

# 目录

---

- [零点](#)
  - [二分法](#)
  - [牛顿法](#)
    - [收敛速度](#)
    - [重根](#)
- [方程组](#)
  - [高斯消去法](#)
    - [三角矩阵](#)
    - [原理](#)
    - [误差分析](#)
  - [范数](#)
  - [迭代法](#)
    - [Jacobi迭代](#)
    - [Gauss-Seidel迭代](#)
    - [逐次松弛迭代](#)
  - [共轭梯度法](#)
- [插值](#)
  - [拉格朗日插值](#)
  - [牛顿差商](#)
  - [插值误差](#)
  - [切比雪夫插值](#)
  - [样条插值](#)
    - [三次样条](#)
    - [自然样条](#)
    - [贝塞尔曲线](#)
- [最小二乘](#)
  - [最小二乘解](#)
  - [QR分解](#)
    - [Gram-Schmidt正交](#)
    - [Household变换](#)
- [数值微分与积分](#)
  - [数值微分](#)
  - [数值积分](#)

## 零点

---

## 二分法

$$x_{n+1} - x^* = \frac{x_0 - x^*}{2^{n+1}}$$

## 牛顿法

$$x_{n+1} = \phi(x_n) = x_n - \frac{f(x_n)}{f^{(1)}(x_n)}$$

### 收敛速度判断

由于

$$\begin{aligned}\phi(x) &= x - \frac{f(x)}{f^{(1)}(x)} \\ \phi^{(1)}(x) &= 1 - \frac{f^{(1)}(x)^2 - f(x)f^{(2)}(x)}{f^{(1)}(x)^2} \\ &= \frac{f(x)f^{(2)}(x)}{f^{(1)}(x)^2}\end{aligned}$$

且在零点  $x^*$  处

$$f(x^*) = 0$$

得

$$\phi^{(1)}(x^*) = 0$$

根据泰勒展开，将  $\phi(x_n)$  在零点  $x^*$  展开

$$\phi(x_n) = \phi(x^*) + \phi^{(1)}(x^*)(x_n - x^*) + \frac{1}{2!}\phi^{(2)}(x^*)(x_n - x^*)^2 + \dots$$

且

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= \phi(x_n) \\ x^* &= \phi(x^*) \\ \phi^{(1)}(x^*) &= 0\end{aligned}$$

得

$$\begin{aligned}x_{n+1} - x^* &= \phi(x_n) - \phi(x^*) \\ &\approx \phi^{(2)}(x^*)(x_n - x^*)^2 \\ &\approx \phi^{(2)}(x^*)(\phi^{(2)}(x^*)(x_{n-1} - x^*)^2 - x^*)^2 \\ &= \dots\dots\dots \\ &\approx (x_0 - x^*)^{2^{n+1}}\end{aligned}$$

即

$$x_{n+1} - x^* \approx (x_0 - x^*)^{2^{n+1}}$$

所以，牛顿法满足2阶收敛，收敛速度较快

## 重根问题

$f(x)$ 有 $m$ 个重根, 则 $f(x)$ 可写作

$$f(x) = (x - x^*)^m$$

且

$$f^{(1)}(x^*) = f^{(2)}(x^*) = \dots = f^{(m-1)}(x^*) = 0$$

此时, 对于 $\phi(x)$ , 有

$$\begin{aligned}\phi(x) &= x - \frac{f(x)}{f^{(1)}(x)} \\ &= x - \frac{x - x^*}{m} \\ \phi^{(1)}(x) &= 1 - \frac{1}{m}\end{aligned}$$

由于 $\phi^{(1)}(x)$ 不为0, 牛顿法退化为线性收敛(二分法)

## 改进

可改写递推式:

$$\begin{aligned}\phi(x) &= x - m \frac{f(x)}{f^{(1)}(x)} = x^* \\ \phi^{(1)}(x) &= 0\end{aligned}$$

