BEIJING UNIVERSITY OF CHEMICAL TECHNOLOGY

TUTORIAL NOTES

数值分析笔记

TAO HUANG

目录

创建日期：2019 年 10 月 24 日
更新日期：2019 年 10 月 24 日

第 1 章　插值法

定义 1 (插值函数)**.** 设函数 $y = f(x)$ 区间 $[a, b]$ 上有定义，且已知在点 $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$ 上的值 $y_0, y_1, \cdots, y_n$ ，若存在一简单函数 $P(x)$ ，使

$$P(x_i) = y_i, \quad 0, i, \cdots, n \tag{1.1}$$

成立，就称 $P(x)$ 为 $f(x)$ 的**插值函数**，点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 称为**插值节点**，$[a, b]$ 称为**插值区间**，求出插值函数 $P(x)$ 的方法称为插值法。

1.1　多项式插值

定义 2. 若 $P(x)$ 是次数不超过 n 的代数多项式，即

$$P(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n \tag{1.2}$$

，其中 $a_i \in \mathcal{R}$，就称 $P(x)$ 为**插值多项式**，相应的插值法称为**多项式插值**。

定理 1. 满足条件 *(1.1)* 的插值多项式 $P(x)$ 是存在且唯一的。

证明. 满足条件 (1.1) 的插值多项式 $P(x)$ 的系数 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 有即为以下方程的解：

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + \cdots + a_n x_0^n \\ a_0 + a_1 x_1 + \cdots + a_n x_1^n \\ \vdots \\ a_0 + a_1 x_n + \cdots + a_n x_n^n \end{cases} \tag{1.3}$$

，此方程的系数矩阵为：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \tag{1.4}$$

，显然这是一个 Vandermonde 矩阵，其行列式：

$$\det \mathbf{A} = \prod_{i,j=0 i>j}^{n} (x_i - x_j) \neq 0 \tag{1.5}$$

，故方程 (1.4) 的解 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 存在且唯一。 □

1.2 Lagrange 插值

定义 3 (线性插值基函数). 对于点 x_k, x_{k+1}，我们定义：

$$l_k(x) == \frac{x - x_k}{x_k - x_{k+1}} \tag{1.6}$$

，称之为**线性插值基函数**。

因而对于点 x_k, x_{k+1}, x_{k+2} 以及其对应的线性插值基函数 l_k, l_{k+1} 我们有：

$$l_k(x_k) = 1 \tag{1.7}$$

$$l_k(x_{k+1}) = 0 \tag{1.8}$$

$$l_{k+1}(x_k) = 0 \tag{1.9}$$

$$l_{k+1}(x_{k+1}) = 1 \tag{1.10}$$

当我们讨论其二次的情形，我们可以得到：

定义 4 (二次插值基函数). 对于点 x_{k-1}, x_k, x_{k+1}，我们定义：

$$l_k(x) = \frac{(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})}{(x_{k-1} - x_k)(x_k - x_{k+1})}. \tag{1.11}$$

，称之为**二次插值基函数**。

不难看出对于点 x_{k-1}, x_k, x_{k+1} 及其二次插值基函数 l_k：

$$l_k(x_{k-1}) = 0 \tag{1.12}$$

$$l_k(x_k) = 1 \tag{1.13}$$

$$l_k(x_{k+1}) = 0 \tag{1.14}$$

再进一步讨论 n 次的情形，对于点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$，记

$$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n) \tag{1.15}$$

，显然

$$\omega'_{n+1}(x_k) = (x_k - x_0)(x_{-}x_1)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n) \tag{1.16}$$

，我们可以得到 n 次插值基函数的一个极其简洁的记法：

定义 5 (n 次插值基函数).

$$l_k(x) = \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_k)\omega'_{n+1}(x_k)}. \tag{1.17}$$

已知 $f(x)$ 在点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 上的值 $y_0, y_1, \cdots, y_n$，由以上基函数我们可以得到一个 n 次插值多项式：

定义 6 (Lagrange 插值).

$$L_n(x) = \sum_{k=1}^{n} y_k l_k(x). \tag{1.18}$$

不难验证上述多项式满足条件 (1.1)。

作为数值分析重要的一环，就是要对上述近似算法进行误差分析，首先我们算出其插值余项：

定义 7 (插值余项). 对于 $f(x)$ 及其插值函数 $L_n(x)$，**插值余项**定义为：

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) \tag{1.19}$$

，对于 Lagrange 插值的插值余项，我们有如下定理：

定理 2. *设 $f^{(n)}(x)$ 在 $[a,b]$ 连续，$f^{(n+1)}(x)$ 在 (a,b) 内存在，已知 $f(x)$ 在点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 上的值 $y_0, y_1, \cdots, y_n$，得到的 Lagrange 插值多项式 $L_n(x), \forall x \in [a,b]$，插值余项：*

$$|R_n(x)| \le \frac{|f^{(n+1)}(\epsilon)|}{(n+1)!} |\omega_{n+1}(x)| \tag{1.20}$$

