1. **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; 相对误差：

有效数字：从左边不为零的第一位开始计算。误差限。（若最后一个有效数字在位上）. 如

若n位有效数字,则

若近似数, 有效数字为n位,则相对误差限

**1.3多元函数误差估计**

即

误差上限：

**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

**二、插值**

**1、定理：**在[a,b]上满足的插值多项式存在且唯一。

证明：考虑关于的线性方程组，共有n+1个未知数，n+1个方程，且行列式

**2、拉格朗日插值**

满足在仅有在处取1，其余点取0，即

记

则

性质：(1)

(2)

**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

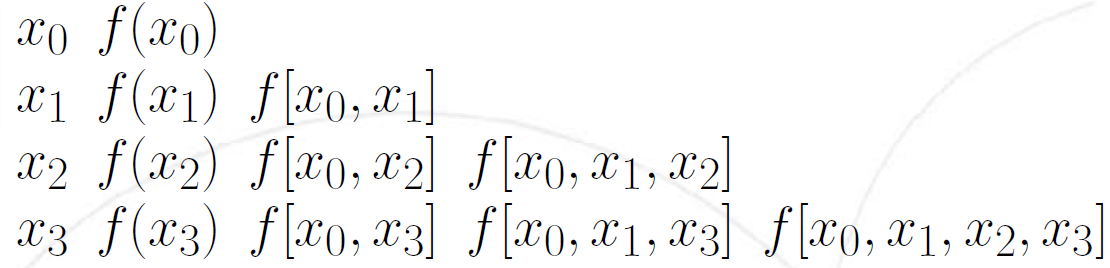
**3、插值余项**

推导过程：记。则有。将视为常数，视为变量，构造关于t的函数,则在上至少有1个零点，设

**3**、**均差和牛顿插值**

(一阶)

均差计算：



均差性质：

(1)解析表达式（用数学归纳法证明）

(2)均差对节点有对称性（节点顺序可以交换）

**牛顿插值:**

证明：

**插值余项**：

均差和导数的关系：

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：；拉格朗日法：；一次性使用全部节点的牛顿插值：;逐个添加的牛顿插值：

**等距节点的牛顿插值公式：**

设,, 则有

牛顿前插公式：

牛顿后插公式：

可证： （数学归纳法，）

差分和导数的关系：

算符规则：,

, ,

**4、埃尔米特插值**

**定理：**满足的次多项式存在且唯一。

**埃尔米特插值公式：**这里是拉格朗日里那个

**插值余项：** (证明方法：构造，求导2n+2次之后有1个零点)

**5、分段低次插值**

**（1）分段线性插值：**把分成n个子区间（一般等分），在每个子区间上线性插值。

**（2）分段埃尔米特插值:**每个小区间埃尔米特插值。

**（3）三次样条插值：**划分成n个区间。,共4n个未知数。联立方程：

一般求取思路是先假设已知，通过分段埃尔米特插值求解，然后利用二阶导连续，求的值。有结论：

**（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：

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） （2）2范数（均方逼近、平方逼近）

无穷范数比2范数条件更强。

**2、最佳一致逼近**

偏差

**切比雪夫定理：**是的最佳一致逼近多项式和在上至少有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，则在n+2个偏差点上，和交叉变号，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）选择的近似初值；（2）代入方程得到；（3）用得到的和计算偏差点。（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**

1)在处交替取1和-1。

2)在上有n个零点。

3)在上带权正交

用切比雪夫多项式求最佳一致逼近多项式：若比高1次，可以令。如果定义域为，要进行区间变换，令

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**

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是与偏差最小的n-1阶多项式，然后说明是与0偏差最小的。

这个最小值是

**5、拉格朗日插值余项最小化**

假设定义域在(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，最小化可以得到

若经过了区间变换，则

**6、最佳平方逼近**

**基本定义：**（1）

2)**权函数:**满足𝜌(𝑥)≥0, ⇒𝑔(𝑥)=0

3)关于的内积：

4)欧式范数：

5)最佳平方逼近，满足：最小。设为一组基（通常是），

**最佳平方逼近求解：**

构造，则由方程组解出

均方误差：

（证明思路：）

**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：**若是正交的（线性无关），则,

**（2）按切比雪夫多项式展开：**,

, , 记,

则

误差

**（3）勒让德多项式**

1)定义

2)前几项：

3)首项系数：

首1的勒让德多项式：

4)内积：权函数为1，

5递推关系

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：

其中

误差

**8、曲线拟合**

1）定义：，使最小。此时的是离散的。

2)求解方法：记

则，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**

**2、截断误差：**

**3、代数精度**

对次数的多项式准确成立，则称m阶代数精度。

1)插值型有n次代数精度；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：)

3)考虑代数精度只要考虑基函数(处的精度。

当有界时, 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**

其中

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.

