是与 0 偏差最小的。

这个最小值是$\Delta(\omega_n, 0) = \frac{1}{2^{n-1}}$

5、拉格朗日插值余项最小化

假设$f(x)$定义域在$[-1,1]$(否则区间变换)。由于最佳一致逼近多项式一定是一个插值多项式，故只需要找到插值节点。考虑插值余项$|R_{n-1}(x)| \le \frac{M_n}{n!}|\omega_n(x)|$，最小化$\omega_n(x)$可以得到$\omega_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}}T_n(x), x_k = \cos\frac{2k-1}{2n}\pi, k = 1,2,\dots,n$

若经过了区间变换，则$\omega_n(x) = \left(\frac{b-a}{2}\right)^n \cdot \frac{1}{2^{n-1}}T_n(t)$

6、最佳平方逼近

基本定义：（1）$||f(x) - P_n(x)||_2 = \sqrt{\int_a^b [f(x) - P_n(x)]^2 dx}$

2)**权函数:**满足$\rho(x) \geqslant 0$，$\int_a^b \rho(x)g(x)dx = 0 \Rightarrow g(x) = 0$

3)f, g关于$\rho(x)$的内积：$(f,g) = \int_a^b \rho(x)f(x)g(x)dx$

4)欧式范数：$(f,f)^{0.5} = \left(\int_a^b \rho(x)f^2(x)dx\right)^{0.5} = ||f||_2$

5)最佳平方逼近$S^*(x)$，满足：$\int_a^b \rho(x)[S^*(x) - f(x)]^2 dx$最小。设$\varphi_i$为一组基（通常是$(1, x, x^2 \dots)$），$S^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x)$

最佳平方逼近求解：

构造$S^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j^* \varphi_j(x)$，则$(a_0, a_1, \dots, a_n)$由方程组解出

$$\begin{cases} (\varphi_0, \varphi_0)a_0 + (\varphi_0, \varphi_1)a_1 + \cdots + (\varphi_0, \varphi_n)a_n = (f, \varphi_0) \\ (\varphi_1, \varphi_0)a_0 + (\varphi_1, \varphi_1)a_1 + \cdots + (\varphi_1, \varphi_n)a_n = (f, \varphi_1) \\ \dots \\ (\varphi_n, \varphi_0)a_0 + (\varphi_n, \varphi_1)a_1 + \cdots + (\varphi_n, \varphi_n)a_n = (f, \varphi_n) \end{cases}$$

均方误差：$\int_a^b \rho(x)[S(x) - f(x)]^2 dx = ||f||_2^2 - \sum_{j=0}^{n} a_j(\varphi_j, f)$

（证明思路：$0 = \frac{\partial I}{\partial a_k} = \int_a^b \rho(x) \cdot 2\left[\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x) - f(x)\right]\varphi_k(x)dx \Rightarrow \left(\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j - f, \varphi_k\right) = 0$）

7、函数按正交多项式展开

（1）用正交多项式作最佳平方逼近：若φ_i是正交的（线性无关），则$a_k = \frac{(f, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)}$，$||f||_2^2 - \sum_{j=0}^{n} a_j(f, \varphi_j) = ||f||_2^2 - \sum_{j=0}^{n}\frac{(f, \varphi_j)^2}{(\varphi_j, \varphi_j)}$

（2）按切比雪夫多项式展开：$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，

$a_0 = \frac{1}{\pi}\int_{-1}^{1}\frac{f(x)T_0(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx$， $a_k = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1}\frac{f(x)T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx$， 记$C_k = \frac{2}{\pi}(f, T_k), k = 0, \cdots, n$，

则$S^*(x) = \frac{C_0}{2} + \sum_{j=1}^{n} C_j T_j(x)$

误差$E_n = a_{n+1}T_{n+1}(x)$

（3）勒让德多项式

1)定义$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}[(x^2 - 1)^n]$

2)前几项：$P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_2(x) = \frac{(3x^2 - 1)}{2}, P_3(x) = \frac{(5x^3 - 3x)}{2}, P_4(x) = \frac{(35x^4 - 30x^2 + 3)}{8}, P_5(x) = \frac{63x^5 - 70x^3 + 15x}{8}$

3)首项系数： $\frac{2n(2n-1)\dots(n+1)}{2^n n!}$

首 1 的勒让德多项式：$\widetilde{P_n}(x) = \frac{n!}{(2n)!}\frac{d^n}{dx^n}[(x^2 - 1)^n]$

4)内积：权函数为 1，$(P_n, P_m) = \int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx = \begin{cases} 0 & n \ne m \\ \frac{2}{2n+1} & n = m \end{cases}$

5 递推关系 $(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$

6)奇偶交替： 奇数次时为奇函数，偶数次时为偶函数；

7)在 [-1, 1] 上所有最高次项系数为 1 的 n 次多项式中$\widetilde{P_n}(x)$是零函数的最佳平方逼近。

8)用勒让德多项式作最佳平方逼近：

$S^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j P_j(x)$ 其中$a_k = \frac{2k+1}{2}(f, P_k)$，