，其中 $\epsilon \in [a,b]$ 依赖于 x。

证明. 易知 $R_n(x)$ 在 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 的值为 0，于是：

$$R_n(x) = K(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) = K(x)\omega_{n+1}(x) \tag{1.21}$$

，其中 $K(x)$ 是一个待定函数，取定值 x，作关于 $t \in [a,b]$ 的函数：

$$\varphi(t) = f(t \ - L_n(t) - K(x)\omega_{n+1}(t) \tag{1.22}$$

，易知 $\varphi(t)$ 在 $[a,b]$ 上至少有 $n+2$ 个零点，根据 Rolle 定理 (定理 (3))，$\varphi^{(n+1)}(t)$ 在 (a,b) 上至少有 1 个零点：

$$\varphi^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - (n+1)!K(x) = 0 \tag{1.23}$$

，于是：

$$K(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}. \tag{1.24}$$

□

定理 3 (Rolle 定理). *如果函数 $f(x)$ 满足:*

- 在闭区间 $[a,b]$ 上连续；
- 在开区间 (a,b) 内可导；
- 在区间端点处的函数值相等，即 $f(a)=f(b)$。

，那么在 (a,b) 内至少有一点 $\xi(a<\xi<b)$，使得:

$$f'(\xi)=0. \tag{1.25}$$

1.3 Newton 均差插值

要介绍 Newton 均差插值，首先要介绍均差：

定义 8 (均差). $f(x)$ 关于点 x_0, x_k 的**一阶均差**定义为：

$$f[x_0,x_k]=\frac{f(x_k)-f(x_0)}{x_k-x_0} \tag{1.26}$$

，而其关于点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 的k **阶均差**定义为:

$$f[x_0,\cdots,x_k]=\frac{f[x_0,\cdots,x_{k-2},x_k]-f[x_0,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_{k-1}}. \tag{1.27}$$

，由 Rolle 定理不难证明：

定理 4.

$$f[x_0,\cdots,x_n]=\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!},\quad \xi\in[a,b]. \tag{1.28}$$

证明. 略... □

由上述均差的定义我们不难得到：

定理 5. 对于定义在 $[a,b]$ 上的函数 $f(x)$，若已知函数在点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 上的值，$\forall x\in[a,b]$：

$$\begin{aligned}
f(x)&=f(x_0)+f[x,x_0]\\
f[x,x_0]&=f[x_0,x_1]+f[x,x_0,x_1](x-x_1)\\
&\vdots\\
f[x,x_0,\cdots,x_{n-1}]&=f[x_0,\cdots,x_n]+f[x,x_0,\cdots,x_n](x-x_n).
\end{aligned} \tag{1.29}$$

证明. 略... □

再结合定理 (4)，我们可以得到：

$$\begin{aligned} f(x) =& f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + \cdots \\ & + f[x_0, \cdots, x_n](x - x_0)\cdots(x - x_{n-1}) \\ & + f[x, x_0, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x) \end{aligned} \tag{1.30}$$

，由此我们可以定义 Newton 均差插值：

定义 9 (Newton 均差插值). 对于定义在 $[a, b]$ 上的函数 $f(x)$,已知函数在点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 上的值，$x \in [a, b]$，***Newton* 均差插值**定义为：

$$\begin{aligned} P_n(x) =& f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + \cdots \\ & + f[x_0, \cdots, x_n](x - x_0)\cdots(x - x_{n-1}) \end{aligned} \tag{1.31}$$

，不难看出，其余项为：

$$R_n(x) = f[x, x_0, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x). \tag{1.32}$$

在一些场景中，我们会遇到 $x_{i+1} - x_i = h$ 为定值的情况，这时候前面的公式和定义就显得过于冗长，对于这类情况，我们要介绍差分和 Newton 前插公式：

定义 10 (差分). 对于 $x + k = x_0 + kh(k = 0, 1, \cdots, n)$ 的情形，设 $f_k = f(x + k)$，定义其**一阶（向前）差分**为：

$$\Delta f_k = f_{k+1} - f_k \tag{1.33}$$

，其n **阶差分**定义为：

$$\Delta^n f_k = (\mathbf{E} - \mathbf{I})^n f_k \tag{1.34}$$

，其中 $\mathbf{I}$ 称为不变算子，$\mathbf{E}$ 称为前向算子：

$$\mathbf{I} f_k = f_k \tag{1.35}$$

$$\mathbf{E} f_k = f_{k+1} \tag{1.36}$$

，由定理 (4)，我们可以得到：

$$\Delta^n f_k = h^n f^{(n)}(\xi), \quad \xi \in (x_k, x_{k+n}). \tag{1.37}$$

定义 11 (Newton 前插公式).