**中矩形公式**

**梯形公式**(n=1)：

（不变号，直接外提）

**辛普生公式**(n=2)：

（构造,而后提出导数。）

**科特斯公式**(n=4)

**5、复化积分公式**

把[a,b]区间n等分,分为n个子区间, 有,

**复化梯形：**

所以是二阶收敛

**复化辛普生公式：**

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**

**2、龙贝格算法**

（复化梯形公式辛普生公式）

（辛普生公式科特斯公式）

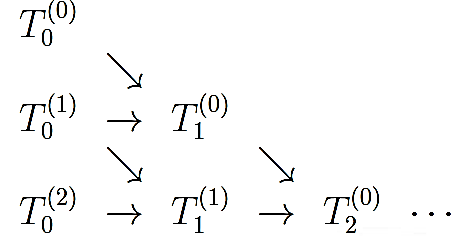
（科特斯公式龙贝格公式，8阶收敛）

可证

令可以解出

**3、李查逊外推加速法**

表示二分k次的复化梯形公式，表示加速m次的结果。

（加速1次，速度提高2阶。）

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**

如果可选。

高斯公式：有2n+1次代数精度。

高斯公式与所有次多项式正交。

（可解方程求解高斯公式，）

**高斯-勒让德公式**

取为的零点，可得到2n+1阶代数精度。对插值基函数积分得到。

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 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**

**余项：**

**带权高斯公式**：

,有2n+1阶代数精度与所有次多项式带权正交。

**高斯切比雪夫公式**：, ,

**5、数值微分**

(向前差商 一阶误差)

(后 一阶误差)

(中间，2阶误差)

近似，

**两点公式:**

**五、常微分方程数值解**

**欧拉法：**

局部方法误差：（一阶精度）

累积方法误差：

,

累积存储误差：

**后退的欧拉公式**：

（一阶精度）

**欧拉两步公式：**

(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：

**改进欧拉法：**

局部截断误差：

方法累积误差：

舍入误差：

**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：**若可分离,可以从导出表达式。

欧拉公式+后退欧拉公式/2

**龙格-库塔法（R-K法）**

**二阶龙格-库塔**

设

证明：

**改进欧拉：**

**变形欧拉：**

局部截断误差：

**四阶龙格-库塔**

，

**线性多步法** (1)显性：

二阶精度

求法: 当 m=1 时, 两个节点,

则插值多项式:

而,

三阶精度

(2)隐性：

,

二阶精度

三阶精度

当m=1时是梯形公式

(3)显性+隐性：

(4)泰勒展开构造：

全部在展开，对比系数：

米尔尼公式：

辛普生公式：

**方程组与高阶方程**

**一阶方程组**：

套用四阶龙格库塔公式。

**高阶方程：**

**边值问题**

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（1）；(2),存在(L为李普希兹常数)，使。则，收敛到，

**收敛性2：**若（1）在附近连续。（2）。则在附近局部收敛。（证明：存在邻域使）

**收敛速度（泰勒）：**

若, 则(p阶收敛)

**收敛速度（递推）：** 这也是估计方法误差的办法

**牛顿法：**

故二阶收敛。

截断误差：

时收敛：选择，计算，若不满足，可取，即可满足。1阶收敛 2阶收敛

舍入误差:

例子：，初始区间,初值1。一般分析：/ 精确分析：

**牛顿下山法：**

检查是否成立。若成立，,否则 (从1开始逐次尝试减半)

**重根问题：**若是的m重根,则有两种改良方法.

（1）令;(2)令,则以为单根, 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

收敛速度： ,

（证明：, ）

取足够小，使得

**抛物线法：**,

**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,其中回代这一步计算量是

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：**

**追赶法（**三对角线方程组）：

**平方根法**（A为对称正定矩阵）

或

**范数：**满足（1）非负（2）线性（3）三角不等式

（每列求和）,

(最大特征值)

**误差分析**

贡献：,贡献：, 综合考虑是两者相加。

定义条件数,过大称A病态。

事后估计（舍入误差）  
**迭代法：** （复杂度

**雅可比迭代法**：

**D是对角矩阵**

**迭代公式**

**高斯-赛德尔迭代法（G-S法）**

**迭代法收敛：**对任意初值收敛

迭代法收敛的充分条件是是任意一种与向量范数相容的矩阵范数。

**构造一般迭代法：**,构造T，使得TA是上三角矩阵，并有（复杂度）

**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：为的特征值，则,,记,则, 分母-分子=）

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：

引入,

SOR收敛（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=

A正定对称且SOR收敛。

最佳值：(为雅可比迭代矩阵)

**迭代法事后估计：**

**存储误差影响**：

**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），，，为A的主特征值，是对应的特征向量，则,（实际计算时要归一化）（推导：）

**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,迭代：,则（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,则A有标准型,D为对角阵，有三角分解LU,则由QR算法产生的本质上收敛于上三角矩阵，且对角线上为特征值。

算法：对作QR分解（Q为正交阵，R为上三角阵）；;则收敛于上三角阵（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。