插值：$f(x)$定义在$[a,b]$上，$x_0,x_1,\cdots,x_n$为$n+1$个互异节点，且$y_i=f(x_i)$，$i=0,1,\cdots,n+1$，

要寻找一个多项式近似函数$P(x)$，s.t $P(x_i)=f(x_i)$，$i=0,\cdots,n+1$，$R(x)=f(x)-P(x)$为插值余项/误差.

{分段

多项式插值：$n+1$个点唯一确定一个n次插值多项式. $P(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0$

$$P(x_i)=y_i \Rightarrow \begin{cases} a_nx_0^n+a_{n-1}x_0^{n-1}+\cdots+a_1x_0+a_0=y_0 \\ a_nx_1^n+a_{n-1}x_1^{n-1}+\cdots+a_1x_1+a_0=y_1 \\ \vdots \\ a_nx_n^n+a_{n-1}x_n^{n-1}+\cdots+a_1x_n+a_0=y_n \end{cases} \Rightarrow D=\begin{vmatrix} x_0^n & x_0^{n-1} & \cdots & 1 \\ x_1^n & x_1^{n-1} & \cdots & 1 \\ \vdots & & & \\ x_n^n & x_n^{n-1} & \cdots & 1 \end{vmatrix}=\prod_{i<j}(x_j-x_i)\neq 0$$

$\therefore (a_n,a_{n-1},\cdots,a_1,a_0)$存在且唯一 $\Rightarrow$ 多项式插值唯一 $\Rightarrow$ 如何确定？

1. Lagrange插值：引进 $l_k(x_i)=\begin{cases}1, & x=x_k\\ 0, & x\neq x_k\end{cases}$

$\therefore L_n(x)=l_0(x)\cdot y_0+l_1(x)\cdot y_1+\cdots+l_n(x)\cdot y_n$，满足$L_n(x_i)=0\cdot y_0+\cdots+1\cdot y_i+0\cdot y_{i+1}+\cdots+0\cdot y_n=y_i$

$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n}l_k(x)\cdot y_k$，$l_k(x)$为1个不超过$n$次的多项式. 且$l_k(x_0)=l_k(x_1)=\cdots=l_k(x_{k-1})=l_k(x_{k+1})=\cdots=l_k(x_n)=0$

$l_k(x)=A\cdot(x-x_0)\cdot(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})\cdot(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)$，$l_k(x_k)=1$代入 $\Rightarrow A=\dfrac{1}{(x_k-x_0)(x_k-x_1)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}$

$\Rightarrow l_k(x)=\dfrac{\prod_{j\neq k}(x-x_j)}{\prod_{j\neq k}(x_k-x_j)}$，若记$\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$，则$l_k(x)=\dfrac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_k)\cdot\omega_{n+1}'(x_k)}$

$\therefore L_n(x)=\sum_{k=0}^{n}y_k\dfrac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_k)\omega_{n+1}'(x_k)}$

对于余项$R(x)=f(x)-L(x)$，$R(x_0)=R(x_1)=\cdots=R(x_n)=0$

$\therefore R(x)=k(x)\cdot(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)=k(x)\omega_{n+1}(x).$

固定x，记$\varphi(t)=f(t)-L(t)-k(x)\cdot\omega_{n+1}(t)$于$[a,b]$上有零点$x_0,x_1,\cdots,x_n,x$，

$\therefore$利用Rolle Th：$\varphi^{(n+1)}(t)=0$于$[a,b]$上有1个零点，$\varphi^{(n+1)}(\xi)=0=f^{(n+1)}(\xi)-0-k(x)(n+1)! \Rightarrow k(x)=\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$

$\therefore R(x)=\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$

2. Newton插值：具有承袭性的插值

对于n个插值点$x_0,x_1,\cdots,x_{n-1}$；$\{1,x-x_0,(x-x_0)(x-x_1),\cdots,(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})\}$是其基，

$N_n(x)=a_0+a_1(x-x_0)+a_2(x-x_0)(x-x_1)+\cdots+a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$

其中$a_0,a_1,\cdots,a_n$可用均差表示：def. $f[x_i,x_j]=\dfrac{f(x_j)-f(x_i)}{x_j-x_i}$ 一阶差商，$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\dfrac{f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-2},x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-2},x_{k-1}]}{x_k-x_{k-1}}$ k阶差商

均差的性质：$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\sum_{j=0}^{k}\dfrac{f(x_j)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)}$

$f[x_0,\cdots,x_i,\cdots,x_j,\cdots,x_k]=f[x_0,\cdots,x_j,\cdots,x_i,\cdots,x_k]$，$\Rightarrow f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\dfrac{f[x_1,\cdots,x_k]-f[x_0,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_0}$

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

pf. 记$\varphi(x)=f(x)-\sum_{j=0}^{n}\dfrac{f(x_j)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)}$，$\varphi(x_0)=\varphi(x_1)=\cdots=\varphi(x_n)=0$

$\therefore \exists\xi$，$\varphi^{(n)}(\xi)=0 \Rightarrow \varphi^{(n)}(\xi)=0=f^{(n)}(\xi)-\sum_{j=0}^{n}\dfrac{f(x_j)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)}\cdot n! \Rightarrow f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\dfrac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$

$\therefore P_0(x)=f(x_0)$, $P_1(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)$, ···

$f(x)=f(x_0)+(x-x_0)f[x,x_0]$, $f[x,x_0]=f[x_0,x_1]+f[x,x_0,x_1](x-x_1)$, ···

不断代入前式: $f(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)+\cdots+f[x_0,x_1,\cdots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$

$+f[x,x_0,x_1,\cdots,x_n]\,\omega_{n+1}(x)\triangleq N_n(x)+R_n(x)$

$\therefore R_n(x)=f[x,x_0,x_1,\cdots,x_n]\,\omega_{n+1}(x)=\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$

$N_{n+1}(x)=N_n(x)+f[x_0,x_1,\cdots,x_{n+1}]\cdot(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$

3. Newton差分形式: 简便形式的(等距形式的)插值, $x_k=x_0+kh\ (k=0,1,\cdots,n)$

def: $\begin{cases}\Delta f_k=f_{k+1}-f_k\\ \nabla f_k=f_k-f_{k-1}\\ \delta f_k=f_{k+\frac12}-f_{k-\frac12}\end{cases}$ $\therefore \Delta^2 f_k=\underbrace{(f_{k+2}-f_{k+1})}_{\Delta f_{k+1}}-\underbrace{(f_{k+1}-f_k)}_{\Delta f_k}=f_{k+2}-2f_{k+1}+f_k$

def: 不变算子 $If_k=f_k$, 位移算子 $Ef_k=f_{k+1}$

$\therefore \Delta f_k=Ef_k-If_k=(E-I)f_k \Rightarrow \Delta^n=(E-I)^n=\sum_{j=0}^{n}\binom{n}{j}E^{n-j}\cdot(-I)^j=\sum_{j=0}^{n}\binom{n}{j}E^{n-j}\cdot(-1)^j$

$\therefore \Delta^n f_k=\sum_{j=0}^{n}\binom{n}{j}E^{n-j}(-1)^j f_k=\sum_{j=0}^{n}\binom{n}{j}(-1)^j\cdot f_{k+n-j}$

$f_{n+k}=E^n f_k=(I+\Delta)^n f_k=\sum_{j=0}^{n}\binom{n}{j}\Delta^j f_k$

$f[x_k,x_{k+1}]=\dfrac{f_{k+1}-f_k}{x_{k+1}-x_k}=\dfrac{f_{k+1}-f_k}{h}\Rightarrow f[x_k,x_{k+1},x_{k+2}]=\dfrac{f[x_{k+1},x_{k+2}]-f[x_k,x_{k+1}]}{x_{k+2}-x_k}=\dfrac{\Delta^2 f_k/h}{2h}=\dfrac{\Delta^2 f_k}{2h^2}$

$\therefore f[x_k,x_{k+1},\cdots x_{k+m}]=\dfrac{1}{m!\,h^m}\Delta^m f_k$

$\therefore$ 对等距节点插值时. $x=x_0+th$, $N_n(x_0+th)=f_0+t\Delta f_0+\dfrac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f_0+\cdots+\dfrac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f_0$

$R_n(x)=\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)=\dfrac{t(t-1)\cdots(t-n)h^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi)$

4. Hermite插值

$f[x_0,x]=\dfrac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}\to f'(x_0)\ (x\to x_0)\Rightarrow$ def: $f[x_0,x_0]=f'(x_0)$

$\therefore f[x_0,x_0,x_0]=\lim\limits_{x\to x_0}f[x_0,x_0,x]=\lim\limits_{x\to x_0}\dfrac{f[x,x_0]-f[x_0,x_0]}{x-x_0}=\lim\limits_{x\to x_0}\dfrac{\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}-f'(x_0)}{x-x_0}=\lim\limits_{x\to x_0}\dfrac{f(x)-f(x_0)-f'(x_0)(x-x_0)}{(x-x_0)^2}$

$=\lim\limits_{x\to x_0}\dfrac{\frac{f''(\xi)}{2!}(x-x_0)^2}{(x-x_0)^2}=\dfrac{f''(x_0)}{2!}\Rightarrow\therefore f[x_0,x_0,\cdots,x_0]=\dfrac{1}{n!}f^{(n)}(x_0)$

$\therefore$ 对于Newton插值: $N(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)+\cdots+f[x_0,x_1,\cdots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$

$\xrightarrow{(x_i\to x_0)}f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\dfrac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2+\cdots+\dfrac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n$

$R(x)=\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\xrightarrow{(x_i\to x_0)}\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1}$

① Hermit插值1: $P(x_0)=f(x_0)$, $P(x_1)=f(x_1)$, $P(x_2)=f(x_2)$, $P'(x_1)=f'(x_1)$

$P(x)=\underline{f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)}+A(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$

代入 $P'(x_1)=f'(x_1)$, $P'(x)=f[x_0,x_1]+f[x_0,x_1,x_2](2x-x_0-x_1)+A\big((x-x_1)(x-x_2)+(x-x_0)(x-x_1)+(x-x_0)(x-x_2)\big)$

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

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

② Hermit插值2：$H(x_k)=y_k,\ H(x_{k+1})=y_{k+1},\ H'(x_k)=m_k,\ H'(x_{k+1})=m_{k+1}$

记：$H(x)=\alpha_k(x)\cdot y_k+\alpha_{k+1}(x)\cdot y_{k+1}+\beta_k(x)m_k+\beta_{k+1}(x)m_{k+1}$ $\quad \deg H\le 3$

$$\therefore \begin{cases} \alpha_k(x_k)=1, & \alpha_k(x_{k+1})=0, & \alpha_k'(x_k)=0, & \alpha_k'(x_{k+1})=0 \\ \alpha_{k+1}(x_k)=0, & \alpha_{k+1}(x_{k+1})=1, & \alpha_{k+1}'(x_k)=0, & \alpha_{k+1}'(x_{k+1})=0 \\ \beta_k(x_k)=0, & \beta_k(x_{k+1})=0, & \beta_k'(x_k)=1, & \beta_k'(x_{k+1})=0 \\ \beta_{k+1}(x_k)=0, & \beta_{k+1}(x_{k+1})=0, & \beta_k'(x_{k+1})=0, & \beta_{k+1}'(x_{k+1})=1 \end{cases}$$