误差$||f||_2^2 - \sum_{j=0}^{n} a_j(f, P_j) = ||f||_2^2 - \sum_{j=0}^{n}\frac{2j+1}{2}(f, P_j)^2$

8、曲线拟合

1）定义：$S^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x)$，使$\sum_{i=0}^{m}[S(x_i) - y_i]^2$最小。此时的$(x_i, y_i, w_i)$是离散的。

2)求解方法：记$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)$

$(f, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)f(x_i)\varphi_k(x_i) = d_k$

则$\sum_{j=0}^{n} a_j(\varphi_j, \varphi_k) = (f, \varphi_k) = d_k$，和连续情况完全类似。

四、数值积分与数值微分

1、插值多项式求积分

$I = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} l_k(x)f(x_k)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

$A_k = \int_a^b l_k(x)dx$

2、截断误差：$R[f] = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx$

3、代数精度

$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 对次数$\le m$的多项式准确成立，则称 m 阶代数精度。

1)插值型有 n 次代数精度；$\ge n$次精度一定是插值型的。

2)n 为偶数时，牛顿-科特斯公式有 n+1 次代数精度。（证：$R[f] = \int_a^b \prod_{j=0}^{n}(x - x_j)dx = h^{n+2}\int_0^n \prod_{j=0}^{n}(t - j)dt = 0$）

3)考虑代数精度只要考虑基函数$(1, x, x^2 \dots)$处的精度。

当$\sum_{k=0}^{n}|A_k|$有界时， 代数精度 n 越大，方法误差越小．而当系数同号时，系数的和是常数

4、牛顿-科特斯公式

$$x_k = a + kh, \qquad x = a + th,\ x - x_k = (t - k)h$$

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

其中$C_k^{(n)} = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{j \ne k}\frac{t-j}{k-j}dt$

当阶数 n 为偶数时， 牛顿-柯特斯公式至少具有 n+1 次代数精度． 证明思路：对于 n+1 次多项式，积分的误差为 0，也即插值误差的积分为 0．设 f 为 n+1 次首项系数为 1 的代数多项式， 则 n+1 次导数可以表示成阶乘的形式． 把 x 用牛顿-柯特斯公式中的 t 和 h 换了元，由于 n 为偶数，则 n/2 为整数，则被积函数是奇函数.

$I = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = (b-a)\ \sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k)$

中矩形公式 $S = f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a)$，$R_S = \frac{(b-a)^3}{24}f''(\eta)$

梯形公式(n=1)：$T = [\frac{1}{2}f(a) + \frac{1}{2}f(b)](b-a)$

$R_T = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$ （不变号，直接外提）

辛普生公式(n=2)：$S = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]$

$R_S = -\frac{(b-a)^5}{2880} \cdot f^{(4)}(\eta)$ （构造 $H(x), R = I - S = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^{3} A_k f(x_k) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^{3} A_k H(x_k) = \int_a^b f(x) - H(x)dx = \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx$，而后提出导数。）

科特斯公式(n=4)

$S = \frac{b-a}{90}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$

5、复化积分公式

把[a, b]区间 n 等分，分为 n 个子区间， 有$[x_k, x_{k+1}], k = 0,1, \cdots, n-1, h = \frac{b-a}{n}$

复化梯形：$I = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right]$

$R[f] = -\frac{nh^3}{12}f''(\eta) = -\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\eta) \to -\frac{h^2}{12}(f'(b) - f'(a))$ 所以是二阶收敛

复化辛普生公式：$I = \frac{h}{6}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_k + \frac{h}{2}\right) + f(b)\right]$

$R[f] = -\frac{(b-a)h^4}{2880}f^{(4)}(\eta) \to -\frac{h^4}{2880}(f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a))$ 四阶收敛

当取的点数相同时，复化梯形公式和复化辛普生公式后者更好

6、龙贝格算法和外推加速

1、复化梯形公式递推

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

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

2、龙贝格算法 $\frac{I - T_{2n}}{I - T_n} \approx \frac{1}{4}$

$I - T_{2n} = \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$，$\overline{S_n} = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$

（复化梯形公式→辛普生公式）

$C_n = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n$（辛普生公式→科特斯公式）

$R_n = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n$（科特斯公式→龙贝格公式，8 阶收敛）

可证$T_n = I + a_1 h^2 + a_2 h^4 + \cdots + a_l h^{2l} + \cdots$

$T_{2n} = I + a_1 \cdot \frac{h^2}{4} + a_2 \cdot \frac{h^4}{16} + \cdots + a_l \cdot \frac{h^{2l}}{4^l} + \cdots$

令$\lambda_1 T_n + \lambda_2 T_{2n} = I + bh^4 + \cdots$可以解出$\lambda_1 = -\frac{1}{3}$，$\lambda_2 = \frac{4}{3}$

