第一章 数值分析与科学计算引论

记 x^* 为准确值，x 为 x^* 的一个近似值

绝对误差 $e_p=|x-x^*|$ **相对误差** $e_r=\left|\frac{x-x^*}{x}\right|$

相对误差限 $\varepsilon_r=\frac{\varepsilon}{|x|}\geqslant\frac{|x-x^*|}{|x|}=|e*r|$

条件数 $C_p=\left|\frac{f(x)-f(\tilde{x})}{f(x)}\right|/\left|\frac{\Delta x}{x}\right|\approx\left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right|$

$C_p\geqslant 10$ 就认为问题是病态的

四则运算误差限

$\varepsilon(\hat{p}_1+\hat{p}_2)<=\varepsilon(\hat{p}_1)+\varepsilon(\hat{p}_2)$

$\varepsilon(\hat{p}_1\hat{p}_2)\approx|\hat{p}_1|\varepsilon(\hat{p}_2)+|\hat{p}_2|\varepsilon(\hat{p}_1)$

$\varepsilon\left(\frac{\hat{p}_1}{\hat{p}_2}\right)\approx\frac{|\hat{p}_1|\varepsilon(\hat{p}_2)+|\hat{p}_2|\varepsilon(\hat{p}_1)}{|\hat{p}_2|^2}$

函数误差限 $\varepsilon(f(\hat{p}))\approx|f'(\hat{p})|\varepsilon(\hat{p})$

若近似数有 n 位有效数字，则可以写为 $\hat{p}=\pm 10^m\times(a_1+a_2\times 10^{-1}+\ldots+a_i\times 10^{-(n-1)})$

其绝对误差限为 $|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{m-n+1}$

其相对误差限 $\left|\frac{x-x^*}{x}\right|\leqslant\varepsilon_r\leqslant\frac{10^{1-n}}{2a_1}$

秦九韶算法

$p(x)=a_0x^n+a_1x^{n-1}+\cdots+a_{n-1}x+a_n=(\cdots(a_0x+a_1)x+\cdots+a_{n-1})x+a_n\quad a_0\neq 0$

$\begin{cases}b_0=a_0,\\ b_i=b_{i-1}x^*+a_i,\quad i=1,2,\cdots,n,\end{cases}$

$b_n=p(x^*)$ 为所求

第二章 插值

多项式插值：$P(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$

其系数由以下线性方程组确定：

$$\begin{bmatrix}1&x_0&x_0^2&\ldots&x_0^n\\1&x_1&x_1^2&\ldots&x_1^n\\\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\1&x_n&x_n^2&\ldots&x_n^n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}f(x_0)\\f(x_1)\\f(x_2)\\\vdots\\f(x_n)\end{bmatrix}$$

x_i 互异 $\Rightarrow\det\boldsymbol{A}\neq 0\Rightarrow$ 线性方程解唯一 $\Rightarrow P(x)$ 存在则唯一

拉格朗日插值：$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n}y_kl_k(x)$

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

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

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

余项：$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x),\xi\in(a,b)$

截断误差限：$|R_n(x)|\leq\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega_{n+1}(x)|$，其中 $M_{n+1}=\max_{a\leq x\leq b}\left|f^{(n+1)}(x)\right|$

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

二阶均差：$f[x_0,x_1,x_2]=\frac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0}$

k 阶均差：$f[x_0,x_1,\ldots,x_k]=\frac{f[x_1,x_2,\ldots,x_k]-f[x_0,\ldots,x_{k-1}]}{x_k-x_0}$

$f[x_0,x_1,\ldots,x_k]=\sum_{j=0}^{k}\frac{f(x_j)}{(x_j-x_0)\ldots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\ldots(x_j-x_k)}$

$f[x_0,x_1,\ldots,x_n]=\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!},\xi\in[a,b]$

牛顿插值公式：$N_n(x)=a_0+a_1(x-x_0)+a_2(x-x_0)(x-x_1)+\cdots+a_n(x-x_0)\ldots(x-x_{n-1})$

其中 $a_i=f[x_0,x_1,\ldots,x_i]$

余项：$R_n(x)=f[x,x_0,\ldots,x_n]\cdot(x-x_0)\cdots(x-x_n)$

重节点均差：$f[x_0,x_0]=\lim_{x_1\to x_0}[x_0,x_1]=f'(x_0)$

n 阶重节点均差：$f[x_0,x_0,\ldots,x_0]=\lim_{x_i\to x_0}f[x_0,x_1,\ldots,x_n]=\frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0)$