$$P_n(x_0 + th) = f_0 + t\Delta f_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f_0 + \cdots + \frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f_0. \tag{1.38}$$

1.4 Hermitian 插值

定义 12 (Hermitian 插值多项式). 满足在给定的节点处：函数值相等、对应的一阶直至指定阶导数值相的插值多项式，即对于点 x_i：

$$P_n^{(k)}(x_i) = f^{(k)}(x_i), \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{1.39}$$

课本上给出如下定理（不证）：

定理 6. 设 $f \in C^n[a, b]$，$x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为 $[a, b]$ 上的相异节点，则 $f[x_0, x_1, \cdots, x_n]$ 是其变量的连续函数。

由定理4，可知：

$$f[x_0, x_0, \cdots, x_0] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(x) \tag{1.40}$$

，在定义9中，将 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 替换为 x_0，可以得到 Taylor 插值多项式：

定义 13 (Taylor 插值多项式).

$$P_n(x) = f(x_0) + f'(x)(x - x_0) + \cdots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!}(x - x_0)^n \tag{1.41}$$

，其余项就是我们在分析中所知道的：

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}, \quad \xi \in (a, b) \tag{1.42}$$

一些其他的 Hermitian 插值多项式可以轻松地由上述方法给出，在此不做赘述。

1.5 分段低次插值

在数值分析中，高次插值会产生 Runge 现象。即在两端处波动极大，产生明显的震荡。以 Runge 函数：

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2} \tag{1.43}$$

，为例，其函数图像及其高次插值多项式图像如 Figure 1.1所示：，可以看到，这时候插值函数几乎是**不可用的**，因为其波动过于严重，我们因此介绍分段线性插值函数以期望解决这一问题：

定义 14 (分段线性插值). 已知 $f(x)$ 在点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 上的值 $f_0, f_1, \cdots, f_n$，**分段线性插值**函数：

$$\begin{gathered} I_k(x) = \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} f_k + \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k} f_{k+1}, \\ x_k \le x \le x_{k+1}, \quad k = 0, 1, \cdots, n-1 \end{gathered} \tag{1.44}$$

，它满足：

$$\begin{gathered} I_k(x) \in C[a, b] \\ I_k(x_k) = f_k \end{gathered} \tag{1.45}$$

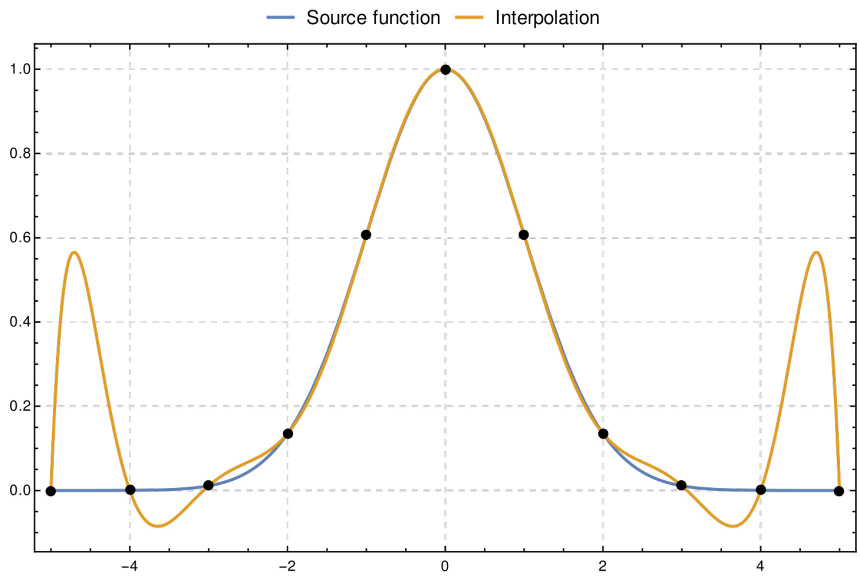

图 1.1: Runge 现象

定义 15 (分段三次 Hermitian 插值). 已知 $f(x)$ 在点 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ 上的值 $f_0, f_1, \cdots, f_n$，以及导数值 $f_0', f_1', \cdots, f_n'$，**分段三次 *Hermitian* 插值函数：**

$$\begin{aligned}I_k(x) = &\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2\left(1+2\frac{x-x_k}{x_{k+1}}\right)f_k\\ &+\left(\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)^2\left(1+2\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)f_{k+1}\\ &+\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2(x-x_k)f_k'\\ &+\left(\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)^2(x-x_{k+1})f_{k+1}'\end{aligned} \tag{1.46}$$