3、李查逊外推加速法

$T_0^{(k)}$表示二分 k 次的复化梯形公式，$T_m^{(k)}$表示加速 m 次的结果。

$T_m^{(k)} = \frac{4^m}{4^m - 1}T_{m-1}^{(k+1)} - \frac{1}{4^m - 1}T_{m-1}^{(k)}$ （加速 1 次，速度提高 2 阶。）

$$\begin{array}{ccccc} T_0^{(0)} & & & & \\ & \searrow & & & \\ T_0^{(1)} & \rightarrow & T_1^{(0)} & & \\ & \searrow & & \searrow & \\ T_0^{(2)} & \rightarrow & T_1^{(1)} & \rightarrow & T_2^{(0)} \quad \cdots \end{array}$$

第 n 行：k=n-1，一共 2^{n-1}个子区间，一共 2^k+1 个点

第 n 列:m=n-1，收敛速度为 h^{2n}

4、高斯求积公式

如果x_k可选。

高斯公式：$I = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$有 2n+1 次代数精度。

$R[f] = \int_a^b f[x, x_0, x_1, \dots, x_n]\omega_{n+1}dx = 0$ ($f(x) \le 2n+1$ 次)

高斯公式$\Leftrightarrow \omega_{n+1}(x)$与所有$\le n$次多项式正交。

（可解方程求解高斯公式，$1, x, x^2 \dots x^{2n+1}$）

高斯-勒让德公式

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

取x_k为$P_{n+1}(x)$的零点，可得到 2n+1 阶代数精度。对插值基函数积分得到A_k。

n	x	A
1	0	2
2	±0.5773502692	1
3	±0.77459666920 0	0.5555555556 0.8888888889
4	±0.8611363116 ±0.3399810436	0.3478548451 0.6521451549
5	±0.9061798459 ±0.53845931010 0	0.2369268851 0.4786286705 0.5688888889

当 n=1 时， 对应的是 P_2， 对应表格数据的第二行， 具有 2n+1=3 次代数精度， 此时有 n+1=2 个点

区间变换

$x=\frac{a+b}{2}+\frac{t}{2}(b-a),\ t\in[-1,1]$　$\int_a^b f(x)dx=\int_{-1}^{1} f\left(\frac{(b-a)t+b+a}{2}\right)\frac{b-a}{2}dt$

$\int_a^b f(x)dx=\frac{b-a}{2}\sum_{k=0}^{n} A_k F(t_k)$

余项： $R[f]=\frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3}f^{(2n+2)}(\eta)$

带权高斯公式： $\int_a^b \rho(x)f(x)dx=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)+R[f]$

$A_k=\int_a^b \rho(x)l_k(x)dx$，有 2n+1 阶代数精度⇔ $\omega_{n+1}(x)$与所有$\le n$次多项式带权正交。

高斯切比雪夫公式： $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，$x_k=\cos\frac{2k+1}{2n+2}\pi$，

$R[f]=\frac{2\pi}{2^{2n+2}(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\eta)$

5、数值微分

$f'(a)=\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$(向前差商　一阶误差)

$f'(a)=\frac{f(a)-f(a-h)}{h}$(后　一阶误差)

$f'(a)=\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$(中间，2 阶误差)

$P_n(x)$近似$f(x)$，$E=\left\{\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\right\}'\omega_{n+1}(x)+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'_{n+1}(x)$

$E(x_k)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'_{n+1}(x_k)$

两点公式： $P_1'(x)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}, E(x_0)=-\frac{f^{(2)}(\xi)}{2}h, E(x_1)=\frac{f^{(2)}(\xi)}{2}h$

五、常微分方程数值解

$\begin{cases}y'=f(x,y)\\ y(x_0)=y_0\end{cases}$　**欧拉法：** $y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)$

局部方法误差：$y(x_{n+1})-y_{n+1}=\frac{h^2}{2}y^{(2)}(x_n)=o(h^2)$（一阶精度）

累积方法误差：$\Delta_{n+1}=\left[1+h\frac{\partial f}{\partial y}(x_n,\eta_n)\right]\Delta_n+\frac{h^2}{2}y^{(2)}(\xi_n)$

$\Delta_{n+1}\le[(1+hM)^{n+1}-1]\cdot\frac{hL}{2M}$，$\left|\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)\right|\le M, |y^2(x)|\le L$

累积存储误差：$\delta_{n+1}\le\left[1+h\left|\frac{\partial f}{\partial y}(x_n,\eta_n)\right|\right]\delta_n+\frac{1}{2}\times 10^{-m}$

$\delta_{n+1}\le[(1+hM)^{n+1}-1]\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{hM}\cdot 10^{-m}$

$$y^{(2)}(x)=\frac{dy'}{dx}=\frac{df(x,y)}{dx}=\frac{\partial f}{\partial x}+\frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx}=\frac{\partial f}{\partial x}+\frac{\partial f}{\partial y}f$$