泰勒插值多项式：$P_n(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\cdots+\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n$

余项：$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1},\xi\in(a,b)$，也与之前余项在 $x_i\to x_0$ 时的结果一致。

三次埃尔米特插值多项式：

已知 $f(x_0),f(x_1),f(x_2),f'(x_1)$

则 $P(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1]\cdot(x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2]\cdot(x-x_0)(x-x_1)+A(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$

其中 $A=\frac{f'(x_1)-f[x_0,x_1]-(x_1-x_0)f[x_0,x_1,x_2]}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$

余项：$R(x)=\frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi)(x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2)$，$\xi$ 在 x_0,x_1,x_2 限定的范围内

两点三次埃尔米特插值多项式

已知 $f(x_0),f(x_1),f'(x_0),f'(x_1)$

则 $P(x)=\left(1+2\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2f(x_0)+\left(1+2\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2f(x_1)+(x-x_0)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2f'(x_0)+(x-x_1)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2f'(x_1)$

余项：$R(x)=\frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi)(x-x_0)^2(x-x_1)^2,\xi\in(x_0,x_1)$

分段线性插值：$I_h(x)=\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}f(x_k)+\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}f(x_{k+1})$，其中 $x_k\leqslant x\leqslant x_{k+1},k=0,1,\ldots,n-1$

三次样条插值函数：$S_i(x)=a_i(x-x_i)^3+b_i(x-x_i)^2+c_i(x-x_i)+d_i,x\in[x_i,x_{i+1}]$

记 h 为小区间长度，$M_i=S''(x_i),y_i=f(x_i)$，在区间 $[x_i,x_{i+1}]$ 上的 $S(x)$ 为

$a_i=\frac{M_{i+1}-M_i}{6h}$，$b_i=\frac{M_i}{2}$

$c_i=\frac{y_{i+1}-y_i}{h}-\frac{(M_{i+1}+2M_i)h}{6}$，$d_i=y_i$

其中 M_i 根据条件解线性方程组得到：$M_i+4M_{i+1}+M_{i+2}=\frac{6(y_i-2y_{i+1}+y_{i+2})}{h^2},1\leqslant i\leqslant n-2$

第三章 逼近与拟合

范数：设 S 是实数域上的线性空间，$x\in S$，如果存在值域为实数域的函数 $\|\cdot\|$，满足：

正定性：$\|x\|\geqslant 0$；$\|x\|=0$ 当且仅当 $x=0$

齐次性：$\|\alpha x\|=|\alpha|\|x\|,\alpha\in R$

三角不等式：$\|x+y\|\leqslant\|x\|+\|y\|,x,y\in S$

就称 $\|\cdot\|$ 是线性空间 S 上的范数，S 与 $\|\cdot\|$ 一起称为**赋范线性空间**，记为 X

对于 R^n 上的向量 $\mathbf{x}=(x_1,\cdots,x_n)^T$，三种常用范数：

无穷范数 $\|\mathbf{x}\|_\infty=\max_{1\leq i\leq n}|x_i|$

1-范数 $\|\mathbf{x}\|_1=\sum_{i=1}^{n}|x_i|$ **2-范数**：$\|\mathbf{x}\|_2=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}x_i^2}$

内积：设 X 是数域 K 上的线性空间，$\forall u,v\in X$。有 K 中的一个数与其对应，记为 (u,v)，其满足：

$(u,v)=\overline{(v,u)}$

$(\alpha u,v)=\alpha(u,v),\forall\alpha\in K$

$(u+v,w)=(u,w)+(v,w),\forall w\in X$

$(u,u)\geqslant 0$；$(u,u)=0$ 当且仅当 $u=0$

则称 (u,v) 是 X 上 u,v 的内积。定义了内积的线性空间称为**内积空间**

带权内积：$(\mathbf{x},\mathbf{y})=\sum_{i=1}^{n}\rho_ix_iy_i,\rho_i>0$

带权范数：$\|\mathbf{x}\|_2=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\rho_ix_i^2},\rho_i>0$