∴对于 $\alpha_k(x)$：x_{k+1}为其二重根 $\Rightarrow \alpha_k(x)=\frac{ax+b}{(x_k-x_{k+1})^2}\cdot(x-x_{k+1})^2$

代入 $\alpha_k(x_k)=1,\ \alpha_k'(x_k)=0 \Rightarrow \begin{cases} ax+b=1 \\ \frac{ax_k+b}{x_k-x_{k+1}}+a=0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a=-\frac{2}{x_k-x_{k+1}} \\ b=1+\frac{2x_k}{x_k-x_{k+1}} \end{cases}$

$\therefore \alpha_k(x)=\left(1+2\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)\left(\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)^2$，同理：$\alpha_{k+1}(x)=\left(1+2\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2$

对于 $\beta_k(x)$：x_k为一重根，x_{k+1}为二重根 $\Rightarrow \beta_k(x)=A\cdot(x-x_k)(x-x_{k+1})^2$

代入 $\beta_k'(x_k)=1 \Rightarrow A=\frac{1}{(x_k-x_{k+1})^2}$ $\quad\therefore \beta_k(x)=(x-x_k)\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2$

$\alpha_k(x),\alpha_{k+1}(x),\beta_k(x),\beta_{k+1}(x)$ 代入即得 $H(x)$

③ Hermit余项：

1. $R(x)=f(x)-P(x)=K(x)\cdot(x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2)$

记 $\varphi(t)=f(t)-P(t)-K(x)(t-x_0)(t-x_1)^2(t-x_2)$ 有根 x, x_0, x_1(2重), x_2;

$\therefore \varphi^{(4)}(\xi)=0=f^{(4)}(\xi)-K(x)\cdot 4! \Rightarrow K(x)=\frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi)$

2. 同理 $R(x)=\frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi)(x-x_k)^2(x-x_{k+1})^2$

5. 分段低次插值：当插值多项式次数过高，误差反而会变大 —— 龙格现象

使用折线段逼近：$a=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_n=b,\ f_i=f(x_i)$，$h_k=x_{k+1}-x_k,\ h=\max_k h_k$

$I_h(x)$满足：$I_h(x)\in C[a,b]$，$I_h(x_k)=f_k$，$I_h(x)$在$[x_k,x_{k+1}]$为线性函数

∴当 $x_k\le x\le x_{k+1}$ 时：$I_h(x)=\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}f_{k+1}+\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}f_k$

$\therefore \max_{x_k\le x\le x_{k+1}}|f(x)-I_h(x)|\le \frac{M_2}{2!}\max_{x_k\le x\le x_{k+1}}|(x-x_k)(x-x_{k+1})|=\frac{M_2}{2}\cdot\frac{(x_{k+1}-x_k)^2}{4}=\frac{M_2 h_k^2}{8}$

$\therefore |R(x)|\le\frac{M_2h^2}{8} \Rightarrow \therefore 0\le|f(x)-I_h(x)|\le\frac{M_2h^2}{8}\to 0\ (h\to 0) \Rightarrow \lim_{h\to 0}I_h(x)=f(x)$

改进光滑性：分段三次Hermit插值(略)

函数逼近：用$[a,b]$上简单的函数$p(x)$近似复杂的函数$f(x)$. $\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n$ 线性无关

对 $f(x)\in C[a,b]$，求 $\varphi^*(x)\in\Phi=\mathrm{span}\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\}$, s.t. $f(x)-\varphi^*(x)$在某种度量下最小.

1. 度量标准：范数&内积

def. S为线性空间，$x\in S$，若存在唯一实数 $\|\cdot\|$, s.t.

① $\|x\|\ge 0$ 且，$\|x\|=0$ iff. $x=0$ ② $\|\alpha x\|=|\alpha|\cdot\|x\|$，$\alpha\in R$ ③ $\|x+y\|\le\|x\|+\|y\|$，$x,y\in S$，

则称 $\|\cdot\|$ 为线性空间S上的范数.

eg. 在 $C[a,b]$ 上的 $f(x)$，有3种常用范数：

$$\|f\|_\infty=\max_{a\le x\le b}|f(x)|,\quad \|f\|_1=\int_a^b|f(x)|dx,\quad \|f\|_2=\left(\int_a^b f^2(x)dx\right)^{\frac{1}{2}}$$

def. 设X是数域K上的线性空间，$\forall u,v\in X$，有K中一个数与之对应，记为(u,v)，若满足：

① $(u,v)=\overline{(v,u)}$ ② $(\alpha u,v)=\alpha(u,v)$ ③ $\forall w$ $(u+v,w)=(u,w)+(v,w)$ ④ $(u,u)\ge 0$，$(u,u)=0$ iff $u=0$

则称(u,v)为X上u和v的内积，$(u,v)=0$ 则u,v正交

Th2：X是一个内积空间，$\forall u,v\in X$，有 $|(u,v)|^2\le (u,u)\cdot(v,v)$ （柯西-施瓦茨不等式）

pf. $v=0$时，左$=0\le 0=$右，成立.

$v\ne 0$时，$\forall\lambda$，$0\le(u+\lambda v,u+\lambda v)=(u,u)+2\lambda(u,v)+\lambda^2(v,v)$.

$\therefore \lambda=-\frac{(u,v)}{(v,v)}$ 代入 $\Rightarrow 0\le (u,u)-\frac{2|(u,v)|^2}{(v,v)}+\frac{|(u,v)|^2}{(v,v)}\Rightarrow |(u,v)|^2\le(u,u)(v,v)$

Th3. X是一个内积空间，$u_1,u_2,\cdots,u_n\in X$，矩阵 $G=\begin{pmatrix}(u_1,u_1)&(u_2,u_1)&\cdots&(u_n,u_1)\\(u_1,u_2)&(u_2,u_2)&\cdots&(u_n,u_2)\\ \vdots&\vdots&&\vdots\\(u_1,u_n)&(u_2,u_n)&\cdots&(u_n,u_n)\end{pmatrix}$ 为Gram矩阵.

则 G可逆 $\Leftrightarrow u_1,u_2,\cdots,u_n$ 线性无关.

pf. G可逆 $\Leftrightarrow |G|\ne 0\Leftrightarrow$ 关于$\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n$的方程组

$$\begin{cases}(u_1,u_1)\alpha_1+(u_2,u_1)\alpha_2+\cdots+(u_n,u_1)\alpha_n=0\\(u_1,u_2)\alpha_1+(u_2,u_2)\alpha_2+\cdots+(u_n,u_2)\alpha_n=0\\ \vdots\\(u_1,u_n)\alpha_1+(u_2,u_n)\alpha_2+\cdots+(u_n,u_n)\alpha_n=0\end{cases}$$ 仅有零解

$\Leftrightarrow (u_j,\sum_{k=1}^n\alpha_k u_k)=0$，$j=1,2,\cdots,n$ 　事实上 $(u,v)=0$ 可推出 $(u,0)=0$

$\Leftrightarrow (\sum_{k=1}^n\alpha_k u_k,\sum_{k=1}^n\alpha_k u_k)=0$

$\Leftrightarrow \sum_{k=1}^n\alpha_k u_k=0$ 且中$\alpha_k=0$，得证.

$\Rightarrow$ 可由内积定义范数，$u\in X$，记 $\|u\|=\sqrt{(u,u)}$，则

① $\|u\|=\sqrt{(u,u)}\ge 0$，且$\|u\|=0\Leftrightarrow(u,u)=0\Leftrightarrow u=0$

② $\|\alpha u\|=\sqrt{(\alpha u,\alpha u)}=\sqrt{\alpha^2(u,u)}=|\alpha|\cdot\|u\|$

③ $\|u+v\|^2=\left(\sqrt{(u+v,u+v)}\right)^2=(u+v,u+v)=(u,u)+2(u,v)+(v,v)\le(u,u)+2\sqrt{(u,u)(v,v)}+(v,v)=\left(\sqrt{(u,u)}+\sqrt{(v,v)}\right)^2=(\|u\|+\|v\|)^2$

$\Rightarrow \|u+v\|\le\|u\|+\|v\|$ 　　$\Rightarrow \therefore\|u\|$满足范数.

def. 权函数$\rho(x)$意义下的内积：$(f,g)=\int_a^b\rho(x)f(x)g(x)dx$，

① $(f,f)=\int_a^b\rho(x)f^2(x)dx\ge 0$，$(f,f)=0\Leftrightarrow f^2(x)=0\Leftrightarrow f(x)=0$

② $(u+v,w)=\int_a^b\rho(x)(u(x)+v(x))w(x)dx=\int_a^b\rho(x)u(x)w(x)dx+\int_a^b\rho(x)v(x)w(x)dx=(u,w)+(v,w)$

③ $(\alpha f,g)=\int_a^b\rho(x)\,\alpha f(x)g(x)dx=\alpha\cdot\int_a^b\rho(x)f(x)g(x)dx=\alpha(f,g)$

④ $(f,g)=\int_a^b\rho(x)f(x)g(x)dx=(g,f)$.

$\therefore$ 导出范数 $\|f\|_2=\sqrt{(f,f)}=\left(\int_a^b\rho(x)f^2(x)dx\right)^{\frac{1}{2}}$

def. 最优一致逼近多项式：$\|f(x)-p^*(x)\|_\infty=\min_{p\in H_n}\|f(x)-p(x)\|_\infty=\min_{p\in H_n}\max_{a\le x\le b}|f(x)-p(x)|$

最佳平方逼近多项式：$\left(\|f(x)-p^*(x)\|_2\right)^2=\min_{p\in H_n}\left(\|f(x)-p(x)\|_2\right)^2=\min_{p\in H_n}\int_a^b\rho(x)(f(x)-p(x))^2dx$

最小二乘拟合：f在$a\le x_0<x_1<\cdots<x_m\le b$上有函数值，$\|f-p^*\|^2=\min_{p\in H_n}(\|f-p\|_2)^2=\min_{p\in H_n}\sum_{i=0}^m(f(x_i)-p(x_i))^2$

2. 正交多项式：$f(x)$与$g(x)$带权$\rho(x)$在$[a,b]$上正交 $\Leftrightarrow (f(x),g(x))=\int_a^b\rho(x)f(x)g(x)dx=0$

正交函数族：$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$满足：$(\varphi_j,\varphi_k)=\int_a^b\rho(x)\varphi_j(x)\varphi_k(x)dx=\begin{cases}0, & j\ne k\\A_k>0, & j=k\end{cases}$

$A_k\equiv 1$ $\Rightarrow$ 标准正交函数族

正交多项式序列：给定权函数 $\rho(x)$，由 $\{1, x, x^2, \cdots, x^n\}$ 逐个正交化.