后退的欧拉公式： $y_{n+1}=y_n+hf(x_{n+1},y_{n+1})$

$$y_{n+1}^{(k+1)}=y_n+hf\left(x_{n+1},y_{n+1}^{(k)}\right),\quad y_{n+1}=\lim_{k\to\infty}y_{n+1}^{(k)}$$

$y(x_{n+1})-y_{n+1}=-\frac{h^2}{2}y^{(2)}(x_{n+1})$　（一阶精度）

欧拉两步公式： $y_{n+1}=y_{n-1}+2hf(x_n,y_n)$

$y(x_{n+1})-y_{n+1}=\frac{h^3}{3}y^{(3)}(x_n)=o(h^3)$（二阶精度）

使用欧拉两步公式时，我们一般先用其它方法（如欧拉法）得到 y_1，然后用 y_0, y_1 计算 y_2，再 $y_3, y_4, \cdots$.

累积误差：

$$\Delta_{n+1}=\Delta_{n-1}+2h\frac{\partial f}{\partial y}(x_n,y_n)\Delta_n+\frac{h^3}{3}y^{(3)}(x_n)=\cdots=\begin{cases}C_1\Delta_1+C_2h^2, & n\text{为奇}\\ \Delta_1+C_2h^2, & n\text{为偶}\end{cases}$$

改进欧拉法： $\begin{cases}\bar{y}_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)\\ y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},\bar{y}_{n+1})]\end{cases}$

$\left|\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)\right|\le M, \left|y^{(2)}(x)\right|\le L, \left|y^{(3)}(x)\right|\le T$

局部截断误差：$y(x_{n+1})-y_{n+1}=-\frac{h^3}{12}y^{(3)}(x_n)=o(h^3)$

方法累积误差：$\begin{cases}\bar{\Delta}_{n+1}\le(1+hM)\Delta_n+\frac{L}{2}\cdot h^2\\ \Delta_{n+1}\le\Delta_n+\frac{h}{2}M\Delta_n+\frac{h}{2}M\bar{\Delta}_{n+1}+\frac{T\cdot h^3}{12}\end{cases}$

$\Delta_{n+1}\le\left(1+hM+\frac{h^2M^2}{2}\right)\Delta_n+\left(\frac{LM}{4}+\frac{T}{12}\right)h^3$

$\Delta_n\le\frac{h^2(3ML+T)}{6M(2+hM)}\left[\left(1+hM+\frac{h^2M^2}{2}\right)^n-1\right]$

舍入误差：$\begin{cases}\bar{\delta}_{n+1}\le(1+hM)\delta_n+\frac{1}{2}\times 10^{-m}\\ \delta_{n+1}\le\delta_n+\frac{h}{2}M\delta_n+\frac{h}{2}M\bar{\delta}_{n+1}+\frac{1}{2}\times 10^{-m}\end{cases}$

$\delta_{n+1}\le\left(1+hM+\frac{h^2M^2}{2}\right)\delta_n+\left(\frac{hM}{2}+1\right)\times\frac{1}{2}\times 10^{-m}$

判断精度：把所有处理成准确的，然后在 x_n 处泰勒展开，注意展开时的步长，然后相减

梯形法： 若$f(x_{n+1},y_{n+1})$可分离y_{n+1}，可以从$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})]$导出$y_{n+1}$表达式。

欧拉公式+后退欧拉公式/2

龙格-库塔法（R-K 法）

$K_1=f(x_n,y_n), K_2=f(x_{n+p},y_n+phK_1), K_3=f(x_{n+q},y_n+qh(rK_1+sK_2))$

二阶龙格-库塔

设$y_{n+1}=y_n+h[\lambda_1K_1+\lambda_2K_2]\Rightarrow\begin{cases}\lambda_1+\lambda_2=1\\ \lambda_2p=\frac{1}{2}\end{cases}$

证明：$y(x_{n+1})=y(x_n)+hf(x_n,y(x_n))+\frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x}+\frac{\partial f}{\partial y}\cdot y'\right)|x_n+\cdots$

$y_{n+1}=y_n+h[\lambda_1f(x_n,y_n)+\lambda_2f(x_{n+p},y_n+phK_1)]=y(x_n)+h[\lambda_1f(x_n,y_n)+\lambda_2(f(x_n,y(x_n))+ph\frac{\partial f}{\partial x}|_{x_n}+phK_1\frac{\partial f}{\partial y}|_{x_n})]$

改进欧拉： $\lambda_1=\lambda_2=\frac{1}{2}$，$p=1$

变形欧拉： $\lambda_1=0,\lambda_2=1,p=\frac{1}{2}$

$y_{n+1}=y_n+hf(x_n+\frac{h}{2},y_n+\frac{h}{2}K_1)$

$\Leftrightarrow\begin{cases}\bar{y}_{n+\frac{1}{2}}=y_n+\frac{h}{2}f(x_n,y_n)\\ y_{n+1}=y_n+hf(x_{n+\frac{1}{2}},\bar{y}_{n+\frac{1}{2}})\end{cases}$