函数内积：$(f,g)=\int_a^b\rho(x)f(x)g(x)dx$

函数范数：$\|f\|_2=\sqrt{\int_a^b\rho(x)f^2(x)dx}$

若 X 是一个内积空间，$u_i\in X$，称**Gram 矩阵**为：

$$\mathbf{G}=\begin{bmatrix}(u_1,u_1)&(u_2,u_1)&\cdots&(u_n,u_1)\\(u_1,u_2)&(u_2,u_2)&\cdots&(u_n,u_2)\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\(u_1,u_n)&(u_2,u_n)&\cdots&(u_n,u_n)\end{bmatrix}$$

Gram 矩阵非奇异的充要条件是 $u_1,u_2,\ldots,u_n$ 线性无关

最佳平方逼近函数：$S^*(x)=\sum_{j=0}^{n}a_j\phi_j(x)$

$\phi=span\{\phi_0(x),\phi_1(x),\ldots,\phi_n(x)\}$ 是 $C[a,b]$ 中的一个子集

系数由称为**法方程**的线性方程组确定：

$$\begin{bmatrix}(\phi_0,\phi_0)&(\phi_0,\phi_1)&\ldots&(\phi_0,\phi_n)\\(\phi_1,\phi_0)&(\phi_1,\phi_1)&\ldots&(\phi_1,\phi_n)\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\(\phi_n,\phi_0)&(\phi_n,\phi_1)&\ldots&(\phi_n,\phi_n)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(f,\phi_0)\\(f,\phi_1)\\(f,\phi_2)\\\vdots\\(f,\phi_n)\end{bmatrix}$$

误差：$(\|\delta(x)\|_2)^2=(f(x),f(x))-(S^*(x),f(x))=(\|f(x)\|_2)^2-\sum_{k=0}^{n}a_k^*(\phi_k(x),f(x))$

特别地，如果 $\phi_k(x)=x^k,\rho(x)\equiv 1,f(x)\in C[0,1]$，记 $(f(x),\phi_k(x))=\int_0^1f(x)x^kdx=d_k,\mathbf{a}=(a_0,a_1,\ldots,a_n)^T,\mathbf{d}=(d_0,d_m,\ldots,d_n)^T$，则法方程可以写为 $\mathbf{Ha}=\mathbf{d}$。

其中 $\mathbf{H}$ 是**Hilbert 矩阵**：

$$\mathbf{H}=\begin{bmatrix}1&\frac{1}{2}&\cdots&\frac{1}{n+1}\\\frac{1}{2}&\frac{1}{3}&\cdots&\frac{1}{n+2}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\\frac{1}{n+1}&\frac{1}{n+2}&\cdots&\frac{1}{2n+1}\end{bmatrix}$$

Harr 条件：设 $\phi_0(x),\ldots,\phi_n(x)\in C[a,b]$ 的任意线性组合在点集 $x_0,\ldots,x_m,m\geqslant n$ 上至多只有 n 个不同的零点。则称 $\phi_0(x),\ldots,\phi_n(x)$ 在这个点集上满足 Haar 条件。

最小二乘函数：$s^*(x)=\sum_{j=0}^{n}a_j\phi_j(x)$

取 $\phi_k(x)=x^k$，满足 Haar 条件，对应法方程的系数矩阵非奇异，解存在。系数 a_k 可由下面的法方程解出：

$$\begin{bmatrix}\sum\rho_i&\sum\rho_ix_i&\ldots&\sum\rho_ix_i^n\\\sum\rho_ix_i&\sum\rho_ix_i^2&\ldots&\sum\rho_ix_i^{n+1}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\\sum\rho_ix_i^n&\sum\rho_ix_{n+1}&\ldots&\sum\rho_ix_i^{2n}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sum\rho_iy_i\\\sum\rho_ix_iy_i\\\sum\rho_ix_i^2y_i\\\vdots\\\sum\rho_ix_i^ny_i\end{bmatrix}$$

误差：$(\|\delta\|_2)^2=\sum_{i=0}^{m}\rho(x_i)[s^*(x_i)-f(x_i)]^2$

施密特（Schmite）正交化过程：若 $f_0(x),f_1(x),\ldots,f_n(x)$ 为 $C[a,b]$ 上的一组线性无关函数，则由它们可以得到 $C[a,b]$ 上一组两两**正交**的函数 $g_n(x)=f_n(x)-\sum_{i=0}^{n-1}\frac{(f_n,g_i)}{(g_i,g_i)}g_i(x)$