## 方程组求解

### 高斯消去法

#### 上三角矩阵 $U$ 与下三角矩阵 $L$

计算

$$\begin{aligned}Ux &= b \\ x_k &= b_k - \sum_{j=k+1}^n U_{k,j} x_j\end{aligned}$$

```
for (int k = n; 1 <= k; k--)  
    for (int j = k+1; j <= n; j++)  
        x[k] = b[k] - u[k][j] * x[j]
```

计算

$$\begin{aligned}Lx &= b \\ x_k &= b_k - \sum_{j=1}^{k-1} L_{k,j} x_j\end{aligned}$$

```

for (int k = 1; k <= n; k++)
    for (int j = 1; j <= k-1; j++)
        x[k] = b[k] - L[k][j] * x[j]

```

## 原理

对于

$$Ax = b$$

使用高斯变换，乘以下三角矩阵 $L$

$$\begin{aligned}
 LAx &= Lb \\
 Ux &= Lb \\
 x &= U^{-1}Lb
 \end{aligned}$$

因此关键在于，将系数矩阵 $A$ 转化为上三角矩阵 $U$

$$LA = U$$

即，将矩阵 $A$ 分解为下三角矩阵 $L$ 和上三角矩阵之积 $U$

$$A = LU$$

称为矩阵 $LU$ 分解

$$a_{k,p} = a_{k,p} - \frac{a_{k,j}}{a_{j,j}} * a_{j,p}$$

```

gauss_lu(double* a, int n)--> void {
    for(j = 1; j <= n; ++j){
        for(k = j+1; k <= n; ++k){
            temp = a[k][j] = a[k][j]/a[j][j];
            for(p = j+1; p <= n; ++p)
                a[k][p] = a[k][p] - a[j][p] * temp;
        }
    }
}

```

## 列选主元高斯消去法

交换行：选取一列中最大值，然后交换。避免很大的数字对结果产生影响

```

gauss_lu(double* a, int* p, int n)--> void
{
    p[1,n] = {1, 2, . . . , n};
    for(j = 1; j <= n; ++j) {
        // 找到a[j][j]到a[n][j]的最大值a[t][j]
        swap(a[j], a[t]);
        swap(p[j], p[t]);
        for(k = j+1; k <= n; ++k) {
            temp = a[k][j] = a[k][j]/a[j][j];
            for(s = j+1; s <= n; ++s)
                a[k][s] = a[k][s] - a[j][s] * temp;
        }
    }
}

```

```
}
```

## 完全选主元高斯消去法

交换行和列

## 误差分析

具体内容见讲义

### 前向误差

由高斯法求解得到 $x$ 的近似值

$$x^*$$

判断相对误差

$$\frac{\delta(x)}{x} = \frac{x^* - x}{x}$$

的上界

### 向后舍入误差分析

存在 $\Delta A$ 满足

$$(A + \Delta A)x^* = b$$

### 上三角矩阵方程组数组解的舍入误差分析

$$|\Delta b| = |Ux^* - b|$$

### 列选主元高斯消去法 $LU$ 分解的舍入误差分析

$$|\Delta A| = |A - LU|$$

### 完全选主元高斯消去法 $LU$ 分解的舍入误差分析

$$|\Delta A| = |A - LU|$$

### 列选主元高斯消去法解方程组舍入误差分析

$$|\Delta b| = |Ax^* - b|$$

## 范数

将向量和矩阵映射到实数范围，比较大小

### 向量范数

- 壹范数：绝对值相加

$$\|x\|_1 = \sum_{j=1}^n |x_j|$$

- 贰范数：平方值相加开根

$$\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^n |x_j|^2}$$

- $p$ 范数:  $p$ 次方相加开 $p$ 次根

$$\|x\|_p = \sqrt[p]{\sum_{j=1}^n |x_j|^p} = \left(\sum_{j=1}^n |x_j|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$

- 无穷范数: 最大值

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leq j \leq n} \{|x_j|\}$$

## 矩阵范数

- 行范数(无穷范数)

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{k=1}^n |a_{jk}|$$

- 列范数(壹范数)

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq k \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{jk}|$$

- 贰范数(欧几里得范数、谱范数)