局部截断误差：$y(x_{n+1})-y_{n+1}=\frac{h^3}{24}y^{(3)}(x_n)=o(h^3)$

四阶龙格-库塔

$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{6}[K_1+2K_2+2K_3+K_4]$

$K_1=f(x_n,y_n)$，$K_2=f(x_n+\frac{h}{2},y_n+\frac{h}{2}K_1)$　$K_3=f\left(x_n+\frac{h}{2},y_n+\frac{h}{2}K_2\right)$，$K_4=f(x_{n+1},y_n+hK_3)$，$y(x_{n+1})-y_{n+1}=o(h^5)$

线性多步法　(1)显性：

$y(x_{n+1})=y(x_n)+\int_{x_n}^{x_{n+1}}f(x,y(x))dx=y(x_n)+\sum_{k=0}^{m}A_kf(x_{n-k},y_{n-k})$，$A_k=\int_{x_n}^{x_{n+1}}l_k(x)dx$

$m=1$: $y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[3f_n-f_{n-1}]$，$E=\frac{5h^3}{12}f^{(2)}(y)$ 二阶精度

求法：当 m=1 时，两个节点x_n, x_{n-1}，

则插值多项式：$P_1(x)=\frac{x-x_n}{x_{n-1}-x_n}f_{n-1}+\frac{x-x_{n-1}}{x_n-x_{n-1}}f_n$

而$A_0=\int_{x_n}^{x_{n+1}}\frac{x-x_n}{x_{n-1}-x_n}dx=-\frac{h}{2}$，$A_1=\int_{x_n}^{x_{n+1}}\frac{x-x_{n-1}}{x_n-x_{n-1}}dx=\frac{3}{2}h$

$m=2$：$E=\frac{9h^4}{24}f^{(3)}(y)$ 三阶精度

(2)隐性：

$y_{n+1}=y_n+\sum_{k=0}^{m}A_kf(x_{n+1-k},y_{n+1-k})$，$A_k=\int_{x_n}^{x_n+1}l_k(x)dx$

$m=1$: $y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f_n+f_{n+1}]$，$E=-\frac{h^3}{12}f^{(2)}(y)$ 二阶精度

$m=2$: $E=-\frac{h^4}{24}f^{(3)}(y)$　三阶精度

当 m=1 时是梯形公式

(3)显性+隐性：$\begin{cases}\bar{y}_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[3f_n-f_{n-1}]\\ y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f_n+\bar{f}_{n+1}]\end{cases}$

(4)泰勒展开构造：

$y_{n+1}=\alpha_3y_{n-3}+h[\beta_0f_n+\beta_1f_{n-1}+\beta_2f_{n-2}]$

全部在x_n展开，对比系数：

米尔尼公式：$y_{n+1}=y_{n-3}+h[\frac{8}{3}f_n-\frac{4}{3}f_{n-1}+\frac{8}{3}f_{n-2}]$

$y(x_{n+1})-y_{n+1}=o(h^5)$

辛普生公式：$y_{n+1}=\alpha y_{n-1}+\frac{h}{3}[f_{n+1}+4f_n+f_{n-1}]$

方程组与高阶方程

一阶方程组： $\begin{cases}y_1'=f(x,y_1,y_2)\\ y_2'=f_2(x,y_1,y_2)\\ y_1(x_0)=y_{10}\\ y_2(x_0)=y_{20}\end{cases}\Leftrightarrow\begin{cases}Y'=F(x,Y)\\ Y(x_0)=Y_0\end{cases}$

套用四阶龙格库塔公式。

高阶方程： $\begin{cases}y^{(m)}=f(x,y,y',y^{(2)},\dots,y^{(m-1)})\\ y(x_0)=y_0\\ y'(x_0)=y_0'\\ \dots\\ y^{(m-1)}(x_0)=y_0^{(m-1)}\end{cases}$

$\Leftrightarrow\begin{cases}y_m'=f(x,y_1,y_2,\dots y_m)\\ y_1'=y_2\\ y_2'=y_3\\ \dots\\ y_{m-1}'=y_m\end{cases}$

边值问题

$$\begin{cases}y^{(2)}-q(x)y=r(x)\\ y(a)=\alpha\\ y(b)=\beta\end{cases}\Leftrightarrow\begin{cases}\frac{y_{n+1}-2y_n+y_{n-1}}{h^2}-q_ny_n=r_n\\ y_0=\alpha\\ y_N=\beta\end{cases}$$

$(1\le n\le N-1)$ 可以证明方程一定有解且是收敛的。

六、方程求根

收敛性 1： 若对$x\in[a,b]$（1）$\varphi(x)\in[a,b]$；(2)$\forall x,\bar{x}\in[a,b]$，存在$0<L<1$(L 为李普希兹常数)，使$|\varphi(x)-\varphi(\bar{x})|\le L|x-\bar{x}|$。则$\forall x_0\in[a,b]$，$x_{n+1}=\varphi(x_n)$收敛到$x^*$，$x^*=\varphi(x^*)$