，其中 $x_k \leq x \leq x_{k+1}, \quad k=0,1,\cdots,n-1$。

定理 7. 设 $f\in C^4[a,b]$，$I_h(x)$ 为 $f(x)$ 的分段三次 *Hermitian* 插值函数（多项式），则有：

$$\max_{a\leq x\leq b}|f(x)-I_k(x)| \leq \frac{h^4}{384}\max_{a\leq x\leq b}|f^{(4)}(x)| \tag{1.47}$$

，其中 $h=\max(x_{k+1}-x_k)$。

1.6 三次样条插值

定义 16 (样条 (函数)). 给定 k 个点 t_i，称为节点（*knot*），分布在一个区间 $[a,b]$ 满足

$$a=t_0<t_1<\ldots<t_(k-2))<t_(k-1))=b \tag{1.48}$$

一个参数曲线

$$S:[a,b]\to\mathbb{R} \tag{1.49}$$

称为 **n 次样条**，如果

$$S\in \mathrm{C}^{n-1}(a,b) \tag{1.50}$$

并且在限制到每个子区间时，

$$S_{[t_i,t_{i+1})}\in\Pi_n \quad ,i=0,\dots k-2 \tag{1.51}$$

换句话说，在每个子区间或者说**节点长度**（*knot span*）

$$[t_i,t_{i+1}) \quad ,i=0,\dots k-2 \tag{1.52}$$

S 和一个 t 次多项式相同。

$S(t_i)$ 称为**节点值**而 $(t_i,S(t_i))$ 称为**内部控制点**（*internal control point*）. $(t_0,...,t_{k-1})$ 称为**节点向量**（*knot vector*）. 如果节点等距分布在区间 $[a,b]$ 上，我们称样条**均匀**（*uniform*），否则为**非均匀**（*non-uniform*）.

定义 17 (三次样条插值)**.** n 段三次多项式在数据点之间构建一个**三次样条**

- 插值特性，$S(x_i)=f(x_i)$
- 样条相互连接，$S_{i-1}(x_i)=S_i(x_i) \quad ,i=1,\cdots,n-1$
- 两次连续可导，$S'_{i-1}(x_i)=S'_i(x_i)$ 以及 $S''_{i-1}(x_i)=S''_i(x_i) \quad ,i=1,\cdots,n-1$

例 1 (三次埃尔米特样条)**.**

$$\begin{aligned}S_i(x)=&\frac{z_{i+1}(x-x_i)^3+z_i(x_{i+1}-x)^3}{6h_i}\\&+\left(\frac{y_{i+1}}{h_i}-\frac{h_i}{6}z_{i+1}\right)(x-x_i)\\&+\left(\frac{y_{i+1}}{h_i}-\frac{h_i}{6}z_i\right)(x_{i+1}-x)\end{aligned} \tag{1.53}$$

以及

$$h_i=x_{i+1}-x_i \tag{1.54}$$

，而 z_i 不难由如下方程解出：

$$\begin{pmatrix}2&\lambda_1&&&\mu_1\\\mu_2&2&\lambda_2&&\\&\ddots&\ddots&\ddots&\\&&\mu_{n-1}&2&\lambda_{n-1}\\\lambda_n&&&\mu_n&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}z_1\\z_2\\\vdots\\z_{n-1}\\z_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}d_1\\d_2\\\vdots\\d_{n-1}\\d_n\end{pmatrix} \tag{1.55}$$

，其中

$$\mu_j = \frac{h_{j-1}}{h_{j-1}+h_j} \tag{1.56}$$

$$\lambda_j = \frac{h_j}{h_{j-1}+h_j} \tag{1.57}$$

$$d_j = 6f[x_{j-1}, x_j, x_{j+1}] \tag{1.58}$$

定理 8. 设 $f \in C^4[a,b]$，$S(x)$ 为 $f(x)$ 的三次样条，则有：

$$\max_{a\le x\le b} |f^{(k)}(x) - S^{(k)}(x)| \le C_k \max_{a\le x\le b} |f^{(4)}(x)| h^{4-k} \tag{1.59}$$

，其中 $h = \max(x_{k+1}-x_k), C_0 = \frac{5}{384}, C_1 = \frac{1}{24}, C_2 = \frac{3}{8}$。

第 2 章　函数逼近与 FFT

2.1　正交多项式

定义 18 (正交). 函数 $f, g \in C[x_1, x_2]$ 在权函数 W 的意义下**正交**当且仅当：

$$\langle f, g\rangle = \int_{x_1}^{x_2} f(x)g(x)W(x)\mathrm{d}x = 0 \tag{2.1}$$

定义 19. 对于多项式 f_i，若 $n \neq m$，f_m, f_n 正交，这些多项式则称为**正交多项式**（*Orthogonal Polynomials*）。