规范正交组：$e_k(x)=\frac{1}{\|g_k\|_2}g_k(x)$

正交多项式：多项式空间 P_n 中一组线性无关函数 $\{x^k\}$ 经过施密特正交化过程得到的一组多项式 $\{p_i(x)\}$

若 $\{p_i(x)\}$ 是 $[a,b]$ 上权函数为 $\rho(x)$ 的正交多项式，则它们具有以下性质：

$p_k(x)$ 是首项系数不为 0 的 k 次多项式

$\{p_i(x)\}$ 是多项式空间 P_n 上的一组正交基

$p_n(x)=0$ 在 $[a,b]$ 上有 n 个单根

$p_n(x)$ 与任一不高于 $n-1$ 次的多项式正交

下面给出由不同的权函数，得到的不同正交多项式：

Legendre 多项式，$t\in[-1,1]$，$\rho(t)=1$

$P_0(t)=1,\quad P_1(t)=t,\quad(k+1)P_{k+1}(t)=(2k+1)tP_k(t)-kP_{k-1}(t)$

Chebyshev 多项式1，$t\in[-1,1]$，$\rho(t)=\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}$

$P_0(t)=1,\quad P_1(t)=t,\quad P_{k+1}(t)=2tP_k(t)-P_{k-1}(t)$

Chebyshev 多项式2，$t\in[-1,1]$，$\rho(t)=\sqrt{1-t^2}$

$P_0(t)=1,\quad P_1(t)=2t,\quad P_{k+1}(t)=2tP_k(t)-P_{k-1}(t)$

Laguerre 多项式，$t\in[0,\infty)$，$\rho(t)=e^{-t}$

$P_0(t)=1,\quad P_1(t)=1-t,\quad P_{k+1}(t)=(2k+1-t)P_k(t)-k^2P_{k-1}(t)$

Hermite 多项式，$t\in(-\infty,\infty)$，$\rho(t)=e^{-t^2}$

$P_0(t)=1,\quad P_1(t)=2t,\quad P_{k+1}(t)=2tP_k(t)-2kP_{k-1}(t)$

如果拟合的时候，用的是正交多项式 $\{p_i(x)\}$，可以直接写出最佳平方逼近函数 $S^*(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,p_k)}{(p_k,p_k)}p_k(x)$，注意此时的积分区域为定义域，非定义域需做出相应变换

对于一般的积分，有：$\int_a^bP(s)ds=\frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1}P(t)dt,\ s=\frac{b-a}{2}t+\frac{b+a}{2}$

对于 Legendre 多项式，有：$\int_{-1}^{1}P_j(t)P_k(t)dt=\frac{2}{2k+1},\ j=k$

第四章 数值积分微分

数值积分

左矩形公式 $I\approx(b-a)f(a)$ **右矩形公式** $I\approx(b-a)f(b)$

中点矩形公式 $I\approx(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$

插值型求积公式 $I\approx I_n=\int_a^bL_n(x)dx=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$，其中 $A_k=\int_a^bl_k(x)dx$

余项 $R[f]=\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx$，至少有n次代数精度

形如 $I_n=\sum^nA_kf(x_k)$ 的积分公式至少有 n 次代数精度的充要条件是：它是插值型的

牛顿-柯特斯公式：$I\approx I_n=(b-a)\sum_{k=0}^{n}\mathbf{C}_k^{(n)}f(x_k)$

其中 $h=\frac{b-a}{n},x_k=a+kh$

若n为偶数，则n阶N-C公式至少有n+1次代数精度

柯特斯系数：$\mathbf{C}_k^{(n)}=\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!\cdot n}\int_0^n\prod_{j=0,j\neq k}^{n}(t-j)dt$

$\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}=1$ 恒成立

梯形公式 $I_1=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$ 余项 $R[f]=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$

辛普森公式 $I_2=\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$

余项 $R[f]=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)$

柯特斯公式 $I_4=\frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]$ 误差 $R[f]=-\frac{(b-a)^7}{1935360}f^{(6)}(\eta),\eta\in(a,b)$

复化的梯形公式 $I\approx T_n=\frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)]$