收敛性 2： 若（1）$\varphi'(x)$在x^*附近连续。（2）$|\varphi'(x^*)<1|$。则$x_{n+1}=\varphi(x_n)$在x^*附近局部收敛。（证明：存在邻域使$|\varphi'(x)-\varphi'(x^*)|\le\frac{1-|\varphi'(x^*)|}{2}$）

收敛速度（泰勒）： $e_{n+1}=x_{n+1}-x^*=\varphi(x_n)-\varphi(x^*)=\varphi'(x^*)e_n+\varphi^{(2)}(x^*)\frac{e_n^2}{2}+\cdots+\varphi^{(p)}\frac{e_n^p}{p!}+\cdots$

若$\varphi'(x^*)=\varphi^{(2)}(x^*)=\cdots=\varphi^{(p-1)}=0$，则$e_{n+1}=ce_n^p$(p 阶收敛)

收敛速度（递推）： $|x_{k+1}-x_k|\le L^k|x_1-x_0|\Rightarrow|x_k-x^*|\le\frac{1}{1-L}|x_{k+1}-x_k|\Rightarrow|x_k-x^*|\le\frac{L^k}{1-L}|x_1-x_0|$ 这也是估计方法误差的办法

牛顿法：

$\varphi(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}$

$\varphi'(x^*)=1-1+\frac{f(x^*)f^{(2)}(x^*)}{[f'(x^*)]^2}=0$ 故二阶收敛。

截断误差：$e_{n+1}=\frac{1}{2}\varphi''(\xi)e_n^2\le\frac{M}{2}|e_n|^2\Rightarrow|e_{n+1}|\le\frac{2}{M}\left[\frac{M}{2}|e_0|\right]^{2^{n+1}}$

$\frac{M}{2}\cdot|e_0|<1$时收敛：选择δ_0，计算M，若不满足$\frac{M}{2}\delta_0<1$，可取$\delta_0'=\frac{2}{M}$，即可满足。1 阶收敛$|e_n|\sim L^n$，2 阶收敛$|e_n|\sim L^{2^n}$

舍入误差：$\delta_{n+1}\leqslant max|\varphi'(x)|\delta_n+\frac{1}{2}\times 10^{-m}$

例子：$x^2-2=0$，初始区间$[1,2\sqrt{2}-1]$，初值 1。一般分析：$e_n\le\left(\frac{1}{2}\right)^n\cdot(\sqrt{2}-1)<\left(\frac{1}{2}\right)^{n+1}$/ 精确分析：$M\le 2,|e_n|\le\frac{2}{M}\left[\frac{M}{2}\cdot|e_0|\right]^{2^n}$

牛顿下山法： $\bar{x}_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$

检查$|f(\bar{x}_{k+1})|<|f(x_k)|$是否成立。若成立，$x_{k+1}=\bar{x}_{k+1}$，否则$x_{k+1}=\lambda\bar{x}_{k+1}+(1-\lambda)x_k$（$\lambda$从 1 开始逐次尝试减半）

重根问题： 若x^*是$f(x)$的 m 重根，则有两种改良方法.

（1）令$\varphi(x)=x-m\frac{f(x)}{f'(x)}$；(2)令$u(x)=\frac{f(x)}{f'(x)}$，则$u(x)$以$x^*$为单根，　这样把 f(x)=0 的问题转化为 u(x)=0 的问题。

弦截法： 用均差代替求导 $x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f[x_n,x_{n-1}]}$

收敛速度：$|e_{n+1}|\le M|e_n|\cdot|e_{n-1}|$，$e_n=ce_{n-1}^{\frac{1+\sqrt{5}}{2}}=ce_{n-1}^{1.618}$

（证明：$P_1(x)=f(x_n)+f[x_n,x_{n-1}](x-x_n)$，$P_1(x_{n+1})-P_1(x^*)=-P(x^*)=f[x_n,x_{n-1}](x_{n+1}-x^*)=f'(\xi_1)e_{n+1}=\frac{f^{(2)}(\xi_2)}{2}(x-x_n)(x-x_{n-1})=\frac{f^{(2)}(\xi_2)}{2}e_ne_{n-1}$）

取δ_0足够小，使得$M\delta_0<1$

抛物线法： $x_{n+1}=x_n-\frac{2f(x_n)}{\omega\pm\sqrt{\omega^2-4f(x_n)f[x_n,x_{n-1},x_{n-2}]}}$，$\omega=f[x_n,x_{n-1}]+f[x_n,x_{n-1},x_{n-2}](x_n-x_{n-1})$，$p=1.840$