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)} = \sqrt{\rho(A^T A)}$$

- $p$ 范数

$$\|A\|_p = \max_{\|x\|_p=1} \|Ax\|_p$$

- $F$ 范数

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{j,k=1}^n a_{jk}^2} = \sqrt{\text{tr}(A^T A)} = \sqrt{\sum_{j=1}^n \lambda_j(A^T A)}$$

## 迭代法

计算

$$Ax = b$$

使用迭代法

## 收敛判断

对于

$$\begin{cases} x = Gx + b \\ x^0 = \text{随机选取} \\ x^{k+1} = Gx^k + b \end{cases}$$

上面迭代格式的充要条件是  $\rho(G) < 1$

## Jacobi迭代

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

计算格式

$$x_0 = \text{初始向量}$$
$$x_{k+1} = D^{-1}(b - (L + U)x_k), k = 0, 1, 2, \dots$$

如果 $A$ 主对角线元行占优(或列占优), 则上面迭代格式收敛

## Gauss-Seidel迭代

$$A = L + U + D$$
$$(L + D)x = -Ux + b$$

计算格式

$$x_0 = \text{初始向量}$$
$$x_{k+1} = D^{-1}(b - Ux_k - Lx_{k+1}), k = 0, 1, 2, \dots$$

如果 $A$

1. 主对角线元占优; 或
2. 对称正定

则上面迭代格式收敛

代码

见讲义

## 逐次松弛迭代

使用Gauss-Seidel迭代的求解方向, 并使用过松弛以加快收敛速度

令 $w$ 是一个实数, 将 $x_{k+1}$ 定义为 $w$ 乘上Gauss-Seidel公式和 $1 - w$ 乘上当前估计 $x_k$ 的平均。

$w$ 称为松弛参数,  $w > 1$ 时称为过松弛

$$Dx_{k+1} = (1 - w)Dx_k + w(b - Lx_{k+1} - Ux_k)$$

计算格式

$$x_0 = \text{初始向量}$$
$$x_{k+1} = (wL + D)^{-1}[(1 - w)Dx_k - wUx_k] + w(D + wL)^{-1}b, k = 0, 1, 2, \dots$$

如果 $A$

1. 主对角线占优并且 $w \in (0, 1]$ ; 或者

2. 对称正定并且  $w \in (0, 2)$

则上面迭代格式收敛

代码

见讲义

## 用于对称正定矩阵的方法

### 对称正定矩阵

对称矩阵只有一半数量的独立元素

$$A^T = A$$

是否能以一半的计算代价，并且仅仅使用一半的内存来求解

### 楚列斯基分解

如果  $A$  是对称正定矩阵，则存在上三角矩阵  $R$  满足

$$A = R^T R$$

### 共轭梯度方法

#### 共轭

定义  $A$  内积

$$(v, w)_A = v^T A w$$

当  $(v, w)_A = 0$  时，向量  $v$  和  $w$  为  $A$  共轭

计算格式

$$\begin{aligned} x_0 &= \text{初始估计} \\ p_0 &= r_0 = b - Ax_0 \\ \text{for } k &= 0, 1, 2, \dots \\ \alpha_k &= \frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k} \\ x_{k+1} &= x_k + \alpha_k p_k \\ r_{k+1} &= r_k - \alpha_k A p_k \\ \beta_k &= \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k} \\ p_{k+1} &= r_{k+1} + \beta_k p_k \end{aligned}$$

向量  $x_k$  是第  $k$  步时的近似解. 向量  $r_k$  表示近似解  $x_k$  的余项



变量 $p_k$ 表示用于更新 $x_k$ 得到改进的 $x_{k+1}$ 时所使用的新的搜索方向

对于 $\alpha_k$ 和 $\beta_k$ 的选择

1. 选择 $\alpha_k$ 使得新的余项 $r_{k+1}$ 和方向 $p_k$ 正交, 保证下一余项向量和前面所有的余项向量都正交, 即 $(r^{k+1}, r^k) = 0$   
 $r^0, r^1, \dots, r^{n-1}$ 是正交的
2. 选择 $\beta_k$ , 保证 $p_{k+1}$ 和 $p_k$ 共轭, 即 $(p_{k+1}, p_k)_A = 0$   
 $p^0, p^1, \dots, p^{n-1}$ 是 $A$ 共轭的