若 f_i 除了正交之外，更有 $\langle f_n, f_n\rangle = 1$ 的话，则称为**规范**正交多项式。

定理 9 (矩). 对于权函数 W，我们定义**矩** m_n 为

$$m_n = \int x^n W(x)\mathrm{d}x \tag{2.2}$$

，那么我们可以得到：

$$P_n(x) = c_n \det \begin{bmatrix} m_0 & m_1 & m_2 & \cdots & m_n \\ m_1 & m_2 & m_3 & \cdots & m_{n+1} \\ & & \vdots & & \vdots \\ m_{n-1} & m_n & m_{n+1} & \cdots & m_{2n-1} \\ 1 & x & x^2 & \cdots & x^n \end{bmatrix} \tag{2.3}$$

，其中 c_n 是任意常数

定理 10 (Favard). 对于正交函数族中的三个相邻的多项式 f_{n+1}, f_n, f_{n-1}，存在 c_n, d_n，使得

$$f_{n+1} = (x - c_n)f_n - d_n f_{n-1} \tag{2.4}$$

定理 11 (Christoffel-Darboux). 对于正交多项式 f_i

$$\sum_{j=0}^{n}\frac{f_j(x)f_j(y)}{h_j}=\frac{k_n}{h_nk_{n+1}}\frac{f_n(y)f_{n+1}(x)-f_{n+1}(y)f_n(x)}{x-y} \tag{2.5}$$

其中 h_j, k_j 分别是 f_j 的 L_2 模长和前导系数，我们还可以得到

$$\sum_{j=0}^{n}\frac{f_j^2(x)}{h_j}=\frac{k_n}{h_nk_{n+1}}\left[f'_{n+1}(x)f_n(x)-f'_n(x)f_{n+1}(x)\right] \tag{2.6}$$

定理 12 (零点). 对于正交多项式 $f_i\in C[x_1,x_2]$，n 次正交多项式 f_n 在 $[x_1,x_2]$ 内有 n 个零点

Legendre 多项式

定义 20 (Legendre 多项式). 定义在区间 $[-1,1]$ 上的权函数为 $W(x)\equiv 1$ 的正交多项式 P_i 为 ***Legendre*** **多项式**

定理 13 (递推关系). 对于 *Legendre* 多项式 P_i

$$(n+1)P_{n+1}(x)=(2n+1)xP_n(x)-nP_{n-1}(x) \tag{2.7}$$

定理 14 (Legendre 微分方程). *Legendre* 多项式 P_i 是如下 *Legendre* 微分方程的解

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\left(1-x^2\right)\frac{\mathrm{d}P_n(x)}{\mathrm{d}x}\right]+n(n+1)P_n(x)=0 \tag{2.8}$$

定理 15 (正交性). 对于 *Legendre* 多项式 P_i

$$\int_{-1}^{1}P_m(x)P_n(x)\,dx=\frac{2}{2n+1}\delta_{mn} \tag{2.9}$$

定理 16 (微分形式). 对于 *Legendre* 多项式 P_i

$$P_n(x)=\frac{1}{2^nn!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n \tag{2.10}$$

根据定理14 中的微分方程，我们可以定义

定义 21 (伴随 Legendre 多项式). 如下微分方程的解的函数序列

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^m(x)\right]+\left[\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right]P_\ell^m(x)=0 \tag{2.11}$$

当 $m=0$，ℓ 为整数时，方程的解即为一般的 *Legendre* 多项式。

定理 17 (正交性). 伴随对于 *Legendre* 多项式 P_i^j

$$\int_{-1}^{1}P_l^m(x)P_k^m(x)\mathrm{d}x=\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\frac{2}{2l+1}\delta_{kl} \tag{2.12}$$