七、线性方程组求解

高斯消去： 用当前行的首元素对后面所有行消元。计算量$O(n^3)$，其中回代这一步计算量是$O(n^2)$

定理：高斯消去能进行⇔A 的各阶顺序主子式均不为 0。

列主元素消去：可以交换行。（A 可逆）

行主元素消去：可以交换列。全面主元素消去：行列都可换。

三角分解： 若 A 的$1\sim n-1$主子式均不为 0，则 A=LU。（L 单位下三角，U 上三角。）且分解唯一。(注意主子式得 0 可能不唯一分解

三角分解解方程： $\boldsymbol{Ax=LUx=b\Rightarrow Ly=b,Ux=y}$

追赶法（三对角线方程组）：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & & \dots & & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1}\\ & & & a_n & b_n\end{bmatrix}=\boldsymbol{LU}=$$

$$\begin{bmatrix}\alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & & \dots & & \\ & & \gamma_{n-1} & \alpha_{n-1} & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & \dots & & \\ & & & 1 & \beta_{n-1}\\ & & & & 1\end{bmatrix}$$

$$\alpha_1=b_1,\beta_1=\frac{c_1}{b_1},\gamma_i=a_i,\alpha_i=b_i-\gamma_i\beta_{i-1},\beta_i=\frac{c_i}{\alpha_i}$$

$$Ly=f\Rightarrow y_1=\frac{f_1}{b_1},y_i=\frac{f_i-a_iy_{i-1}}{b_i-a_i\beta_{i-1}}$$

$$Ux=y\Rightarrow x_n=y_n,x_i=y_i-\beta_ix_{i+1}$$

平方根法（A 为对称正定矩阵）

$$A=LU,U=\begin{bmatrix}u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \dots & \frac{u_{1n}}{u_{11}}\\ & 1 & \dots & \\ & & \ddots & \\ & & & 1\end{bmatrix}=DU_0$$

$$A=LDU_0\quad A^T=U_0^TD^TL^T\Rightarrow L=U_0^T\Rightarrow A=LDL^T$$

$\Rightarrow\begin{cases}LD^{\frac{1}{2}}y=b\\ \left(LD^{\frac{1}{2}}\right)^Tx=y\end{cases}$　或　$\begin{cases}Lz=b\\ Dy=z\\ L^Tx=y\end{cases}$

范数： 满足（1）非负（2）线性（3）三角不等式

$||x||_1=\sum_{i=1}^{n}|x_i|$　$||x||_2=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}x_i^2}$，$||x||_\infty=\max_{1\le i\le n}|x_i|$

$||A||_1=\max_{1\le j\le n}(\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|)$（每列求和），$||A||_\infty=\max_{1\le i\le n}(\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|)$

$||A||_2=\sqrt{\lambda_{max}(A^TA)}$(最大特征值)

误差分析

$$\begin{cases}A\to A+\delta A\\ b\to b+\delta b\end{cases}\Rightarrow x\to x+\delta x$$

δb贡献：$\frac{||\delta x||}{||x||}\le||A||\cdot||A^{-1}||\cdot\frac{||\delta b||}{||b||}$，$\delta A$贡献：$\frac{||\delta x||}{||x||}\le||A^{-1}||\cdot||A||\cdot\frac{||\delta A||}{||A||}$，综合考虑是两者相加。

定义条件数$Cond(A)=||A||\cdot||A^{-1}||$，$Cond(A)$过大称 A 病态。

事后估计（舍入误差）$||x^*-\bar{x}||\le A^{-1}(b-A\bar{x})$，$\frac{1}{||x^*||}\le\frac{||A||}{||b||}\Rightarrow\frac{||x^*-\bar{x}||}{||x^*||}\le||A||||A^{-1}||\cdot\frac{||b-A\bar{x}||}{||b||}$

迭代法： $\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{Bx}^{(k)}+\boldsymbol{f}$　（复杂度n^2k）

雅可比迭代法： $Ax=b$，$A=D+L+U=\begin{bmatrix}a_{11} & & \\ & \ddots & \\ & & a_{nn}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0 & & & \\ a_{21} & 0 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0 & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ & 0 & & \vdots\\ & & \ddots & a_{n-1,n}\\ & & & 0\end{bmatrix}$