$P_0(x)=1$, $P_1(x)=x+a_1 \Rightarrow P_1(x)=x+P_0(x)\cdot a_1 \Rightarrow \overset{0=}{(P_1,P_0)}=(x,P_0)+a_1(P_0,P_0) \Rightarrow a_1=-\dfrac{(x,P_0)}{(P_0,P_0)}$

$P_2(x)=x^2+H_1(x) \Rightarrow P_2(x)-x^2=a_0P_0(x)+a_1\cdot P_1(x) \Rightarrow \begin{cases} 0=(P_2,P_0)=(x^2,P_0)+a_0(P_0,P_0)+a_1\cancel{(P_1,P_0)} \\ 0=(P_2,P_1)=(x^2,P_1)+a_0\cancel{(P_0,P_1)}+a_1(P_1,P_1) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_1=-\dfrac{(x^2,P_1)}{(P_1,P_1)} \\ a_0=-\dfrac{(x^2,P_0)}{(P_0,P_0)} \end{cases}$

$\therefore P_n(x)=x^n-\sum\limits_{j=0}^{n-1}\dfrac{(x^n,P_j(x))}{(P_j(x),P_j(x))}P_j(x)$

$\Rightarrow P_n(x)$ 满足：① 首项系数为1；② $\forall Q_n(x)\in H_n$，$Q_n(x)$ 可表示为 $P_0(x), P_1(x), \cdots, P_n(x)$ 的线性组合；

③ $(P_n(x), Q(x))=0$，$Q(x)\in H_{n-1}$

④ 递推性 $P_{n+1}(x)=(x-\alpha_n)P_n(x)-\beta_n P_{n-1}(x)$

$x\cdot P_n-P_{n+1}$ 至多为n次多项式，不妨 $x\cdot P_n-P_{n+1}=\alpha_nP_n+\alpha_{n-1}P_{n-1}+\cdots+\alpha_0P_0$,

$\therefore \forall j=0,1,2,\cdots,n-2$ 时 $(xP_n-P_{n+1},P_j)=\left(\sum\limits_{0}^{n}\alpha_kP_k,P_j\right)=\alpha_k\cdot(P_j,P_j)$

$\quad\quad \| $

$(xP_n,P_j)-(P_{n+1},P_j)=(xP_n,P_j)=\int_a^b\rho(x)\cdot x\cdot P_n(x)P_j(x)dx=(P_n,\overset{\text{至多}n-1\text{次}}{xP_j})=0 \Rightarrow \alpha_0=\alpha_1=\cdots=\alpha_{n-2}=0$

$j=n-1$ 时 $(xP_n-P_{n+1},P_{n-1})=\left(\sum\limits_{0}^{n}\alpha_kP_k,P_{n-1}\right)=\alpha_{n-1}(P_{n-1},P_{n-1})$

$\quad\quad \| $

$(xP_n,P_{n-1})-(P_{n+1},P_{n-1})=(P_n,xP_{n-1})=(P_n,P_n) \Rightarrow \therefore \underset{\beta_n}{\alpha_{n-1}}=\dfrac{(P_n,P_n)}{(P_{n-1},P_{n-1})}$

$\because (P_n,\underbrace{P_n-xP_{n-1}}_{\text{至多}n-1\text{次}})=0$

$j=n$ 时，$(xP_n-P_{n+1},P_n)=\left(\sum\limits_{0}^{n}\alpha_kP_k,P_n\right)=\alpha_n(P_n,P_n) \Rightarrow \therefore \alpha_n=\dfrac{(xP_n,P_n)}{(P_n,P_n)}$

$\quad\quad \| $

$(xP_n,P_n)-(P_{n+1},P_n)=(xP_n,P_n)$

⑤ $\{P_n(x)\}$ 为 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式序列，则 $P_n(x)$ 在 (a,b) 内有n个不同零点.

pf. 假设 $P_n(x)=0$ 的根都是偶重的，则 $P_n(x)$ 在 $[a,b]$ 上不变号，不妨 $P_n(x)>0$,

$\therefore 0=(P_n,P_0)=\int_a^b\rho(x)\cdot P_n(x)\cdot P_0(x)dx=\int_a^b\rho(x)P_n(x)dx>0$，矛盾.

$\therefore P_n(x)$ 必有奇重根，不妨所有奇重根为 $a<x_1\leq x_2\leq\cdots\leq x_m<b$，$\Rightarrow$ 令 $q(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_m)$

$\therefore (q(x),P_n(x))=\int_a^b\rho(x)\underbrace{q(x)P_n(x)}_{\text{偶重根}}dx\neq0$

$=\begin{cases} 0 & m<n \\ \neq0 & m\geq n \end{cases} \Rightarrow \therefore q(x)$ 的次数 $\geq n \Rightarrow q(x)$ 次数 $=n$

$\Rightarrow \therefore$ 即证.

$\Rightarrow$ 当 $[a,b]=[-1,1]$，$\rho(x)\equiv1$ 时，由 $\{1,x,x^2,\cdots,x^n\}$ 正交化得到的多项式：$P_n(x)=\dfrac{1}{2^n\cdot n!}\dfrac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]$，称为勒让德多项式.

$\therefore$ 其首项系数 $a_n=\dfrac{1}{2^n\cdot n!}\cdot(2n)(2n-1)\cdots(n+1)=\dfrac{1}{2^n\cdot n!}\cdot\dfrac{(2n)!}{n!}=\dfrac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$

$\therefore$ 首项系数为1的Legendre多项式为 $\widetilde{P_n}(x)=\dfrac{1}{2^n\cdot n!}\cdot\dfrac{2^n(n!)^2}{(2n)!}\dfrac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]=\dfrac{n!}{(2n)!}\dfrac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]$

性质：① $(P_m(x),P_n(x))=\int_{-1}^{1}P_m(x)P_n(x)dx=\dfrac{1}{2^{m+n}\cdot m!\cdot n!}\cdot\int_{-1}^{1}\dfrac{d^m}{dx^m}[(x^2-1)^m]\cdot\dfrac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]dx \overset{m\leq n}{=\!=} A\cdot\int_{-1}^{1}\dfrac{d^m}{dx^m}(\ )d\left(\dfrac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(\ )\right)$

$=\underbrace{A\cdot\dfrac{d^m}{dx^m}(\ )\dfrac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(\ )\Big|_{-1}^{1}}_{=0}-A\cdot\int_{-1}^{1}\dfrac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}(\ )\cdot\dfrac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(\ )dx=\cdots=(-1)^m\cdot A\cdot\int_{-1}^{1}\dfrac{d^{2m}}{dx^{2m}}(x^2-1)^{m}\cdot\dfrac{d^{n-m}}{dx^{n-m}}(x^2-1)^ndx$

$=\begin{cases} (-1)^m\cdot A\cdot B\int_{-1}^{1}\dfrac{d^{n-m}}{dx^{n-m}}(x^2-1)^ndx=(-1)^mA\cdot B\,\dfrac{d^{n-m-1}}{dx^{n-m-1}}(x^2-1)^n\Big|_{-1}^{1}=0, & m\neq n \\ (-1)^n\cdot\dfrac{1}{2^{2n}(n!)^2}\cdot(2n)!\cdot\int_{-1}^{1}(x^2-1)^ndx \overset{x=\sin t}{=\!=\!=} \dfrac{(2n)!}{(2^nn!)^2}\cdot\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos^{2n+1}t\,dt=\dfrac{(2n)!}{(2^nn!)^2}\cdot\dfrac{2\cdot2n\cdot(2n-2)\cdots2}{(2n+1)(2n-1)\cdots3\cdot1}=\dfrac{2}{2n+1} \end{cases}$

$\therefore (P_m,P_n)=\begin{cases}0, & m\neq n\\ \frac{2}{2n+1}, & m=n\end{cases}$

② $P_n(-x)=(-1)^n P_n(x)$，$\because$ 令 $\varphi_n(x)=(x^2-1)^n$ 为偶函数，$\therefore$ 求导偶数次仍为偶函数，奇数次为奇函数

③ $P_n(x)$ 在 $(-1,1)$ 内有 n 个互异零点

④ 递推 $P_{n+1}=\frac{2n+1}{n+1}x\cdot P_n-\frac{n}{n+1}P_{n-1}$，$P_0=1$，$P_1=x$

令 $x\cdot P_n=\alpha_0 P_0+\alpha_1 P_1+\cdots+\alpha_n P_n+\alpha_{n+1}P_{n+1}$ $\Rightarrow$ ~~$xP_n-P_{n+1}=\alpha_0P_0+\alpha_1P_1+\cdots+\alpha_nP_n+\alpha_{n+1}$~~

对 $j=0,1,2,\cdots,n-2$，$(xP_n-\alpha_{n+1}P_{n+1},P_j)=(\sum_0^{n+1}\alpha_k P_k,P_j)=\alpha_j(P_j,P_j)$ $\Rightarrow \alpha_0=\alpha_1=\cdots=\alpha_{n-2}=0$

$(xP_n,P_j)=(xP_j,P_n)=0$

$j=n$ 时，$(xP_n-\alpha_{n+1}P_{n+1},P_n)=(\sum_0^{n+1}\alpha_k P_k,P_n)=\alpha_n(P_n,P_n)$ $\Rightarrow \alpha_n=0$

$(xP_n,P_n)=\int_{-1}^{1}x\cdot P_n^2\,dx=0$

$\frac{2n^2}{2n(2n-1)}=\frac{n}{2n-1}$

$j=n-1$ 时，$(xP_n-\alpha_{n+1}P_{n+1},P_{n-1})=(\sum_0^{n+1}\alpha_k P_k,P_{n-1})=\alpha_{n-1}(P_{n-1},P_{n-1})$

$(xP_n,P_{n-1})=(P_n,xP_{n-1})=a_na_{n-1}(\tilde P_n,x\tilde P_{n-1})=a_na_{n-1}(\tilde P_n,\tilde P_n)=\frac{a_{n-1}}{a_n}(P_n,P_n)=\underline{\frac{(2n-2)!}{2^{n-1}\cdot(n-1)!^2}\cdot\frac{2^n\cdot n!^2}{(2n)!}}(P_n,P_n)$

$\Rightarrow \alpha_{n-1}=\frac{n}{2n-1}\cdot\frac{2}{2n+1}\cdot\frac{2n-1}{2}=\frac{n}{2n+1}$

同理 $\alpha_{n+1}=\frac{n+1}{2n+1}$ $\Rightarrow \therefore xP_n=\frac{n+1}{2n+1}P_{n+1}+\frac{n}{2n+1}P_{n-1}\Rightarrow P_{n+1}=\frac{2n+1}{n+1}xP_n-\frac{n}{n+1}P_{n-1}$

$\Rightarrow$ 当 $[a,b]=[-1,1]$，$\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，$\{1,x,x^2,\cdots,x^n\}$ 正交化所得 n 次切比雪夫多项式

$T_n(x)=\cos(n\arccos x)$，若令 $x=\cos\theta$，则 $T_n(x)=\cos n\theta$

$T_0(x)=\cos 0=1$，$T_1(x)=\cos(\arccos x)=x$，$T_2(x)=\cos(2\arccos x)=2x^2-1$，

性质：① 递推：$\because T_n(x)=\cos(n\arccos x)=\cos(n\theta)$

$\therefore \left.\begin{aligned}\cos(n+1)\theta&=\cos n\theta\cos\theta-\sin n\theta\cdot\sin\theta\\ \cos(n-1)\theta&=\cos n\theta\cos\theta+\sin n\theta\cdot\sin\theta\end{aligned}\right\}\Rightarrow$ $\therefore \cos(n+1)\theta=2\cos n\theta\cos\theta-\cos(n-1)\theta$ $\Rightarrow T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x)$

$\therefore$ 从中易得 $T_n(x)$ 的最高项系数为 $a_n=2^{n-1}$，$n=1,2,\cdots$

② 正交：$\int_{-1}^{1}\rho(x)T_n(x)\cdot T_m(x)\,dx=\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\cos(n\arccos x)\cdot\cos(m\arccos x)\,dx$

$\xlongequal{x=\cos\theta}\int_\pi^0\frac{1}{\sin\theta}\cos n\theta\cdot\cos m\theta(-\sin\theta)\,d\theta=\int_0^\pi\cos m\theta\cos n\theta\,d\theta=\int_0^\pi\frac12(\cos(m+n)\theta+\cos(m-n)\theta)\,d\theta$

$=\begin{cases}0 & m\neq n\\ \frac{\pi}{2} & m=n\neq 0\\ \pi & m=n=0\end{cases}$

从递推式可看出

③ 奇偶性：$T_{2k}(x)$ 中只含有 x 的偶次幂，从而为偶函数；$T_{2k+1}(x)$ ---奇--，---奇--

④ $T_n(x)$ 在 $[-1,1]$ 上有 n 个零点：$\because T_n=\cos(n\theta)=0$，$n\theta\in[0,n\pi]$ $\Rightarrow \therefore n\theta=k\pi-\frac{\pi}{2}$，$k=1,2,\cdots,n$

$\therefore$ ~~$\cos nx=0$~~ $x=\cos\theta=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi$，$k=1,2,\cdots,n$

*⑤ 记 $\tilde T_n(x)=\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$，$\tilde H_n$ 为所有首项系数为1的不超过n次的多项式集合.