定理 18. 伴随 *Legendre* 多项式可以由 *Legendre* 多项式求 m 次导得到：

$$P_l^m(x)=(1-x^2)^{m/2}P_l^{(m)}(x) \tag{2.13}$$

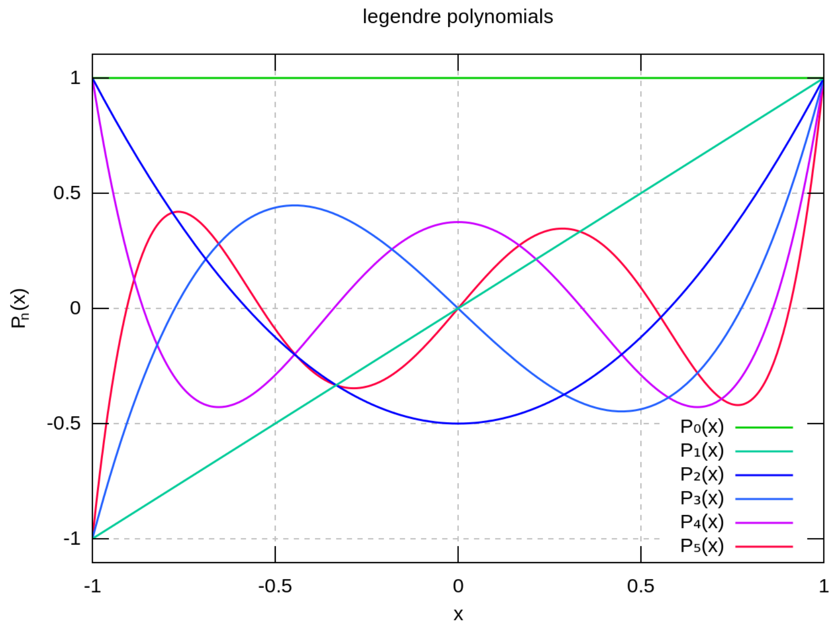

图 2.1: Legendre 多项式

Chebyshev 多项式

定义 22 (Chebyshev 多项式). 定义在区间 $[-1,1]$ 上的权函数为 $W(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的正交多项式 T_i 为（第一类）***Chebyshev* 多项式**，并且我们有

$$T_n(\cos(\theta)) = \cos(n\theta) \tag{2.14}$$

定理 19 (递推关系). 对于 *Chebyshev* 多项式 T_i

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_{n+1}(x) &= 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \end{aligned} \tag{2.15}$$

定理 20 (正交性). 对于 *Chebyshev* 多项式 T_i

$$\int_{-1}^{1} T_n(x)T_m(x)\,\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \begin{cases} 0 & : n \neq m \\ \pi & : n = m = 0 \\ \pi/2 & : n = m \neq 0 \end{cases} \tag{2.16}$$

定理 21. 对于函数

$$\tilde{T}(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x) \tag{2.17}$$

，其最大绝对值为

$$\frac{1}{2^{n-1}} \tag{2.18}$$

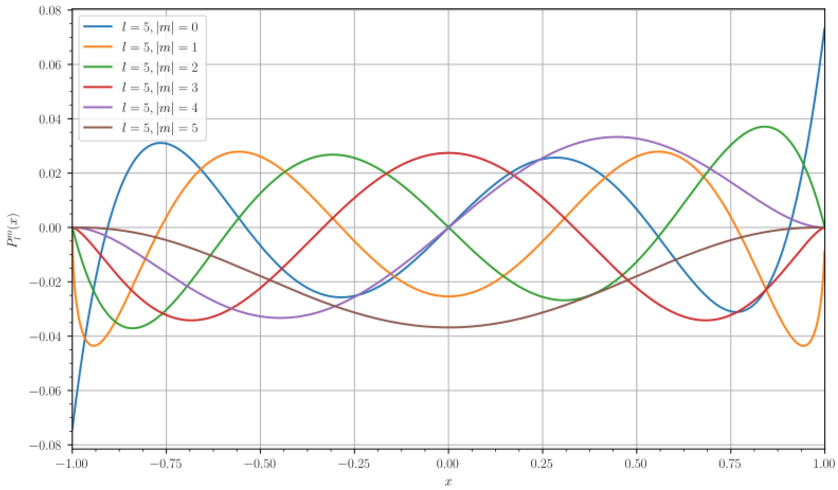

图 2.2: 伴随 Legendre 多项式

定义 23 (第二类 Chebyshev 多项式). 定义在区间 $[-1,1]$ 上的权函数为 $W(x)=\sqrt{1-x^2}$ 的正交多项式 U_i 为**第二类 *Chebyshev* 多项式**，满足递推关系

$$\begin{aligned} U_0(x) &= 1 \\ U_1(x) &= 2x \\ U_{n+1}(x) &= 2xU_n(x) - U_{n-1}(x). \end{aligned}$$

，并且我们有

$$U_n(\cos(\theta)) = \frac{\sin((n+1)\theta)}{\sin\theta} \tag{2.19}$$

定义 24 (切比雪夫根). T_n 的 n 个根

$$x_i = \cos\left(\frac{2i-1}{2n}\pi\right) \quad , i = 1,\dots,n \tag{2.20}$$

定义 25 (Chebyshev 多项式零点插值). 插值点为切比雪夫根的多项式插值。

定理 22. *Chebyshev 多项式零点插值的插值余项*

$$\max_{x\in[-1,1]} |f(x) - L_n(x)| \le \frac{1}{2^n(n+1)!} \max_{x\in[-1,1]} |f^{(n+1)}(x)| \tag{2.21}$$