代码

见讲义

## 插值

考虑函数

$$y = f(x)$$

在上面取点

$$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$$

我们希望通过这些有限的点构造多项式, 来模拟函数 $f(x)$ , 即取值的逆过程, 我们称为**插值**

## 拉格朗日插值

令

$$L_k(x) = \frac{(x - x_1) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_n)}{(x_k - x_1) \dots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \dots (x_k - x_n)}$$
$$L_k(x) = \begin{cases} 0 & x \neq x_k \\ 1 & x = x_k \end{cases}$$

构造多项式

$$P_{n-1}(x) = y_1 L_1(x) + \dots + y_n L_n(x)$$

满足

$$P_{n-1}(x_k) = y_k$$

## 牛顿差商

令

$$f[x_k] = f(x_k)$$
$$f[x_1, \dots, x_k] = \frac{f[x_2, \dots, x_k] - f[x_1, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_1}$$

构造多项式

$$P(x) = f[x_1] + f[x_1 x_2](x - x_1) + f[x_1 x_2 x_3](x - x_1)(x - x_2) + \dots + f[x_1 \dots x_n](x - x_1) \dots (x - x_{n-1})$$

## 插值误差

假设 $P(x)$ 是 $n-1$ 或者更低阶的插值多项式, 拟合 $n$ 个点 $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ , 则误差满足

$$f(x) - P(x) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n) \frac{f^{(n)}(c)}{n!}$$
$$\min(x_1, \dots, x_n) \leq c \leq \max(x_1, \dots, x_n)$$

## 龙格现象

极端的“多项式扭动”, 插值次数越高, 插值结果越偏离原函数的现象

## 切比雪夫插值

考虑误差公式中的分子

$$(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)$$

找到特定的 $x_1, x_2, \dots, x_n$ , 使得该式足够小

## 切比雪夫多项式

定义 $n$ 阶切比雪夫多项式

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x)$$

得到递推式

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

$T_n$ 主导系数为 $2^{n-1}$ , 满足

$$\deg(T_n) = n$$

即 $x$ 的最高次数为 $n$ 次,  $T_n$ 有 $n$ 个根, 因此可写为

$$T_n(x) = 2^{n-1}(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)$$

## 区间应用

在特定区间，选取切比雪夫多项式的根 $x_1, x_2, \dots, x_n$ ,

则 $(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)$ 满足：

### [-1,1]区间

$$x_i = \cos \frac{(2i-1)\pi}{2n}, i = 1, \dots, n$$
$$(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n) = \frac{T_n(x)}{2^{n-1}}$$

### [a,b]区间

$$x_i = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} \cos \frac{(2i-1)\pi}{2n}, i = 1, \dots, n$$
$$|(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)| \leq \frac{(\frac{b-a}{2})^n}{2^{n-1}}$$

## 样条插值

在多项式插值中，多项式给出的单一公式满足所有数据点。而样条使用多个公式，其中每个都是低阶多项式，来通过所有数据点

我们定义 $n$ 次样条， $n$ 为 $x$ 的最高阶数

$$S_k(x) = y_k + c_1(x - x_k)^1 + c_2(x - x_k)^2 + \dots + c_n(x - x_k)^n$$

## 三次样条

给定 $n$ 个点

$$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$$

通过这些点的三次样条 $S(x)$ 是一组三次多项式：

$$S_1(x) = y_1 + b_1(x - x_1) + c_1(x - x_1)^2 + d_1(x - x_1)^3$$
$$S_2(x) = y_2 + b_2(x - x_2) + c_2(x - x_2)^2 + d_2(x - x_2)^3$$
$$\vdots$$
$$S_{n-1}(x) = y_{n-1} + b_{n-1}(x - x_{n-1}) + c_{n-1}(x - x_{n-1})^2 + d_{n-1}(x - x_{n-1})^3$$