则 $\max\limits_{-1\le x\le1}|\tilde T_n(x)|\le\max\limits_{-1\le x\le1}|P(x)|$ $\forall P(x)\in\tilde H_n(x)$ $\Rightarrow \|\tilde T_n\|_\infty=\min\limits_{\tilde H_n}\|P_n\|_\infty$

$\Rightarrow \max\limits_{-1\le x\le1}|\tilde T_n(x)|=\min\limits_{P\in\tilde H_n}\max\limits_{-1\le x\le1}|P(x)|=\frac{1}{2^{n-1}}$

使用切比雪夫多项式进行插值：切比雪夫点：零点 $x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi,\ k=1,2,\cdots,n$

最大 极值点 $x_k=\cos\frac{k\pi}{n},\ k=0,1,2,\cdots,n$

使用 - - - - - - - - 可使误差最小化：以 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 进行插值

$$R_n(x)=f(x)-L_n(x)=\left|\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\cdot W_{n+1}(x)\right|\le\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\cdot\max|W_{n+1}(x)|$$

$$\text{而}\max|W_{n+1}(x)|=\max|(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)|\underset{\uparrow}{=}\max|\tilde{T}_{n+1}(x)|=\frac{1}{2^n}$$

最小时 $x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi$

$\Downarrow$

最小时 $R_n(x)\le\underline{\frac{1}{2^n(n+1)!}}M_{n+1}$ 的估计

3. 最佳平方逼近

上面看到，切比雪夫多项式可以作最佳一致逼近，

而使用勒让德多项式则可以作最佳平方逼近

若：n次多项式 $S^*(x)=\sum_{j=0}^{n}a_j^*x^j\in H_n(x)$ 满足：$\int_a^b(f(x)-S^*(x))^2dx=\min_{S\in H_n}\int_a^b(f(x)-S(x))^2dx$，

则 $S^*(x)$ 为 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的 n 次最佳平方逼近多项式，

若将 H_n 改至 $\Phi=\text{span}\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\}$，则 S^* 为 f 在 Φ 上的最佳平方逼近函数。

对 $S^*(x)=\sum_{j=0}^{n}a_j^*\varphi_j$ 要求 a_j^*, s.t. $I(a_0,a_1,\cdots,a_n)=\int_a^b\rho(x)\cdot(f(x)-\sum_{j=0}^{n}a_j^*\varphi_j)^2dx$

$\therefore\frac{\partial I}{\partial a_k}=\int_a^b\rho(x)\cdot(f(x)-\sum_{j=0}^{n}a_j^*\varphi_j)\cdot2\cdot(-\varphi_j)dx=0\Rightarrow\int_a^b\rho(x)\cdot f(x)\cdot\varphi_j(x)dx=\sum_{k=0}^{n}\int_a^b a_j^*\rho(x)\cdot\varphi_j(x)\cdot\varphi_k(x)dx$

$\Rightarrow(f(x),\varphi_j(x))=\sum_{k=0}^{n}a_j^*\cdot(\varphi_j(x),\varphi_k(x))$

$$\Rightarrow\begin{pmatrix}(\varphi_0,\varphi_0)&(\varphi_0,\varphi_1)&\cdots&(\varphi_0,\varphi_n)\\(\varphi_1,\varphi_0)&(\varphi_1,\varphi_1)&\cdots&(\varphi_1,\varphi_n)\\\vdots&&&\\(\varphi_n,\varphi_0)&(\varphi_n,\varphi_1)&\cdots&(\varphi_n,\varphi_n)\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}a_0\\a_1\\\vdots\\a_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(f,\varphi_0)\\(f,\varphi_1)\\\vdots\\(f,\varphi_n)\end{pmatrix}$$ 的解即为 $(a_0^*,a_1^*,\cdots,a_n^*)'$

注意到系数矩阵为Gram矩阵，又$\because\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n$ 是 $1,x,x^2,\cdots,x^n$ 时是线性无关的，故Gram矩阵可逆

$\Rightarrow\therefore$ 方程必有唯一解 $(a_0^*,a_1^*,\cdots,a_n^*)'\Rightarrow\therefore S_n^*(x)=\sum_{j=0}^{n}a_j^*\varphi_n(x)$

而 $\forall S(x)\in\Phi$, $\int_a^b\rho(x)(f(x)-S(x))^2dx=\int_a^b\rho(x)(f(x)-S^*(x)+S^*(x)-S(x))^2dx=\int_a^b\rho(x)(f(x)-S^*(x))^2dx+2\int_a^b\rho(x)(f(x)-S^*(x))(S^*(x)-S(x))dx+\int_a^b\rho(x)(S^*(x)-S(x))^2dx$

其中 $2\cdot\int_a^b\rho(x)(f(x)-S^*(x))\cdot(S^*(x)-S(x))dx=2(f-S^*,S-S^*)=2(f-S^*,\sum_{j=0}^{n}b_j\varphi_j)=2\sum_{j=0}^{n}b_j(f-S^*,\varphi_j)$

$=2\sum_{j=0}^{n}b_j\cdot\int_a^b\rho(x)(f(x)-S^*(x))\cdot\varphi_j(x)dx=0$

$\therefore\int_a^b\rho(x)(f(x)-S(x))^2dx\ge\int_a^b\rho(x)\cdot(f(x)-S^*(x))^2dx$

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

若取 $\varphi_k(x)=x^k$, $\rho(x)=1$, 则：$(\varphi_j,\varphi_k)=\int_0^1x^{j+k}dx=\frac{1}{1+j+k}$，

$\therefore$ Gram矩阵为 $\begin{pmatrix}1&\frac{1}{2}&\cdots&\frac{1}{n+1}\\\frac{1}{2}&\frac{1}{3}&\cdots&\frac{1}{n+2}\\\vdots&\vdots&&\vdots\\\frac{1}{n+1}&\frac{1}{n+2}&\cdots&\frac{1}{2n+1}\end{pmatrix}$，称之为Hilbert矩阵，可解出相应的 a^*

但是注意到，当 $n\to+\infty$ 时，Hilbert矩阵是病态的，所以想到利用正交多项式

$\Rightarrow\text{diag}((\varphi_0,\varphi_0),(\varphi_1,\varphi_1),\cdots,(\varphi_n,\varphi_n))\cdot(a_0^*,a_1^*,\cdots,a_n^*)'=((f,\varphi_0),(f,\varphi_1),\cdots,(f,\varphi_n))'$

$\Rightarrow a_i^*=\frac{(f,\varphi_i)}{(\varphi_i,\varphi_i)}\Rightarrow S_n^*(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}\cdot\varphi_k(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,\varphi_k)}{\|\varphi_k\|_2^2}\varphi_k(x)$

$\therefore \|\delta_n(x)\|_2^2=(f-S_n^*,f-S_n^*)=(f-S_n^*,f)=(f,f)-(S_n^*,f)=\|f\|_2^2-\left(\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,\varphi_k)}{\|\varphi_k\|_2^2}\varphi_k,f\right)=\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,\varphi_k)^2}{\|\varphi_k\|_2^2}\geqslant 0$

$\Rightarrow \therefore$ Bessel不等式：$\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,\varphi_k)^2}{\|\varphi_k\|_2^2}\leq\|f\|_2^2$

特别地，使用勒让德正交多项式时，$a_k^*=\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}=\frac{2k+1}{2}\int_{-1}^{1}1\cdot f(x)\cdot\varphi_k(x)dx=\frac{2k+1}{2}\int_{-1}^{1}f(x)\varphi_k(x)dx$

$\|\delta_k(x)\|_2^2=\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,\varphi_k)^2}{\|\varphi_k\|_2^2}=\int_{-1}^{1}f^2(x)dx-\sum_{k=0}^{n}\frac{2}{2k+1}a_k^{*2}$

Th：① $\lim_{n\to+\infty}\|f(x)-S_n^*(x)\|_2=0$，② f光滑性较好时，$S_n^*(x)\rightrightarrows f(x)$

③ 在首项系数为1的n次多项式中，勒让德多项式 $\tilde{P}_n(x)$ 在$[-1,1]$上与零的平方误差最小。

pf. $\forall Q(x)\in\tilde{H}_n(x)$，则 $Q_n(x)-\tilde{P}_n(x)\in H_{n-1}\Rightarrow Q_n(x)=\tilde{P}_n(x)+\sum_{k=0}^{n-1}a_k\tilde{P}_k(x)$

$\therefore \|Q(x)\|_2^2=(Q(x),Q(x))=\left(\tilde{P}_n(x)+\sum_{k=0}^{n-1}a_k\tilde{P}_k(x),\tilde{P}_n(x)+\sum_{k=0}^{n-1}a_k\tilde{P}_k(x)\right)$

$=(\tilde{P}_n(x),\tilde{P}_n(x))+2\sum_{k=0}^{n-1}a_k\cdot(\tilde{P}_n(x),\tilde{P}_k(x))+\left(\sum_{k=0}^{n-1}a_k\tilde{P}_k(x),\sum_{k=0}^{n-1}a_k\tilde{P}_k(x)\right)$

$=(\tilde{P}_n(x),\tilde{P}_n(x))+\sum_{k=0}^{n-1}a_k^2(\tilde{P}_k(x),\tilde{P}_k(x))\geqslant(\tilde{P}_n(x),\tilde{P}_n(x))$，等号成立 $\Leftrightarrow a_0=a_1=\cdots=a_n=0$

$\therefore$ 求最佳平方逼近 $\Leftrightarrow$ 先求出 $\tilde{P}_k(x)$，再求出 $(f,\tilde{P}_k)$ 代入即可.