$$B=-D^{-1}(L+U)\quad;\quad f=D^{-1}b$$

D 是对角矩阵

迭代公式 $\mathbf{x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+f}$

$$\mathbf{x=-D^{-1}(L+U)x+D^{-1}b}$$

高斯-赛德尔迭代法（G-S 法）

$$\boldsymbol{B}=-(D+L)^{-1}U;\quad f=(D+L)^{-1}b$$

迭代法收敛： 对任意初值收敛⇔ $\rho(B)=\max|\lambda|<1$

迭代法收敛的充分条件是$||B||<1$，$||B||$是任意一种与向量范数相容的矩阵范数。

构造一般迭代法： $x=(I-TA)x+Tb$，构造 T，使得 TA 是上三角矩阵，并有$||I-TA||<1$（复杂度n^3）

严格对角优势矩阵定理： 若严格对角优势（对角线元素比同行元素和更大），那么雅可比迭代法和高斯-赛德尔迭代法均收敛。

正定：特征值均大于 0，顺序主子式均大于 0

正定对称收敛定理： 若 A 正定对称，则 G-S 法收敛。（证明：$L=U^T$，λ为$(D+L)^{-1}U$的特征值，则$(D+L)Uy=\lambda y$，$\bar{\lambda}=\frac{(Uy,y)}{(Dy,y)+(Ly,y)}$，记$(Uy,y)=\alpha+i\beta$，$(Dy,y)=\gamma>0$，则 $(Ly,y)=\alpha-i\beta$，$2\alpha+\gamma>0$，$\bar{\lambda}=\frac{\alpha+i\beta}{\gamma+\alpha-i\beta}$，$|\lambda|^2=\frac{\alpha^2+\beta^2}{(\gamma+\alpha)^2+\beta^2}$，分母-分子=$\gamma(\gamma+2\alpha)>0$）

若 A 对称且对角元素大于 0，则雅可比方法收敛的充要条件是 A 和 2D-A 均正定。

逐次超松弛迭代法：（SOR 法）

G-S 法：$x^{(k+1)}=x^{(k)}+D^{-1}[b-Lx^{(k+1)}-(D+U)x^{(k)}]$

引入ω，$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\omega D^{-1}[b-Lx^{(k+1)}-(D+U)x^{(k)}]$

$\Rightarrow x^{(k+1)}=\{(D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D-\omega U]\}x^{(k)}+\omega(D+\omega L)^{-1}b$

SOR 收敛⇒ $0<\omega<2$（证明：收敛⇒特征值小于 1，可以求 B 的行列式=所有特征值相乘=$|(1-\omega)^n|$

A 正定对称且$0<\omega<2$ ⇒SOR 收敛。

ω最佳值：$\omega=\frac{2}{1+\sqrt{1-\rho^2(B_0)}}>1$（$B_0$为雅可比迭代矩阵）

迭代法事后估计： $\left\|x^{(k)}-x^*\right\|\le\frac{||B||}{1-||B||}\cdot\left\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\right\|=\frac{||B||^k}{1-||B||}\cdot||x^{(1)}-x^{(0)}||$

存储误差影响： $||\delta_{k+1}||\le||B||\cdot||\delta_k||+\left\|\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\times 10^{-m}\\ \dots\\ \frac{1}{2}\times 10^{-m}\end{pmatrix}\right\|$

八、矩阵特征值求解

幂法： 适用：计算主特征值，大型稀疏矩阵，要求完备。

算法：若 A 有完备特征向量组（n 个线性无关特征向量），$\forall v_0\ne 0$，$v_{k+1}=Av_k$，λ_1为 A 的主特征值，x_1是对应的特征向量，则$\lim_{k\to\infty}\frac{v_k}{\lambda_1^k}=\alpha_1x_1$，$\lim_{k\to\infty}\frac{(v_{k+1})_i}{(v_k)_i}=\lambda_1$（实际计算时要归一化$v_k=Au_{k-1},u_k=v_k/\max\{v_K\}$）（推导：$\forall v_k=A^kv_0=a_1\lambda_1^kx_1+a_2\lambda_2^kx_2+\cdots=\lambda_1^k\left[a_1x_1+\sum a_i\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^kx_i\right]\to a_1x_1\lambda_1^k$）

反幂法： 计算模最小的特征值，也可用来计算对应于一个给定近似特征值的特征向量，特别适用海森伯格阵和三对角阵。要求可逆且完备。算法：对初始$v_0=u_0\ne 0$，迭代：$v_k=A^{-1}u_{k-1},u_k=\frac{v_k}{\max(v_k)}$，则$\lim_{k\to\infty}u_k=\frac{x_k}{\max\{x_k\}}$，$\lim_{k\to\infty}\{v_k\}=\frac{1}{\lambda_n}$（推导：化成幂法）

QR 法： 计算一般矩阵（中小型）全部特征值的最有效方法之一。主要计算上海森伯格矩阵的全部特征值；对称三角矩阵全部特征值。

思想：若 A 特征值满足$|\lambda_1|>|\lambda_2|>\cdots>|\lambda_n|>0$，则 A 有标准型$XDX^{-1}$，D 为对角阵，$X^{-1}$有三角分解 LU，则由 QR 算法产生的$A_k$本质上收敛于上三角矩阵，且对角线上为特征值。

算法：对A_k作 QR 分解（Q 为正交阵，R 为上三角阵）；$A_{k+1}=RQ$；则$\lim_{k\to\infty}A_{k+1}$收敛于上三角阵（对角元为各特征值）。

优缺点： 幂法和反幂法只能计算单一特征值，收敛依赖于特征值分布。QR 法可以计算全部，收敛快、算法稳定，但计算量较大，一般用于小型矩阵。