余项：$R_n[f]=-\frac{b-a}{12}h^2f''(\eta),\eta\in(a,b)$

复化的辛普森公式 $I\approx S_n=\frac{h}{6}[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)],x_{k+\frac{1}{2}}=\frac{x_k+x_{k+1}}{2}$

余项：$R_n[f]=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4f^{(4)}(\eta),\eta\in(a,b)$

递推型梯形公式 $T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})$

进一步可定义 $S_n=\frac{4T_{2n}-T_n}{4-1},C_n=\frac{4^2S_{2n}-S_n}{4^2-1}$

龙贝格求积公式 $R_n=\frac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1}$

有 $\lim_{n\to\infty}T_n,S_n,C_n,R_n=I$，收敛速度从左到右依次加快

高斯-勒让德求积公式 $\int_{-1}^{1}1*f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$. 其中 x_k 为勒让德多项式的零点

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
0	0.000000	2.000000	4	±0.9061798	0.2369269
1	±0.5773503	1.000000		±0.5384693	0.4786287
2	±0.7745967	0.5555556		0.000000	0.5688889
	0.000000	0.8888889	5	±0.9324695	0.1713245
3	±0.8611363	0.3478548		±0.6612094	0.3607616
	±0.3399810	0.6521452		±0.2386192	0.4679139

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

高斯-拉盖尔求积公式 $\int_0^\infty e^{-x}*f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$. 其中 x_k 为拉盖尔多项式的零点

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
2	0.5858864	0.8535534	5	1.4134031	0.3986668
	3.4142136	0.1464466		3.5964258	0.0759424
3	0.4157746	0.7110930		7.0858100	0.0036118
	2.2942804	0.2785177		12.6408008	0.0002337
	602899450829	0.0103893	6	0.2228466	0.4589647
4	0.3225477	0.6031541		1.1889321	0.4170008
	1.7457611	0.3574187		2.9927363	0.1133734
	4.5366203	0.0388879		5.7751436	0.0103992
	9.3950709	0.0005393		9.8374674	0.0002610

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
5	0.2635603	0.5217556		15.9828740	0.0000090

高斯-赫尔米特求积公式 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} * f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$. 其中 x_k 为赫尔米特多项式的零点

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
2	± 0.7071068	0.8862269	6	± 0.4360774	0.7246296
3	± 1.2247449	0.2954090		± 1.3358491	0.1570673
	0	1.8163590		± 2.3506050	0.0045300
4	± 0.5246476	0.8049141	7	± 0.8162879	0.4256073
	± 1.6506801	0.0813128		± 1.6735516	0.0545156
5	± 0.9585725	0.3936193		± 2.6519614	0.0009172
	± 2.0201829	0.0199532		0	0.8102646
	0	0.9453087			

数值微分

向前差商公式 $f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$ 误差：$-\frac{h}{2}f''(\xi)$

向后差商公式 $f'(x) \approx \frac{f(x)-f(x-h)}{h}$ 误差：$\frac{h}{2}f''(\xi)$

中心差商公式 $f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$ 误差：$-\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$

舍入误差上界 $\delta(f'(a)) = f'(a) - G(a) \leqslant \frac{|\varepsilon_1|+|\varepsilon_2|}{2h} \leqslant \frac{\varepsilon}{h}$, $\varepsilon = \max\{|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2|\}$

其中 $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ 分别是 $f(a+h), f(a-h)$ 的舍入误差

3点前向 $f'(x_i) \approx \frac{-f(x_{i+2})+4f(x_{i+1})-3f(x_i)}{x_{i+2}-x_i}$

3点中间 $f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{x_{i+1}-x_{i-1}}$

3点后向 $f'(x_i) \approx \frac{3f(x_i)-4f(x_{i-1})+f(x_{i-2})}{x_i-x_{i-2}}$

插值型求导公式： $f'(x) = L_n'(x)$

余项 $R[f']|_{x=x_k} = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k)$

第五章 线性方程组——直接法

高斯消元法：通过基本变换，将增广矩阵转化为阶梯型矩阵：

$$[\mathbf{A}:\mathbf{b}] = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_2^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

若 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ，则 $x_n = (b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j)/(a_{kk}^{(k)})$

LU 分解：(Doolittle)高斯消元法的每一步初等变换相当于一个初等矩阵左乘原矩阵，最终得到一个上三角阵 $\mathbf{L_{n-1}} \ldots \mathbf{L_2 L_1 A} = \mathbf{U}$