4. 曲线的最小二乘拟合：已有 (x_i,y_i)，$i=0,1,2,\cdots,m\gg n$

给定 $\Phi=\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\}$，寻找 $S^*(x)=\sum_{j=0}^{n}a_j^*\varphi_j$，s.t $S^*(x)$满足：$\|\delta\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}\delta_i^2=\sum_{i=0}^{m}[S^*(x_i)-f(x_i)]^2=\min_{S\in\Phi}\sum_{i=0}^{m}(S-f)^2$

若加入权重：$\|\delta\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\cdot(S^*(x)-f(x))^2=\min_{S\in\Phi}\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\cdot(S(x)-f(x))^2$

$\therefore I(a_0,a_1,\cdots,a_n)=\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\left(\sum_{k=0}^{n}a_k\varphi_k(x)-f(x)\right)^2$

$\therefore \frac{\partial I}{\partial a_i}=\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\cdot 2\left(\sum_{k=0}^{n}a_k\varphi_k(x)-f(x)\right)\cdot\varphi_k(x)=0\Rightarrow\sum_{i=0}^{m}W(x_i)f(x)\cdot\varphi_k(x)=\sum_{k=0}^{n}a_k\cdot\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\cdot\varphi_i(x)\cdot\varphi_k(x)$

$\Rightarrow$ 可定义 $(\varphi_k,\varphi_j)=\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\cdot\varphi_k(x_i)\cdot\varphi_j(x_i)$，$\therefore(a_0^*,a_1^*,\cdots,a_n^*)'$ 是以下方程的解：

$$\begin{pmatrix}(\varphi_0,\varphi_0)&(\varphi_0,\varphi_1)&\cdots&(\varphi_0,\varphi_n)\\(\varphi_1,\varphi_0)&(\varphi_1,\varphi_1)&\cdots&(\varphi_1,\varphi_n)\\\vdots&\vdots&&\vdots\\(\varphi_n,\varphi_0)&(\varphi_n,\varphi_1)&\cdots&(\varphi_n,\varphi_n)\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}a_0\\a_1\\\vdots\\a_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(f,\varphi_0)\\(f,\varphi_1)\\\vdots\\(f,\varphi_n)\end{pmatrix}$$

但是系数矩阵不一定可逆，$\because(\,,\,)$是内积，是一种记号

$(\varphi_j,\varphi_j)=0\Leftrightarrow\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\varphi_j^2(x_i)=0\Leftrightarrow\varphi_j(x_i)=0$，$i=0,1,\cdots,m$

$\nRightarrow \varphi_j(x)=0$

定义：Haar条件，$\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\in C[a,b]$的任意线性组合在$\{x_i,i=0,1,\cdots,m\}$上至多只有n个不同的零点.

$\Rightarrow 1,x,x^2,\cdots,x^n$满足Haar条件

如果$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$满足Haar条件，则矩阵可逆，且可证明：$S^*(x)$是最小二乘解

$\forall S\in\Phi,\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\cdot(S(x_i)-f(x_i))^2=\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\cdot\left(S(x_i)-S^*(x_i)+S^*(x_i)-f(x_i)\right)^2$

$\geqslant\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\cdot(S^*(x)-f(x_i))^2+2\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\cdot(S(x_i)-S^*(x_i))\cdot(S^*(x_i)-f(x_i))$

$\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\cdot(S(x_i)-S^*(x_i))\cdot(S^*(x_i)-f(x_i))=\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\cdot\sum_{j=0}^{n}b_j\varphi_j(x)\cdot(S^*(x_i)-f(x_i))=0$. #

使用正交多项式时，$(\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}W(x_i)\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)=0$. $j\neq k$，$a_k^*=\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}$

而多项式为 $P_0(x)=1$，$P_1(x)=(x-\alpha_1)P_0(x)$，$P_{k+1}(x)=(x-\alpha_{k+1})P_k(x)-\beta_kP_{k-1}(x)$，

$\alpha_{k+1}=\frac{(xP_k,P_k)}{(P_k,P_k)}$，$\beta_k=\frac{(P_k,P_k)}{(P_{k-1},P_{k-1})}$

$\therefore$ 步骤：计算$P_k(x)\Rightarrow$计算$a_k^*\Rightarrow$计算$S_n^*(x)$.

数值积分&微分

数值积分：求 $I=\int_a^b f(x)dx$，有原函数或原函数易求，$I=F(b)-F(a)$，

否则可以用一些机械求积公式：$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$，包括梯形公式：$\int_a^b f(x)dx=[f(a)+f(b)]\frac{b-a}{2}$

中矩形公式：$\int_a^b f(x)dx = f\left(\frac{a+b}{2}\right)\cdot(b-a)$

代数精度：若一个求积公式对于所有不超过m次的多项式都成立，

而对于某一个m+1次多项式不成立，则称其具有m次代数精度。

事实上，对所有不超过m次多项式都成立 $\Leftrightarrow$ 对 $1, x, x^2, \cdots, x^m$ 都成立

对某一个m+1次多项式不成立 $\Leftrightarrow$ 对 x^{m+1} 不成立

例：$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{f(a)+f(b)}{2}\cdot(b-a)$ 有一次代数精度。

$f(x)=1$ 时，$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b 1dx = b-a = \frac{1+1}{2}(b-a) = \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a)$

$f(x)=x$ 时，$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b xdx = \frac{b^2-a^2}{2} = \frac{a+b}{2}(b-a) = \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a)$

$f(x)=x^2$ 时，$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b x^2dx = \frac{b^3-a^3}{3} \neq \frac{a^2+b^2}{2}(b-a) = \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a)$

这些求积公式往往有以下2种情况：

①先选定求积节点 x_k，取代数精度 m=节点个数 $n-1$。

例 $m=1$，$x_0=a$，$x_1=b$，$I=\int_a^b f(x)dx = A_0f(a)+A_1f(b)$。

$$\Rightarrow \begin{cases} A_0+A_1=b-a \\ aA_0+bA_1=\frac{b^2-a^2}{2} \end{cases} \Rightarrow A_0=A_1=\frac{b-a}{2} \Rightarrow I=\int_a^b f(x)dx=(f(a)+f(b))\frac{b-a}{2}$$

② x_k 与 A_k 都不确定，这样需要解非线性方程组，较为困难。

例 $m=1$，$I=\int_a^b f(x)dx = A_0\cdot f(x_0)$

$$\Rightarrow \begin{cases} A_0\cdot 1=b-a \\ A_0\cdot x_0=\frac{b^2-a^2}{2} \end{cases} \Rightarrow A_0=b-a,\ x_0=\frac{a+b}{2} \Rightarrow I=\int_a^b f(x)dx=f\left(\frac{a+b}{2}\right)\cdot(b-a)$$

1. 插值型求积公式：

在n+1个节点：$a\le x_0<x_1<\cdots<x_n\le b$ 上已知函数值 $f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_n)$

$\therefore L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} l_k(x)\cdot f(x_k) \Rightarrow \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b L_n(x)dx=\int_a^b \sum_{k=0}^{n} l_k(x)f(x_k)dx=\sum_{k=0}^{n}\left[\int_a^b l_k(x)dx\right]f(x_k) \triangleq \sum_{k=0}^{n} A_kf(x_k)$

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

$\therefore$ 余项 $R[f]=\int_a^b f(x)-L_n(x)\,dx = \int_a^b R_n(x)dx = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}(x)dx$

Th1：$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_kf(x_k)$ 有n次代数精度 $\Leftrightarrow$ 它是插值型求积公式

"$\Leftarrow$" $R[f]=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}(x)dx$，$\because$ 对于 $f(x)=1, x, \cdots, x^n$，$f^{(n+1)}(\xi)=0 \Rightarrow R[f]=0 \Rightarrow$ 有n次代数精度

"$\Rightarrow$" $\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_kf(x_k)$ 对于 $\mathrm{span}\{1, x, \cdots, x^n\}$ 成立，

取 $f(x)=l_k(x) \Rightarrow \int_a^b f(x)dx = \sum_{j=0}^{n} A_j\cdot l_k(x_j)$，取 $k=0,1,2,\cdots,n$ 即可。

又 $R[f]=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}(x)dx = \int_a^b \frac{w_{n+1}(x)}{(n+1)!}dx\cdot f^{(n+1)}(\xi) \triangleq K\cdot f^{(n+1)}(\eta)$

$\therefore$ 当 $f(x)$ 为次数 $<n+1$ 次多项式时，$R[f]=0$，而代入 $f(x)=x^{n+1}$ 就可求得K的取值

例：对于梯形公式，$R[f]=K\cdot f''(\eta)$

而 $f=x^2$ 时，$\underset{2K}{\overset{\shortparallel}{K\cdot f''(\eta)}}=R[f]=\int_a^b x^2dx-\sum_{k=0}^{n}A_k\cdot x_k^2=\frac{b^3-a^3}{3}-\frac{a^2+b^2}{2}(b-a)=\frac{2b^3-2a^3}{6}-\frac{3(a^2b+b^3-a^3-ab^2)}{6}$

$=\frac{2b^3-2a^3-3a^2b-3b^3+3a^3+3ab^2}{6}=\frac{(a-b)^3}{6}$

$\Rightarrow\therefore K=-\frac{(b-a)^3}{12}\Rightarrow R[f]=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$

收敛性：$\lim\limits_{\substack{n\to\infty\\h\to 0}}\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)=\int_a^b f(x)dx$，$h=\max\limits_{1\le i\le n}(x_i-x_{i-1})$

稳定性：$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$，测量误差 $f(x_k)\to\tilde{f}_k$，$I_n(\tilde{f})=\sum_{k=0}^{n}A_k\tilde{f}_k$

$\therefore\forall\varepsilon>0$，$\exists\delta$，只要 $|f(x_k)-\tilde{f}_k|<\delta$，$|I_n(f)-I_n(\tilde{f})|<\varepsilon$

Th：若 $A_k>0$，则求积公式稳定.

pf. $|I_n(f)-I_n(\tilde{f})|=\left|\sum_{k=0}^{n}A_k(f(x_k)-\tilde{f}(x_k))\right|\le\sum_{k=0}^{n}A_k|f(x_k)-\tilde{f}(x_k)|\le\delta\cdot\sum_{k=0}^{n}A_k=\delta(b-a)<\varepsilon.$

2. Newton-Cotes 公式

将 $[a,b]$ n 等分，步长 $h=\frac{b-a}{n}$，选取节点 $x_k=a+kh$，$k=0,1,2,\cdots,n$

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

$\therefore A_k=\int_a^b\prod_{\substack{j=0\\j\ne k}}^{n}\frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)}dx\overset{x=a+th}{\underset{x_j=a+jh}{=\!=\!=}}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\ne k}}^{n}\frac{t-j}{k-j}h\,dt=h\cdot\int_0^n\left(\prod_{\substack{j=0\\j\ne k}}^{n}(t-j)\right)\cdot\frac{1}{k\cdot(k-1)\cdots1\cdot(-1)(-2)\cdots(-(n-k))}dt$

$=h\cdot\int_0^n\left(\prod_{\substack{j=0\\j\ne k}}^{n}(t-j)\right)\cdot\frac{(-1)^{n-k}}{k!\cdot(n-k)!}dt=\frac{h\cdot(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\cdot\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\ne k}}^{n}(t-j)\,dt$

$\therefore\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n}\frac{h\cdot(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\cdot\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\ne k}}^{n}(t-j)\,dt\,f(x_k)=(b-a)\sum_{k=0}^{n}\frac{h(-1)^{n-k}}{(b-a)\cdot k!(n-k)!}\cdot\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\ne k}}^{n}(t-j)dt\,f(x_k)=(b-a)\sum_{k=0}^{n}\frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\ne k}}^{n}(t-j)dt\,f(x_k)$

$\Rightarrow$ 记 $\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)\cdot\sum_{k=0}^{n}\frac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!(n-k)!}\cdot\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\ne k}}^{n}(t-j)dt\,f(x_k)\hat{=}(b-a)\cdot\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k)$ 为 Newton-Cotes 公式

$\therefore$ 当 $n=1$ 时，$C_0^{(1)}=\frac{(-1)^{1-0}}{1\cdot 0!\cdot 1!}\cdot\int_0^1 t-1\,dt=-1\cdot\frac{t^2}{2}-t\Big|_0^1=\frac{1}{2}$，

$C_1^{(1)}=\frac{(-1)^{1-1}}{1\cdot 1!\cdot 0!}\cdot\int_0^1 t\,dt=1\cdot\frac{t^2}{2}\Big|_0^1=\frac{1}{2}$

$\Rightarrow\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)\cdot(\frac{1}{2}f(a)+\frac{1}{2}f(b))=\frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a)$ 为梯形公式.