满足：

- 性质一：通过数值点

$$S_i(x_i) = y_i, S_i(x_{i+1}) = y_{i+1}, \text{其中 } i = 1, \dots, n-1$$

- 性质二：相邻的样条段斜率相同

$$S_i^{(1)}(x_i) = S_{i-1}^{(1)}(x_i), \text{其中 } i = 2, \dots, n-1$$

- 性质三：相邻的样条段曲率相同

$$S_i^{(2)}(x_i) = S_{i-1}^{(2)}(x_i), \text{其中 } i = 2, \dots, n-1$$

## 求解

对于通过 $n$ 个点的三次样条方程组，一共有 $3(n-1) = 3n-3$ 个未知数

性质一包含 $n-1$ 个方程，性质二和性质三各包含 $n-2$ 个方程，一共有 $n-1+2(n-2) = 3n-5$ 个方程

所以一共有无穷个解。可以添加额外的方程来使解唯一化

## 自然样条

满足

$$S_1^{(2)}(x) = S_n^{(2)}(x) = 0$$

这两个附加条件的三次样条被称为自然三次样条，这种条件称为自然样条的端点条件

通过更改端点条件可以得到不同的样条

## 贝塞尔曲线

贝塞尔样条允许用户控制节点处斜率，但是不再保证在节点导数的平滑性

## 最小二乘

---

考虑方程组

$$Ax = b$$

当解不存在时，可以试着找到近似解，即最小二乘近似

## 最小二乘解

### 法线方程

$$Ax = b$$

方程组可写为

$$x_1 v_1 + x_2 v_2 + \dots + x_n v_n = b$$

可以把 $b$ 看作是 $A$ 的列向量 $v_i$ 的线性组合，对应的组合系数是 $x_1, \dots, x_n$

即向量 $v_1, v_2, \dots, v_n$ 生成的空间中找到组合系数 $x_1, \dots, x_n$ ，使 $b$ 在这个空间上

当解不存在时，在向量空间 $A=\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 中存在与 $b$ 最近的点：

即存在 $\bar{x}$ ，满足

$$b - A\bar{x} \perp \text{平面} \{Ax | x \in R^n\}$$

把垂直性表示为矩阵的乘法，对于 $R^n$ 上所有的 $x$ ，

$$(Ax)^T(b - A\bar{x}) = 0$$

可写为

$$x^T A^T (b - A\bar{x}) = 0$$

这意味着 $n$ 维向量 $A^T(b - A\bar{x})$ 和 $R^n$ 中其他的 $n$ 维向量垂直, 这表明

$$A^T(b - A\bar{x}) = 0$$

即

$$A^T A\bar{x} = A^T b$$

称为法线方程, 它的解 $\bar{x}$ 是方程组 $Ax = b$ 的最小二乘解

## 余项

最小二乘解 $\bar{x}$ 的余项

$$r = b - A\bar{x}$$

大小度量:

- 向量的欧氏长度(2范数)

$$\|r\|_2 = \sqrt{r_1^2 + \cdots + r_m^2}$$

- 平方误差

$$SE = r_1^2 + \cdots + r_m^2$$

- 平均平方根误差

$$RMSE = \sqrt{\frac{SE}{m}} = \sqrt{\frac{r_1^2 + \cdots + r_m^2}{m}}$$

## QR分解

### Gram-Schmidt正交

对一组向量正交化: 给定一组输入的 $m$ 维向量, 找出正交坐标系, 获得由这些向量张成的空间

对于 $A$ 向量和 $B$ 向量, 找到正交单位向量:

$$q_1 = \frac{A}{\|A\|_1}$$

接着找到 $B$ 向量在 $A$ 向量上的投影, 然后用 $B$ 向量减去该投影即可得到与 $A$ 向量垂直的向量:

$$q_2 = B - q_1(q_1^T B)$$

然后转化为单位向量

$$q_2 = \frac{q_2}{\|q_2\|_2}$$

推广到多维向量, 令  $A_1, \dots, A_n$  是  $R^m$  中的线性无关向量:

$$y_j = A_j - q_1(q_1^T A_j) - q_2(q_2^T A_j) - \dots - q_{j-1}(q_{j-1}^T A_j)$$
$$q_j = \frac{y_j}{\|y_j\|_2}$$