所以 $\mathbf{A} = \mathbf{L_1^{-1} L_2^{-1}} \ldots \mathbf{L_{n-1}^{-1} U} = \mathbf{LU}$ ，其中 $\mathbf{L}$ 是下三角阵：

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

则原方程组等价于 $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}, \mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ ，这个方程组可按下述过程解出：

$$y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k,\ x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik} x_k)/(u_{ii})$$

平方根法：设 $\mathbf{A}$ 是对称正定矩阵，则一定有唯一分解 $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ ，且 $u_{kk} > 0$

则有 Cholesky 分解 $\mathbf{A} = \mathbf{LU} = \mathbf{LDL^T} = \mathbf{LD^{1/2}D^{1/2}L^T} = \mathbf{GG^T}$ ，其中

$$\mathbf{D^{1/2}} = \begin{bmatrix} \sqrt{u_{11}} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{u_{22}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{u_{33}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sqrt{u_{nn}} \end{bmatrix}$$

Cholesky 分解后，类似 LU 分解的过程得到最终解

矩阵范数：如果矩阵 $\mathbf{A} \in R^{n\times n}$ 与某个非负的实值函数 $N(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|$ 满足正定性、齐次性、三角不等式以及相容性，则称 $N(\mathbf{A})$ 是一个矩阵范数

相容性：$\|\mathbf{Ax}\| \leqslant \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}\|$。其中 $\|\mathbf{A}\|$ 矩阵范数，$\|\mathbf{Ax}\|, \|\mathbf{x}\|$ 是向量范数。只有满足这个不等式，才说这个矩阵范数和这个向量范数是相容的。

算子范数（从属矩阵范数）：$\|\mathbf{A}\| = \max_{\|\mathbf{x}\|=1}\{\|\mathbf{Ax}\|\} = \max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|}$ ，其中 $\|\mathbf{Ax}\|$ 是某个向量范数。算子范数度量了矩阵 $\mathbf{A}$ 将向量 $\mathbf{x}$ 映射到新向量 $\mathbf{Ax}$ 的"放大"程度。

由不同的向量范数可以导出不同的算子范数：

1-范数：又称列范数，每一列中元素的绝对值之和的最大值 $\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n}\left\{\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|\right\}$

2-范数：又称谱范数 $\|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}}$，其中 λ_{max} 是矩阵 $\mathbf{A^TA}$ 最大特征值

无穷范数：又称行范数，每一行中元素的绝对值之和的最大值 $\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n}\left\{\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\right\}$

其他种类的范数： **F-范数**：$\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}^2}$

谱半径 $\rho(\mathbf{A}) = \max|\lambda_i|$，其中 λ_i 是 $\mathbf{A}$ 的特征值

对矩阵的任何一种相容范数都有 $\rho(\mathbf{A}) \leqslant \|\mathbf{A}\|$

第六章 线性方程组——迭代法

定常迭代法

对于线性方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ （$\mathbf{A}$ 是非奇异矩阵），对 $\mathbf{A}$ 进行矩阵分裂：

$\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$，其中 $\mathbf{M}$ 是可选择的非奇异矩阵

于是得到迭代式 $\mathbf{x} = \mathbf{M^{-1}Nx} + \mathbf{M^{-1}b} = \mathbf{Bx} + \mathbf{f} \Rightarrow \mathbf{x^{(k+1)}} = \mathbf{Bx^{(k)}} + \mathbf{f}$

一阶线性定常迭代法

即取 $\mathbf{M} = \mathbf{I}$

雅可比迭代法

采用矩阵分裂： $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N} = \mathbf{D} - (\mathbf{L} + \mathbf{U})$

其中 $\mathbf{D}$ 就是单独提出 $\mathbf{A}$ 的对角线， $\mathbf{L}, \mathbf{U}$ 是 $\mathbf{A}$ 除去对角线后的下三角和上三角取负

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

$\mathbf{x^{(k+1)}}$ 可由以下公式得到:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1,j\neq i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right)$$

高斯-赛格尔迭代法

采用矩阵分裂： $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N} = (\mathbf{D} - \mathbf{L}) - \mathbf{U}$