当 $n=2$ 时，$C_0^{(2)}=\frac{(-1)^{2-0}}{2\cdot 2!\cdot 0!}\cdot\int_0^2(t-1)(t-2)dt=\frac{1}{4}\cdot\frac{t^3}{3}-\frac{3t^2}{2}+2t\Big|_0^2=\frac{1}{4}\cdot(\frac{8}{3}-6+4)=\frac{1}{6}$

$C_1^{(2)}=\frac{(-1)^{2-1}}{2\cdot 1!\cdot 1!}\cdot\int_0^2 t(t-2)dt=-\frac{1}{2}\cdot\frac{t^3}{3}-t^2\Big|_0^2=-\frac{1}{2}\cdot(\frac{8}{3}-4)=\frac{2}{3}$

$C_2^{(2)}=\frac{(-1)^{2-2}}{2\cdot 0!\cdot 2!}\cdot\int_0^2 t(t-1)dt=\frac{1}{4}\cdot\frac{t^3}{3}-\frac{t^2}{2}\Big|_0^2=\frac{1}{4}\cdot(\frac{8}{3}-2)=\frac{1}{6}$

$\Rightarrow\therefore\int_a^b f(x)dx=(b-a)\cdot\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k)=(b-a)\cdot\left(\frac{1}{6}f(a)+\frac{2}{3}f(\frac{a+b}{2})+\frac{1}{6}f(b)\right)=\frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right)$

为 Simpson 公式

当 $n=4$ 时，同样可得一个积分公式，此即为 Cotes 公式.

对于 Cotes 系数表，当 $n\le 7$ 时，$C_k^{(n)}$ 均 $>0\Rightarrow$ 求积公式稳定；$n\ge 8$ 时，A_k 出现负值，不宜使用此公式

$\because$ Newton-Cotes 公式是插值求积公式，$\therefore$ n 阶 N-C 公式至少有 n 次代数精度

对于 2 阶 N-C 公式（Simpson 公式）$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{b-a}{6}(f(a)+4\cdot f(\frac{a+b}{2})+f(b))$

$\therefore$ 对 $f(x)=x^2 \Rightarrow \int_a^b f(x)dx=\frac{b^3-a^3}{3}$，$\frac{b-a}{6}[f(a)+4\cdot f(\frac{a+b}{2})+f(b)]=\frac{b-a}{6}\cdot(a^2+4\cdot(\frac{a+b}{2})^2+b^2)=\frac{b-a}{6}\cdot(2a^2+2ab+b^2)$

$=\frac{b-a}{3}(a^2+ab+b^2)=\frac{b^3-a^3}{3}$ 成立.

不过，我们发现：对 $f(x)=x^3$，$\int_a^b f(x)dx=\frac{b^4-a^4}{4}$

而 $\frac{b-a}{6}\cdot(f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b))=\frac{b-a}{6}\cdot(a^3+4\cdot(\frac{a+b}{2})^3+b^3)=\frac{b-a}{6}\cdot(a^3+\frac{1}{2}(a+b)^3+b^3)=\frac{b-a}{12}\cdot(2a^3+2b^3+a^3+b^3+3ab^2+3a^2b)$

$=\frac{b-a}{4}(a^3+a^2b+ab^2+b^3)=\frac{b^3-a^3}{4}$ 成立 $\Rightarrow$ 具有3阶代数精度.

Th3：当n为偶数时，n阶 N-C公式，具有n+1阶代数精度.

pf. $R[f]=K\cdot f^{(n+1)}(\xi)$. $\therefore$ 当 $f(x)=1,x,x^2,\cdots,x^n$ 时，$f^{(n+1)}(\xi)=0 \Rightarrow R[f]=0 \Rightarrow n$阶代数精度

$f(x)=x^{n+1}$，$R[f]=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}(x)dx=\int_a^b\frac{(n+1)!}{(n+1)!}\cdot w_{n+1}(x)dx=\int_a^b\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)dx$

$\xlongequal[x_j=a+jh]{x=a+th} h\int_0^n\prod_{j=0}^{n}(t-j)dt \xlongequal[令t=u+\frac{n}{2}]{\frac{n}{2}\in\mathbb{Z}} h\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}\prod_{j=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}(u-j)du$，其中 $\prod_{j=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}(u-j)$ 为奇函数 $\Rightarrow R[f]=0$.

$\therefore$ n为偶数时，n阶 N-C公式有n+1阶代数精度

余项：对于梯形公式：$R_1[f]=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$，$\eta\in[a,b]$

对于Simpson公式：$R_2[f]=Kf^{(4)}(\eta)$ ，$n=2$，$m=3$

$\therefore K=\frac{1}{(m+1)!}\left[\int_a^b x^{m+1}dx-\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)\right]=\frac{1}{4!}\left(\frac{b^5-a^5}{5}-\frac{b-a}{6}\cdot\left(a^4+4(\frac{a+b}{2})^4+b^4\right)\right)=-\frac{1}{4!}\frac{(b-a)^5}{120}=-\frac{b-a}{180}\cdot(\frac{b-a}{2})^4$

$\therefore R_2[f]=-\frac{b-a}{180}\cdot(\frac{b-a}{2})^4 f^{(4)}(\eta)$

对于Cotes公式：$n=4$，$m=5$，$R_4[f]=\frac{-2(b-a)}{945}\cdot(\frac{b-a}{4})^6\cdot f^{(6)}(\eta)$

3. 复合梯形公式：在子区间上用梯形公式求积
(复合求积 / Simpson公式)

将区间 $[a,b]$ 分为n部分，$[x_i,x_{i+1}]$，$x_i=a+i\frac{b-a}{n}$ ，$i=0,1,2,\cdots,n$

$\therefore I=\int_a^b f(x)dx\doteq\sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}}f(x)dx=\sum_{i=0}^{n-1}(f(x_i)+f(x_{i+1}))\cdot\frac{x_{i+1}-x_i}{2}=\sum_{i=0}^{n-1}\frac{h}{2}\cdot(f(x_i)+f(x_{i+1}))$

$=\frac{h}{2}\cdot(f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b))\triangleq T_n$.

$\therefore R=I-T_n=\sum_{i=0}^{n-1}-\frac{(x_{i+1}-x_i)^3}{12}f''(\eta_i)=-\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\eta_i)$ ，$\eta_i\in(x_i,x_{i+1})$

若 $f\in C^2[a,b]$，则 $\exists\eta$, s.t $f''(\eta)=\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\eta_i)\Rightarrow R=-\frac{nh^3}{12}f''(\eta)\xlongequal{h=\frac{b-a}{n}}-\frac{b-a}{12}\cdot h^2\cdot f''(\eta)\Rightarrow R=O(h^2)$

$\therefore \lim_{n\to\infty}T_n=I$ 收敛；而复合梯形公式，稳定

事实上 $f\in C[a,b]$ 时即收敛. $T_n=\frac{1}{2}\left[\frac{b-a}{n}\sum_{0}^{n-1}f(x_k)+\frac{b-a}{n}\sum_{1}^{n}f(x_k)\right]\to I$

同样可得复合Simpson公式：记 $[x_i,x_{i+1}]$ 的中点为 $x_{i+\frac{1}{2}}$

$I=\int_a^b f(x)dx\doteq\sum_{i=0}^{n-1}\frac{h}{6}\left[f(x_i)+4f(x_{i+\frac{1}{2}})+f(x_{i+1})\right]$

$S_n=\frac{h}{6}\left[f(a)+f(b)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)\right]$

$R=-\frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4\sum_{i=0}^{n-1}f^{(4)}(\eta_i)$. 若 $f\in C^4[a,b]$. 则 $R=-\frac{b-a}{2880}h^4f^{(4)}(\eta)=O(h^4)$

复合Simpson公式效率比复合梯形公式好.

4.龙贝格求积公式.

若将[a,b]等分为n个小区间,则可得复合梯形公式: $T_n=\frac{h}{2}[f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)]$

若再将其二等分为2n个小区间, $T_{2n}=\sum_{i=0}^{n-1}\left[\frac{1}{2}\cdot\frac{h}{2}\cdot(f(x_i)+f(x_{i+\frac{1}{2}}))+\frac{1}{2}\cdot\frac{h}{2}\cdot(f(x_{i+\frac{1}{2}})+f(x_{i+1}))\right]$

$$=\sum_{i=0}^{n-1}\frac{h}{4}(f(x_i)+2f(x_{i+\frac{1}{2}})+f(x_{i+1}))=\sum_{i=0}^{n-1}\frac{h}{4}\cdot(f(x_i)+f(x_{i+1}))+\sum_{i=0}^{n-1}\frac{h}{2}\cdot f(x_{i+\frac{1}{2}})$$

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

⇒可用上述递推公式,不断分割,二分次数为k时需要2^k个点,可以提高精度

$I-T_n=-\frac{b-a}{12}h^2f''(\eta)$, $h=\frac{b-a}{n}$, ∴若记$T(h)=T_n$,则$T(\frac{h}{2})=T_{2n}$

∴ $T(h)=I+\frac{b-a}{12}h^2f''(\eta)\Rightarrow\lim_{h\to0}T(h)=I$

Th4: 设$f(x)\in C^\infty[a,b]$,则有 $T(h)=I+\alpha_1h^2+\alpha_2h^4+\cdots+\alpha_l h^{2l}+\cdots$

∴ $T_n=T(h)=I+\alpha_1h^2+\alpha_2h^4+\cdots+\alpha_l h^{2l}+\cdots=I+O(h^2)$

$T_{2n}=T(\frac{h}{2})=I+\frac{\alpha_1}{4}h^2+\frac{\alpha_2}{16}h^4+\cdots\cdots$

⇒ $\frac{4T(\frac{h}{2})-T(h)}{3}\triangleq I+\beta_1h^4+\cdots=I+O(h^4)$

∴通过加权平均,可将误差从$O(h^2)$优化到$O(h^4)$. 记$T_1(h)=\frac{4T(\frac{h}{2})-T(h)}{3}$

同样,利用$T_1(h)$与$T_1(\frac{h}{2})$可加权出$T_2(h)$,可将误差变为$O(h^6)$

一般记$T_0(h)=T(h)$, $T_m(h)=\frac{4^mT_{m-1}(\frac{h}{2})-T_{m-1}(h)}{4^m-1}$, 误差为$O(h^{2m+2})$ ——理查森外推加速

∴可记$T_0^{(k)}$为二分k次后的梯形求积值,则$T_0^{(k)}=T_{2^k}=T(\frac{b-a}{2^k})$

$T_m^{(k)}$为m次加速后的梯形求积值

$$\begin{array}{ccccc}
T_0^{(0)}=\frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)) & \searrow & & & \\
\downarrow & & & & \\
T_0^{(1)}=\frac{1}{2}\cdot T_0^{(0)}+\Sigma\cdots & \longrightarrow & T_1^{(0)} & \searrow & \\
\downarrow & \searrow & & & T_2^{(0)} \\
T_0^{(2)} & \longrightarrow & T_1^{(1)} & \longrightarrow &
\end{array}$$

直至$|T_k^{(0)}-T_{k-1}^{(0)}|<\varepsilon$停止, $I\approx T_k^{(0)}$

有: $\lim_{m\to\infty}T_m^{(0)}=I$, $\lim_{k\to+\infty}T_m^{(k)}=I$

事实上: $T_0^{(0)}$为梯形公式, $T_1^{(0)}$为Simpson公式, $T_2^{(0)}$为Cotes公式.