对于上面的结果, 引入新的符号:

$$r_{jj} = \|y_j\|_2$$
$$r_{ij} = q_i^T A_j$$

则

$$q_j = \frac{y_j}{r_{jj}} = \frac{A_j - q_1 r_{1j} - q_2 r_{2j} - \dots - q_{j-1} r_{j-1,j}}{r_{jj}}$$

即

$$A_1 = q_1 r_{11}$$
$$A_2 = q_1 r_{12} + q_2 r_{22}$$
$$\dots$$
$$A_j = q_1 r_{1j} + \dots + q_{j-1} r_{j-1,j} + q_j r_{jj}$$

可写为

$$A_{m \times n} = Q_{m \times n} R_{n \times n}$$

称为消减QR分解

$$A_{m \times n} = Q_{m \times m} R_{m \times n}$$

称为完全QR分解

**改进:** 用  $y$  代替  $A_j$

$$y = A_j - q_1(q_1^T y) - q_2(q_2^T y) - \dots - q_{j-1}(q_{j-1}^T y)$$

## Household变换

Household反射子是正交矩阵, 通过  $m-1$  维平面反射  $m$  维向量。

即给定一个向量  $x$ , 重新找出一个相同长度的向量  $w$ , 计算Household反射得出矩阵  $H$  满足

$$Hx = w$$

定义向量  $v = w - x$ , 考虑投影矩阵

$$P = \frac{vv^T}{v^T v}$$

对于任何向量  $u$ ,  $Pu$  是  $u$  在  $v$  上的投影

令  $H = I - 2P$ , 则

$$Hx = x - 2Px = w - v - \frac{2vv^T}{v^T v}x = w - \frac{vv^T(w+x)}{v^T v} = w$$

矩阵 $H$ 被称为**Household反射子**

对 $A_{mn}$ 实现 $QR$ 分解:

对于 $A$ 的列向量, 通过**Household反射子**将其移动到:

$$x = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \Rightarrow w = \begin{bmatrix} \|x\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

求出**Household反射子**:

$$\begin{aligned} v &= w - x \\ P &= \frac{vv^T}{v^T v} \\ H &= I - 2P \end{aligned}$$

依次对 $A$ 做变换:

$$\begin{aligned} H_n \dots H_2 H_1 A &= R \\ A &= H_1 H_2 \dots H_n R = QR \end{aligned}$$

## 最小二乘实现

**实现最小二乘:**

求解 $A$ 的完全 $QR$ 分解

$$A_{mn} = Q_{mm} R_{mn}$$

代入 $Ax = b$ , 得

$$R_{mn} x_{n1} = Q_{mm}^T b_{m1}$$

即

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1n} \\ & r_{22} & \dots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = (q_1 | \dots | q_m) \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \\ b_{n+1} \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

化简, 得:

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1n} \\ & r_{22} & \dots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_n \\ d_{n+1} \\ \vdots \\ d_m \end{bmatrix}$$

分为两部分

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$\begin{bmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{n+1} \\ \vdots \\ d_m \end{bmatrix} \quad (2)$$

简写为

$$R_{nn} \bar{x}_{n1} = d_{n1} \quad (1)$$

解 $\bar{x}$ 即为最小二乘解

误差向量 $e$ 满足

$$e = Ax - b = QRx - b = Rx - Q^T b = - \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ d_{n+1} \\ \vdots \\ d_m \end{bmatrix} \quad (2)$$

最小二乘误差大小为

$$\|e\|_2^2 = d_{n+1}^2 + \cdots + d_m^2$$

## 数值微分与积分

### 数值微分

#### 有限差分公式

如果极限存在，函数 $f(x)$ 在 $x$ 点的导数是

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

计算时，存在误差。将 $f(x+h)$ 在点 $x$ 处泰勒展开：

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + h^2 \frac{f''(c)}{2!}$$

得到二点前向差分公式

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2} f''(c)$$

其中  $x < c < x+h$

**n阶近似：**误差是 $O(h^n)$



将 $f(x+h)$ 在点 $x$ 处泰勒展开：

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + h^2 \frac{f''(c)}{2!} + h^3 \frac{f'''(x)}{3!} + h^4 \frac{f''''(c)}{4!}$$