证明. 由定理 (2) 可知

$$\max_{x\in[-1,1]} |R_n(x)| \le \max_{x\in[-1,1]} \frac{|f^{(n+1)}(x)|}{(n+1)!} |\omega_{n+1}(x)| \tag{2.22}$$

，而对于 Chebyshev 多项式零点插值，由于插值节点均在切比雪夫根上，由定理 (21) 我们有

$$\begin{aligned} \max_{x\in[-1,1]} |\omega_{n+1}(x)| &\le \max_{x\in[-1,1]} |\tilde{T}_n(x)| \\ &= \frac{1}{2^n} \end{aligned}$$

□

2.2 最佳平方逼近与最小二乘法

定义 26 (最佳平方逼近). 对于函数 $f(x) \in C[a,b]$，$C[a,b]$ 中的一组基构成的生成子空间 $\varphi = \mathrm{span}\{\varphi_1(x), \ldots\}$，**最佳平方逼近**是 $S(x) \in \varphi$ 使得

$$\begin{aligned} \min \|f(x) - S(x)\|_2^2 &= \int_a^b \rho(x)[f(x) - S(x)]^2 dx \\ &= \int_a^b \rho(x)[f(x) - \sum_i a_i \varphi_i(x)]^2 dx \end{aligned} \tag{2.23}$$

，其中 $\rho(x) \in C[a,b]$ 是权函数。

定理 23. 对于函数 $f(x) \in C[a,b]$,$C[a,b]$ 中的一组基构成的生成子空间 $\varphi = \mathrm{span}\{\varphi_1(x), \ldots\}$，最佳平方逼近的结果 $S(x)$ 满足

$$\sum_j \langle \varphi_k(x), \varphi_j(x) \rangle a_j = \langle \varphi_k(x), f(x) \rangle \tag{2.24}$$

，上述方程组称为**法方程**。

证明. 对目标函数求导即可。 □

定理 24. 最佳平方逼近误差

$$\|f(x) - S(x)\|_2^2 = \|f(x)\|_2^2 - \sum_k a_k \langle \varphi_k(x), f(x) \rangle \tag{2.25}$$

例 2. 如果 $\varphi = \mathrm{span}\{\varphi_1(x), \ldots\}$ 中，$\{\varphi_1(x), \ldots\}$ 是一族正交基，即

$$\langle \varphi_k(x), \varphi_j(x) \rangle = 0, \forall j, k, j \neq k \tag{2.26}$$

，于是方程 *(2.24)* 变为

$$\langle \varphi_k(x), \varphi_k(x) \rangle a_k = \langle \varphi_k(x), f(x) \rangle \tag{2.27}$$

，于是我们可以得到结果

$$S^*(x) = \sum_i \frac{\langle \varphi_k(x), f(x) \rangle}{\langle \varphi_k(x), \varphi_k(x) \rangle} \varphi_i(x) \tag{2.28}$$

定义 27 (最小二乘法). 对于一族函数值 $f(x_i), x_i \in [a,b]$，$C[a,b]$ 中的一组基构成的生成子空间 $\varphi = \mathrm{span}\{\varphi_1(x), \ldots\}$，最小二乘法就是找到函数 $S(x) \in \varphi$ 使得

$$\min \sum_j [f(x_j) - \sum_i a_i \varphi_i(x x_j)]^2 \tag{2.29}$$

注解 1. 要构造关于区间 $[a,b]$ 上的正交函数族，可以使用定理*10*，并且

$$c_n = \frac{\langle xy_n, y_n\rangle}{\langle y_n, y_n\rangle} \tag{2.30}$$

$$d_n = \frac{\langle y_n, y_n\rangle}{\langle y_{n-1}, y_{n-1}\rangle} \tag{2.31}$$

2.3 快速傅里叶变换

定义 28 (离散傅里叶变换). 对于 N 点序列 $\{x_n\} := x_0, x_1, \ldots, x_{N-1}$，它的**离散傅里叶变换**（*Discrete Fourier Transform*，*DFT*）为

$$\begin{aligned} X_k &= \sum_{n=0}^{N-1} x_n \cdot \exp\left(-\frac{i2\pi}{N}kn\right) \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} x_n \cdot \left[\cos\left(\frac{2\pi}{N}kn\right) - i\cdot\sin\left(\frac{2\pi}{N}kn\right)\right] \end{aligned} \tag{2.32}$$