5.数值微分

根据导数定义: $f'(a)\approx\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$, $f'(a)=\frac{f(a)-f(a-h)}{h}$

⇒上两式的误差项均为$O(h)$, ⇒可使用 $f'(a)=\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$

$$\because \left.\begin{array}{l} f(a+h)=f(a)+hf'(a)+\frac{h^2}{2!}f''(a)+\cdots \\ f(a-h)=f(a)-hf'(a)+\frac{h^2}{2!}f''(a)+\cdots \end{array}\right\}\Rightarrow\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}=f'(a)+\frac{2h^3}{3!}f'''(a)\frac{1}{2h}+\cdots\Rightarrow \text{误差项为}O(h^2)$$

∴数值微分可利用中点公式: $G(h)\triangleq\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}=f'(a)+\frac{h^2}{3!}f'''(a)+\frac{h^4}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots$

事实上: $G(h)\triangleq\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}=f'(a)+\frac{h^2}{3!}f'''(\xi)$

⇒∴若 $\max_{|x-a|\le h}|f'''(x)|\le M$, 则有 $|G(h)-f'(a)|\le\frac{h^2}{6}M$

$G(h) \triangleq \dfrac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$，h不能太小，太小效果不好，因为我们需要考虑舍入误差

设 $f(a+h)$ 和 $f(a-h)$ 分别有舍入误差 $\varepsilon_1, \varepsilon_2$，记 $\varepsilon = \max\{\varepsilon_1, \varepsilon_2\}$

$\therefore G(h)$ 的舍入误差 $\le \dfrac{|\varepsilon_1|+|\varepsilon_2|}{2h} \le \dfrac{\varepsilon}{h} \Rightarrow \therefore f'(a)$ 的误差上界为 $\dfrac{h^2}{6}M + \dfrac{\varepsilon}{h} \triangleq g(h)$

$\therefore g'(h) = \dfrac{h}{3}\cdot M - \dfrac{\varepsilon}{h^2} = 0 \Rightarrow h^3 = \dfrac{3\varepsilon}{M} \Rightarrow h = \sqrt[3]{\dfrac{3\varepsilon}{M}}$

例：$f(x)=\sqrt{x}$，计算 $f'(2)$ 时：$\because f'''(x) = \dfrac{3}{8}x^{-\frac{5}{2}} \Rightarrow M = \max\limits_{1.9\le x\le 2.1}\left|\dfrac{3}{8}x^{-\frac{5}{2}}\right| \le 0.07536$.

而舍入误差 $\varepsilon = \frac{1}{2}\times 10^{-4}$ 时，$h = \sqrt[3]{\dfrac{3\times\frac{1}{2}\times 10^{-4}}{0.07536}} = 0.125$

· 插值型的求导公式：已知在 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 处 $y_i = f(x_i)$，建立 $P_n(x)$，s.t. $f'(x) = P_n'(x)$

$\Rightarrow f'(x) - P_n'(x) = R_n'(x) = \left(\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}W_{n+1}(x)\right)' = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}W_{n+1}'(x) + \dfrac{W_{n+1}(x)}{(n+1)!}\dfrac{df^{(n+1)}(\xi)}{dx}$

为了能够进行误差分析，只能限定 x 为 $x_0, x_1, \cdots, x_n$，这样 $\dfrac{W_{n+1}(x)}{(n+1)!}\dfrac{df^{(n+1)}(\xi)}{dx} = 0$

$\Rightarrow \therefore f'(x_k) - P_n'(x_k) = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}W_{n+1}'(x_k)$

① 当 $n=1$ 时 $\Rightarrow$ 两点公式 $P_1(x) = \dfrac{x-x_1}{x_0-x_1}\cdot f(x_0) + \dfrac{x-x_0}{x_1-x_0}\cdot f(x_1)$

$\Rightarrow \therefore P_1'(x) = \dfrac{1}{x_0-x_1}f(x_0) + \dfrac{1}{x_1-x_0}f(x_1) = \dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0} = \dfrac{1}{h}(f(x_1)-f(x_0))$

$\therefore P_1'(x_0) = P_1'(x_1) = \dfrac{1}{h}(f(x_1)-f(x_0))$

而 $W_{n+1}'(x) = \dfrac{d(x-x_0)(x-x_1)}{dx} = x - x_0 + x - x_1 \Rightarrow W_{n+1}'(x_0) = \underbrace{x_0 - x_1}_{=-h}$，$W_{n+1}'(x_1) = x_1 - x_0 = h$

$\therefore f'(x_0) = \dfrac{1}{h}(f(x_1)-f(x_0)) - \dfrac{h}{2}f''(\xi)$，$f'(x_1) = \dfrac{1}{h}(f(x_1)-f(x_0)) + \dfrac{h}{2}f''(\xi)$

② 当 $n=2$ 时 $\Rightarrow$ 抛物线公式 $P_2(x) = \dfrac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \dfrac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \dfrac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$

记 $x = x_0 + th \Rightarrow P_2(x_0+th) = \dfrac{(t-1)(t-2)}{2}f(x_0) - \dfrac{t(t-2)}{1}\cdot f(x_1) + \dfrac{t(t-1)}{2}f(x_2)$

两边对 t 求导：$h\cdot P_2'(x_0+th) = \dfrac{2t-3}{2}f(x_0) - (2t-2)f(x_1) + \dfrac{2t-1}{2}f(x_2)$

$\therefore P_2'(x_0+th) = \dfrac{1}{2h}\left[(2t-3)f(x_0) - (4t-4)f(x_1) + (2t-1)f(x_2)\right]$

$t=0,1,2$ 代入 $\Rightarrow$

$$P_2'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\right]$$
$$P_2'(x_1) = \frac{1}{2h}\left[-f(x_0) + f(x_2)\right]$$
$$P_2'(x_2) = \frac{1}{2h}\left[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)\right]$$

，其中 $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = \dfrac{x_2-x_0}{2}$

同样，可计算 $R'(x_0) = \dfrac{h^2}{3}f'''(\xi_0)$，$R'(x_1) = -\dfrac{h^2}{6}f'''(\xi_1)$，$R'(x_2) = \dfrac{h^2}{3}f'''(\xi_2)$

类似地，还可以求高阶导数。例如：$P''(x_0+th) = \dfrac{1}{h^2}[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)]$，$R''(x_0+th) = -\dfrac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)$

与数值积分类似，数值微分也可进行外推来提高精度：

$f'(a) \doteq G(h) = \dfrac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}\ (= f'(a) + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots)$

$\Rightarrow G(\frac{h}{2}) = f'(a) + \dfrac{\alpha_1}{4}h^2 + \dfrac{\alpha_2}{16}h^4 + \cdots$

$\Rightarrow \therefore G_1(h) = \dfrac{4G(\frac{h}{2}) - G(h)}{3} = f'(a) + O(h^4)$.

$\therefore$ 由 $G_0(h)=G(h)$, $G_m(h)=\dfrac{4^m G_{m-1}(\frac{h}{2})-G_{m-1}(h)}{4^m-1}$，这样有 $G_m(h)=f'(a)+O(h^{2m+2})$

但因为有舍入误差，m不宜过大.

解线性方程组：直接法 & 迭代法 → 近似解，需考虑收敛性及收敛速度问题，适合大型稀疏矩阵

↓

可得到理论精确解，但是实际上因舍入误差原因，得到的也是近似解

适合低阶稠密矩阵

1、高斯消去法

有线性方程组 $Ax=b$，其中 $A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}\end{pmatrix}$，$b=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n\end{pmatrix}$，思想：通过变换，将A变为上三角矩阵.

记 $(a_{ij})=A\triangleq A^{(1)}=(a_{ij}^{(1)})$，$b=b^{(1)}$

Step 1：若 $a_{11}^{(1)}\neq 0$，计算 $m_{i1}=\dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$，用 $-m_{i1}$ 乘以第一行加至第 i 行，$i=2,3,\cdots,n$，得到

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & & & \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)}\end{pmatrix}$$ 记为 $A^{(2)}x=b^{(2)}$

⋮

Step k：若 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$，计算 $m_{ik}=\dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$，用 $-m_{ik}$ 乘以第 k 行加至第 i 行，$i=k+1,k+2,\cdots,n$ 得到

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & a_{1k+1}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{2k}^{(2)} & a_{2k+1}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & a_{kk+1}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & 0 & a_{k+1k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k+1n}^{(k+1)} \\ & & \vdots & & & \\ & & 0 & a_{nk+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{nn}^{(k+1)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ b_{k+1}^{(k+1)} \\ \vdots \\ b_n^{(k+1)}\end{pmatrix}$$，记为 $A^{(k+1)}x=b^{(k+1)}$

⋮

step n-1：若 $a_{n-1n-1}^{(n-1)}\neq 0$，计算 $m_{nn-1}=\dfrac{a_{nn-1}^{(n-1)}}{a_{n-1n-1}^{(n-1)}}$，用 $-m_{nn-1}$ 乘以第 n-1 行加至第 n 行，

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \\ 0 & 0 & 0 & a_{nn}^{(n)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)}\end{pmatrix}$$，记为 $A^{(n)}x=b^{(n)}$

Step n：回代：$x_n=\dfrac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}}$，$x_k=\dfrac{1}{a_{kk}^{(k)}}\left(b_k^{(k)}-\sum_{j=k+1}^{n}a_{kj}^{(k)}\cdot x_j\right)$，$k=n-1,n-2,\cdots,1$

⇒ 定理：若 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$，$k=1,2,\cdots,n$，则可通过 Gauss 消去法，经消元和回代求解.

事实上，只要 A 非奇异，总可通过行交换 s.t. $a_{kk}^{(k)}\neq 0$.