将 $f(x-h)$ 在点 $x$ 处泰勒展开：

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + h^2 \frac{f''(c)}{2!} - h^3 \frac{f'''(x)}{3!} + h^4 \frac{f''''(c)}{4!}$$

两式相减，得到**三点中心差分公式**

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(c)$$

其中  $x-h < c < x+h$

两式相加，得到**二阶导数的三点中心差分公式**

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(c)$$

## 外推

假设有 $n$ 阶公式 $F(h)$ 近似一个给定量 $Q$

$$Q \approx F(h) + Kh^n$$

代入 $\frac{h}{2}$

$$Q - F(\frac{h}{2}) \approx K \frac{h^n}{2^n} \approx \frac{1}{2^n} (Q - F(h))$$

得到 **$n$ 阶公式的外推**

$$Q \approx \frac{2^n F(\frac{h}{2}) - F(h)}{2^n - 1}$$

## 数值积分

### 梯形法则

给定一组数据点，我们可以使用插值和最小二乘建模，模拟 $f(x)$ ；现在，我们想要模拟函数 $f(x)$ 在数据区间的积分

$$\int f(x) dx$$

我们可以通过模拟 $f(x)$ 进而模拟 $f(x)$ 在数据区间 $[a, b]$ 的积分

对于二阶导数 $f(x)$ ，使用1阶拉格朗日插值，通过 $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$

$$\begin{aligned} f(x) &= y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!} f''(c_x) \\ &= P(x) + E(x) \end{aligned}$$

$c_x$  连续依赖于  $x$

在数据区间 $[x_0, x_1]$ 的两侧积分得到

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} P(x) dx + \int_{x_0}^{x_1} E(x) dx$$

而

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_1} P(x) dx &= y_0 \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx + y_1 \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx \\ &= y_0 \frac{h}{2} + y_1 \frac{h}{2} = h \frac{y_0 + y_1}{2}\end{aligned}$$

即**梯形法则**

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = h \frac{y_0 + y_1}{2} - \frac{h^3}{12} f''(c)$$

其中  $h = x_1 - x_0$ ,  $c$  在  $x_0$  和  $x_1$  之间

## 辛普森法则

对于二阶导数  $f(x)$ , 使用2阶拉格朗日插值, 通过  $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$

积分得到

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(c)$$

其中  $h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$ ,  $c$  在  $x_0$  和  $x_2$  之间

## 复合牛顿-科特斯公式

梯形和辛普森法则都在单一区间上操作, 我们可以通过除法把整个区间变为很多小区间再计算积分

**复合数值积分**: 在每个小区间上使用法则, 然后再求和

**复合梯形法则**

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} (y_0 + y_m + 2 \sum_{i=1}^{m-1} y_i) - \frac{(b-a)h^2}{12} f''(x)$$

其中  $h = \frac{b-a}{m}$ ,  $c$  在  $a$  和  $b$  之间

**复合辛普森公式**

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} [y_0 + y_{2m} + 4 \sum_{i=1}^m y_{2i-1} + 2 \sum_{i=1}^{m-1} y_{2i}] - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(c)$$

## 开牛顿-科特斯公式

对于闭牛顿-科特斯公式, 需要积分区间端点上的函数值; 而开牛顿-科特斯公式不使用在区间端点上的函数值

**中点法则**

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = hf(w) + \frac{h^3}{24} f''(c)$$

其中  $h = (x_1 - x_0)$ ,  $w$  是中点  $x_0 + \frac{h}{2}$ ,  $c$  在  $x_0$  和  $x_1$  之间

复合重点法则

$$\int_b^a f(x)dx = h \sum_{i=1}^m f(w_i) + \frac{(b-a)h^2}{24} f''(c)$$

其中  $h = \frac{b-a}{m}$ ,  $c$ 在  $a$ 和  $b$ 之间,  $w_i$ 是  $[a, b]$ 中  $m$ 个相等子区间的中点