注解 2. 上述公式可以分解为

$$\begin{aligned} X_k &= \sum_{m=0}^{N/2-1} x_{2m} \exp -\frac{2\pi i}{N}(2m)k + \sum_{m=0}^{N/2-1} x_{2m+1} \exp -\frac{2\pi i}{N}(2m+1)k \\ &= \underbrace{\sum_{m=0}^{N/2-1} x_{2m} \exp -\frac{2\pi i}{N/2}mk}_{\text{DFT of even}-\text{indexed part of } x_n} + \exp\left(-\frac{2\pi i}{N}k\right) \underbrace{\sum_{m=0}^{N/2-1} x_{2m+1} \exp -\frac{2\pi i}{N/2}mk}_{\text{DFT of odd}-\text{indexed part of } x_n} \\ &= E_k + \exp\left(-\frac{2\pi i}{N}k\right) O_k \end{aligned} \tag{2.33}$$

而

$$\begin{aligned} X_{k+\frac{N}{2}} &= \sum_{m=0}^{N/2-1} x_{2m} e^{-\frac{2\pi i}{N/2}m(k+\frac{N}{2})} + e^{-\frac{2\pi i}{N}(k+\frac{N}{2})} \sum_{m=0}^{N/2-1} x_{2m+1} e^{-\frac{2\pi i}{N/2}m(k+\frac{N}{2})} \\ &= \sum_{m=0}^{N/2-1} x_{2m} e^{-\frac{2\pi i}{N/2}mk} e^{-2\pi mi} + e^{-\frac{2\pi i}{N}k} e^{-\pi i} \sum_{m=0}^{N/2-1} x_{2m+1} e^{-\frac{2\pi i}{N/2}mk} e^{-2\pi mi} \\ &= \sum_{m=0}^{N/2-1} x_{2m} e^{-\frac{2\pi i}{N/2}mk} - e^{-\frac{2\pi i}{N}k} \sum_{m=0}^{N/2-1} x_{2m+1} e^{-\frac{2\pi i}{N/2}mk} \\ &= E_k - e^{-\frac{2\pi i}{N}k} O_k \end{aligned} \tag{2.34}$$

，于是我们能将 *DFT* 问题分解为

$$\begin{aligned} X_k &= E_k + \exp\left(-\tfrac{2\pi i}{N}k\right) O_k \\ X_{k+\frac{N}{2}} &= E_k - \exp\left(-\tfrac{2\pi i}{N}k\right) O_k \end{aligned} \tag{2.35}$$

，这就是 *Cooley-Tukey* 快速傅里叶算法的核心。

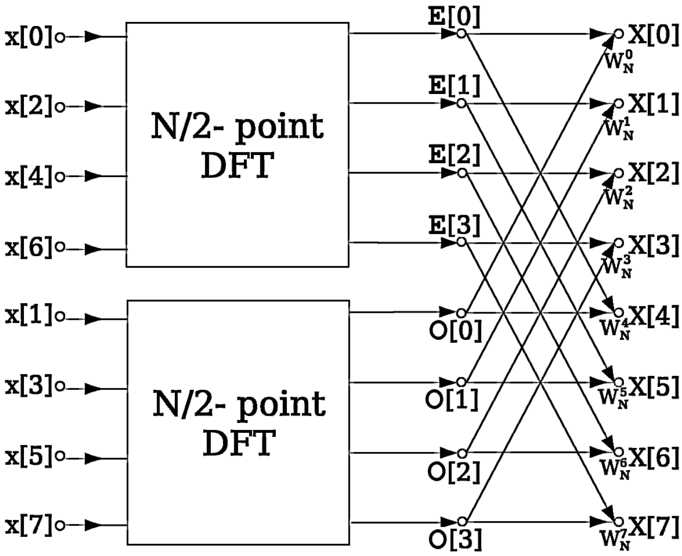

图 2.3: 快速傅里叶变换的流程的例子，在这里，对 X_k 的计算先被分为奇 O_k 偶 E_k 两个部分，再，经由“蝶形”算法对结果进行合并。

第 3 章　数值微积分

3.1　数值积分

定义 29. 数值积分 **数值积分**是指对积分

$$\int_a^b f(x)\,dx \tag{3.1}$$

的数值近似计算。

定理 25 (矩形公式). 最简单的，我们可以使用 $f(x)$ 的插值函数对数值积分进行近似，比如，当插值函数为常数时，我们可以得到

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \tag{3.2}$$

，插值函数为一次函数时，我们可以得到

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right) \tag{3.3}$$

，如果我们使用分段线性插值，我们可以得到

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{n}\left(\frac{f(a)}{2}+\sum_{k=1}^{n-1}\left(f\left(a+k\frac{b-a}{n}\right)\right)+\frac{f(b)}{2}\right) \tag{3.4}$$

，取不同的插值点就可以得到不同的近似计算结果，该种方法称为**矩形公式**。

参考文献

[1] 李庆扬. *数值分析 (第 5 版)*. 北京：清华大学出版社, 2008.