则 $\mathbf{Dx^{(k+1)}} = \mathbf{Lx^{(k+1)}} + \mathbf{Ux^{(k)}} + \mathbf{b}$

$\mathbf{x^{(k+1)}}$ 可由以下公式得到:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{-1}{a_{ii}}\left(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} - b_i\right)$$

逐次超松驰迭代法（SOR）

引入松弛因子 $\omega, 0 < \omega < 2$ 采用矩阵分裂： $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N} = \frac{1}{\omega}(\mathbf{D} - \omega\mathbf{L}) - \frac{1}{\omega}[(1-\omega)\mathbf{D} + \omega\mathbf{U}]$

则 $\mathbf{Dx^{(k+1)}} = \mathbf{Dx^{(k)}} + \omega(\mathbf{b} + \mathbf{Lx^{(k+1)}} + \mathbf{Ux^{(k)}} - \mathbf{Dx^{(k)}})$

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

$\mathbf{x^{(k+1)}}$ 可由以下公式得到:

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right)/a_{ii}$$

严格对角占优矩阵

满足条件 $\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}| < |a_{ii}|$ ， $i = 1, 2, \cdots, n$ ，则称矩阵A是严格对角占优矩阵。

雅可比迭代法和高斯-赛格尔迭代法都收敛

收敛性

迭代法收敛充要条件： $\rho(\mathbf{B}) < 1$ ，此时对任意初始向量 $\mathbf{x^{(0)}} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)})^T$ ，会收敛到真实解

用到矩阵分裂时，还要求 $\mathbf{D}$ 非奇异

另一个充分条件：对于迭代法 $\mathbf{x^{(k+1)}} = \mathbf{Bx^{(k)}} + \mathbf{f}$ 如果有 $\mathbf{B}$ 的某种算子范数 $\|\mathbf{B}\| = q < 1$,则迭代法全局收敛，且有

$\|x^* - x^{(k)}\| \leq q^k\|x^* - x^{(0)}\|$

$\|x^* - x^{(k)}\| \leq \frac{q}{1-q}\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

$\|x^* - x^{(k)}\| \leq \frac{q^k}{1-q}\|x^{(1)} - x^{(0)}\|$

第七章 非线性方程组求根

二分法的误差：

$|x_k - x^*| \leqslant (b_k - a_k)/2 = (b-a)/2^{k+1} \quad (k = 0, 1, 2\ldots)$

不动点的存在性

设迭代函数 $\phi(x) \in C[a, b]$,并且

(1) $\forall x \in [a, b]$,都有 $\phi(x) \in [a, b]$

(2) $\exists 0 \leq L < 1$, 使得 $\forall x, y \in [a, b]$,都有 $|\phi(x) - \phi(y)| \leq L|x - y|$

那么 $\phi(x)$ 在 $[a, b]$ 上存在唯一的不动点 x^*

上述定理的第二个条件可用 $|\phi'(x)| \leq L < 1$ 代替。

误差估计：

$|x_k - x^*| \leqslant \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0|$ 或 $|x_k - x^*| \leqslant \frac{L}{1-L}|x_k - x_{k-1}|$

局部收敛性

若 $\phi'(x)$ 在 x^* 的某邻域内连续，且 $|\phi'(x^*)| < 1$,则迭代法是局部收敛的.

收敛阶

误差 $e_k = x_k - x^*$, 若 $\lim_{k\to\infty}\frac{e_{k+1}}{e_k^p} = C$, $C \neq 0$, 则迭代过程 p 阶收敛

如果迭代函数在不动点 x^* 附近有 p 阶连续导数且 $\phi'(x^*) = \phi''(x^*) = \cdots = \phi^{(p-1)}(x^*) = 0, \quad \phi^{(p)}(x^*) \neq 0$,那么迭代过程在 x^* 附近 p 阶收敛

斯特芬森迭代法： $x_{k+1} = \psi(x_k), \psi(x) = x - \frac{[\phi(x)-x]^2}{\phi(\phi(x))-2\phi(x)+x}$

牛顿法： $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$

简化牛顿法： $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_0)}$

牛顿下山法： $x_{k+1} = x_k - \lambda\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ 每一次迭代从 $\lambda = 1$ 开始试算，不断令 λ 减半直到满足 $|f(x_{k+1})| < |f(x_k)|$

重根情形下的牛顿法：若 $f(x) = (x - x^*)^m h(x)$ 改为 $x_{k+1} = x_k - m\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ ，仍然是平方收敛的

令 $\mu(x) = f(x)/f'(x)$ 对其用牛顿法得： $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)f'(x_k)}{[f'(x_k)]^2 - f(x_k)f''(x_k)}$

单点弦截法（割线法）：$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_0)}(x_k - x_0)$

两点弦截法： $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}(x_k - x_{k-1})$

可取两端点为初始值

第九章 常微分方程

一阶常微分方程初值问题

$$\begin{cases} y' = f(x, y), x \in [x_0, b] \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

利普希兹条件： $|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leqslant L|y_1 - y_2|, L > 0$

前向欧拉法： $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$ ，局部截断误差 $T_{n+1} = \frac{h^2}{2}y''(x_n) + O(h^3)$

后向欧拉法： $y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$ ，局部截断误差 $T_{n+1} = -\frac{h^2}{2}y''(x_n) + O(h^3)$

梯形方法： $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})]$ ，局部截断误差 $T_{n+1} = -\frac{h^3}{12}y'''(x_n) + O(h^4)$

改进欧拉法（Heun 法）

$$\begin{cases} y_p = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_c = y_n + hf(x_{n+1}, y_p) \\ y_{n+1} = \frac{y_p + y_c}{2} \end{cases}$$

r 级显式龙格-库塔公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n, y_n, h) = y_n + h\sum_{i=1}^{r} c_i K_i \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_i = f(x_n + \lambda_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{i-1}\mu_{ij}K_j), \quad i = 2, \ldots, r \end{cases}$$

二阶 R-K 公式（中点公式）

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hK_2 \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) \end{cases}$$

三阶 R-K 公式（库塔公式）

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3), \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1\right) \\ K_3 = f(x_n + h, y_n - hK_1 + 2hK_2) \end{cases}$$

四阶 R-K 公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) \\ K_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2) \\ K_4 = f(x_n + h, y_n + hK_3) \end{cases}$$

线性多步法： $y_{n+k} = \sum_{i=0}^{k-1}\alpha_i y_{n+i} + h\sum_{i=0}^{k}\beta_i f_{n+i}, f_{n+i} = f(x_{n+i}, y_{n+i})$

$\beta_k \neq 0$ 隐式 k 步法；否则为显示多步法

局部截断误差： $T_{n+k} = c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2})$

阿当姆斯显式公式

步数 k	阶数 p	公式	c_{p+1}
1	1	$y_{n+1} = y_n + hf_n$	$\frac{1}{2}$
2	2	$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{2}(3f_{n+1} - f_n)$	$\frac{5}{12}$
3	3	$y_{n+3} = y_{n+2} + \frac{h}{12}(23f_{n+2} - 16f_{n+1} + 5f_n)$	$\frac{3}{8}$
4	4	$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{h}{24}(55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n)$	$\frac{251}{720}$

阿当姆斯隐式公式

步数 k	阶数 p	公式	c_{p+1}
1	2	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n)$	$-\frac{1}{12}$
2	3	$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{12}(5f_{n+2} + 8f_{n+1} - f_n)$	$-\frac{1}{24}$
3	4	$y_{n+3} = y_{n+2} + \frac{h}{24}(9f_{n+3} + 19f_{n+2} - 5f_{n+1} + f_n)$	$-\frac{19}{720}$
4	5	$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{h}{720}(251f_{n+4} + 646f_{n+3} - 264f_{n+2} + 106f_{n+1} - 19f_n)$	$-\frac{3}{160}$

米尔尼方法 $y_{n+4} = y_n + \frac{4h}{3}(2f_{n+3} - f_{n+2} + 2f_{n+1})$

局部截断误差 $T_{n+4} = \frac{14}{45}h^5y^{(5)}(x_n) + O(h^6)$

辛普森方法 $y_{n+2} = y_n + \frac{h}{3}(f_n + 4f_{n+1} + f_{n+2})$.

局部截断误差 $T_{n+2} = -\frac{h^5}{90}y^{(5)}(x_n) + O(h^6)$.

汉明方法 $y_{n+3} = \frac{1}{8}(9y_{n+2} - y_n) + \frac{3h}{8}(f_{n+3} + 2f_{n+2} - f_{n+1})$

局部截断误差 $T_{n+3} = -\frac{h^5}{40}y^{(5)}(x_n) + O(h^6)$.