同时，$a_{ii}^{(i)}\neq 0$，$(i=1,2,\cdots,k)$ ⇔ A的顺序主子式 $D_i\neq 0$，$(i=1,2,\cdots,k)$

⇒ 若 $D_i\neq 0$，$i=1,2,\cdots,k$，则 $a_{11}^{(1)}\neq 0$，$a_{ii}^{(i)}=\dfrac{D_i}{D_{i-1}}\neq 0$，$i=2,3,\cdots,n$

高斯消去法与矩阵三角分解有着很大的联系:

在第1步消元中: $L_1A^{(1)}=A^{(2)}$, $L_1b^{(1)}=b^{(2)}$

其中 $L_1=\begin{pmatrix}1&&&\\-m_{21}&1&&\\-m_{31}&&1&\\\vdots&&&\ddots\\-m_{n1}&&&&1\end{pmatrix}$, 同理可定义 $L_k=\begin{pmatrix}1&&&&\\&\ddots&&&\\&&1&&\\&&-m_{k+1,k}&1&\\&&\vdots&&\ddots\\&&-m_{nk}&&&1\end{pmatrix}$, 有 $L_kA^{(k)}=A^{(k+1)}$, $L_kb^{(k)}=b^{(k+1)}$

$\Rightarrow \because L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1A=L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1A^{(1)}=L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2A^{(2)}=\cdots=L_{n-1}A^{(n-1)}=A^{(n)}\triangleq U$, $L_{n-1}\cdots L_1b^{(1)}=b^{(n)}$

$\Rightarrow L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1A=U\Rightarrow A=L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1}U\triangleq LU$

$\therefore$ A可以分解为一个单位下三角阵L与一个上三角阵U的乘积. 其中 $L=\begin{pmatrix}1&&&\\m_{21}&1&&\\m_{31}&m_{32}&1&\\\vdots&\vdots&&\ddots\\m_{n1}&m_{n2}&\cdots&\cdots&1\end{pmatrix}$

定理: 若A可用Gauss消去法 则A可进行LU分解, 且分解唯一

pf. 假设 $A=L_1U_1=L_2U_2\Rightarrow L_2^{-1}L_1U_1U_1^{-1}=L_2^{-1}L_2U_2U_1^{-1}\Rightarrow L_2^{-1}L_1=U_2U_1^{-1}$

即一个下三角矩阵 = 一个上三角矩阵 $\Rightarrow L_2^{-1}L_1=U_2U_1^{-1}=I\Rightarrow L_1=L_2, U_1=U_2$

但有时, $a_{kk}^{(k)}$ 非常小 接近于0. 我们会使用列主元消去法 以提高精度 降低舍入误差

列主元消去法是在每次行变换前, 选取列中的最大元素 作为 $a_{kk}^{(k)}$:

第k步中 $|a_{i_k k}|=\max\limits_{k\le i\le n}|a_{ik}|\ne 0$, $\therefore$ 对于 $A^{(k)}\to$ 列i_k行交换, 行变换 $\to A^{(k+1)}$

$\therefore$ 用矩阵法描述: $L_1I_{1,i_1}A^{(1)}=A^{(2)}$, $L_1I_{1,i_1}b^{(1)}=b^{(2)}$,

$L_kI_{k,i_k}A^{(k)}=A^{(k+1)}$, $L_kI_{k,i_k}b^{(k)}=b^{(k+1)}\ldots$

$\Rightarrow \therefore L_{n-1}I_{n-1,i_{n-1}}\cdot L_{n-2}I_{n-2,i_{n-2}}\cdots L_1\cdot I_{1,i_1}A=A^{(n)}=U\Rightarrow$ 可记为 $\tilde{P}A=U$

以n=4为例 $U=\tilde{P}A=L_3I_{3,i_3}L_2I_{2,i_2}\cdot L_1\cdot I_{1,i_1}A=L_3(I_{3,i_3}L_2\cdot I_{3,i_3})(I_{3,i_3}I_{2,i_2}L_1I_{2,i_2}I_{3,i_3})\cdot(I_{3,i_3}\cdot I_{2,i_2}\cdot I_{1,i_1})\cdot A$

$\triangleq\tilde{L}_3\cdot\tilde{L}_2\cdot\tilde{L}_1\cdot P\cdot A$. 记 $L^{-1}=\tilde{L}_3\tilde{L}_2\tilde{L}_1\Rightarrow\tilde{L}_k$ 为单位下三角, 且元素绝对值不超过1

$\Rightarrow \therefore PA=LU$, P为排列矩阵, L为单位下三角(可证明), A为上三角矩阵

$\therefore$ 列主元消去法相当于求解 $(PA)X=(Pb)$ 的Gauss消去法

2. 矩阵三角分解法

① 不选主元时: 求解 $AX=b\Leftrightarrow$ 求解 $LUX=b\Leftrightarrow$ 求解2个三角方程 $\begin{cases}Ly=b\\UX=y\end{cases}$

$\because A=LU\Rightarrow\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}&\cdots&a_{1n}\\a_{21}&a_{22}&\cdots&a_{2n}\\\vdots&&&\\a_{n1}&a_{n2}&\cdots&a_{nn}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&&&\\l_{21}&1&&\\\vdots&\vdots&\ddots&\\l_{n1}&l_{n2}&\cdots&1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}u_{11}&u_{12}&\cdots&u_{1n}\\&u_{22}&\cdots&u_{2n}\\&&\ddots&\vdots\\&&&u_{nn}\end{pmatrix}$

$\Rightarrow \because a_{11}=u_{11}, a_{12}=u_{12},\cdots,a_{1n}=u_{1n}\longrightarrow a_{1j}=u_{1j}$, $j=1,2,\cdots,n$ $\Rightarrow$ 确定U的第一行

$a_{21}=l_{21}u_{11}, a_{31}=l_{31}\cdot u_{11},\cdots,a_{n1}=l_{n1}\cdot u_{11}\to l_{i1}=\frac{a_{i1}}{u_{11}}$, $i=2,3,\cdots,n$ $\Rightarrow$ 确定L的第一列

$\therefore a_{2j}=l_{21}\cdot u_{1j}+u_{2j}\longrightarrow u_{2j}=a_{2j}-l_{21}\cdot u_{1j}$ $\Rightarrow$ 确定U的第二行

$a_{j2}=l_{j1}\cdot u_{12}+l_{j2}\cdot u_{22}\longrightarrow l_{j2}=\frac{1}{u_{22}}(a_{j2}-l_{j1}\cdot u_{12})$ $\Rightarrow$ 确定L的第二列

∴依此,自次均可确定U的一行和L的一列,可得出L与U,此方法称为Doolittle分解:

$$u_{1j}=a_{1j},\ j=1,2,\cdots,n\ ;\ l_{i1}=\frac{a_{i1}}{u_{11}},\ i=2,\cdots,n$$

对$k=2,3,\cdots,n$, $u_{kj}=a_{kj}-\sum_{s=1}^{k-1} l_{ks}\cdot u_{sj},\ j=k,\cdots,n$

$$l_{ik}=\frac{1}{u_{kk}}\left(a_{ik}-\sum_{s=1}^{k-1} l_{is}\cdot u_{sk}\right),\ i=k+1,\cdots,n$$

得到L,U之后求解 $Ly=b$,与 $Ux=y$ 即可:

②选主元时: $PA=LU$,

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \xrightarrow[\text{使}u_{kk}\text{大}]{\text{选主元时}}$$

$u_{11}=a_{11}$,引进变量 s_i,
$s_i=a_{1i}$, $i=1,2,\cdots,n$
取 i_r 使得 $|s_{i_r}|=\max_{1\le i\le n}|s_i|$
交换 i_r 与1行,计算U第一行, L第一列

$$\rightarrow \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ l_{31} & a_{32} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow\cdots\rightarrow \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1,r-1} & u_{1r} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2,r-1} & u_{2r} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{r-1,1} & l_{r-1,2} & \cdots & u_{r-1,r-1} & u_{r-1,r} & \cdots & u_{r-1,n} \\ l_{r1} & l_{r2} & \cdots & l_{r,r-1} & a_{rr} & \cdots & a_{rn} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,r-1} & a_{nr} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} L\backslash U \\ A \end{pmatrix}$$

引变量 $s_i=a_{ir}-\sum_{k=1}^{r-1} l_{ik}\cdot u_{kr}$, $(i=r,r+1,\cdots,n)$

记 $|s_{i_r}|=\max_{r\le i\le n}|s_i|$

交换r行和 i_r 行,再计算

$$\rightarrow\cdots\rightarrow \begin{pmatrix} L\backslash U \end{pmatrix}$$

用个 I_p 记录

与此同时过程中记录P

∴求解 $Ax=b \Leftrightarrow PAx=Pb$
$\Leftrightarrow LUx=Pb$
也求解 $\begin{cases} Ly=Pb \\ Ux=y \end{cases}$

③平方根法: 对于对称矩阵A,其三角分解法有更为简单的形式

$$A=LU=L\begin{pmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} 1 & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \cdots & \frac{u_{1n}}{u_{11}} \\ & 1 & \cdots & \frac{u_{2n}}{u_{22}} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{pmatrix} \triangleq LDU_0$$

∵ $A=A^T=(LDU_0)^T=U_0^T(DL^T)$ ⇒ 由 $A=LU$ 分解唯一性知 $U_0^T=L$ ⇒ ∴ $A=LDL^T$

∴对称阵A可分解: $A=LDL^T$,其中L为单位下三角阵,D为对角阵

若A还为正定矩阵,则还有A的顺序主子式 $D_i>0$, ∴ $d_1=u_{11}=D_1>0$, $u_{ii}=d_i=\frac{D_i}{D_{i-1}}>0\ (i=2,3,\cdots,n)$

∴ $D=\mathrm{diag}(u_{11},u_{22},\cdots,u_{nn})=\mathrm{diag}(\sqrt{u_{11}},\sqrt{u_{22}},\cdots,\sqrt{u_{nn}})^2=D^{\frac{1}{2}}\cdot D^{\frac{1}{2}}$

∴ $A=LDL^T=L\cdot D^{\frac{1}{2}}\cdot D^{\frac{1}{2}}L^T=(LD^{\frac{1}{2}})\cdot(LD^{\frac{1}{2}})^T=L_1\cdot L_1^T$

∴对于一个对称正定矩阵,可将其分解为一个下三角矩阵L与其转置的积,此分解称为Cholesky分解.

当L对角线元素为正时,此种分解是唯一的.

$$\Rightarrow A=\begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ 0 & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & l_{nn} \end{pmatrix}$$

⇒ $a_{11}=l_{11}^2$, $a_{21}=l_{21}l_{11}$, $\cdots$, $a_{n1}=l_{n1}l_{11}$

⇒ ∴ $l_{11}=a_{11}^{\frac{1}{2}}$, 且 $l_{i1}=\frac{a_{i1}}{l_{11}}$, $i=2,3,\cdots,n$

以此每行每列计算

$$\Rightarrow l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2\right)^{\frac{1}{2}},\ j=1,2,\cdots,n$$

$$l_{ij}=\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk}\right)/l_{jj},\ i=j+1,\cdots,n$$,即称为平方根法

对于 $Ax=b \Leftrightarrow LL^Tx=b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly=b \\ L^Tx=y \end{cases}$ 即可

也有改进平方根法,是避免开平方过程略去

④追赶法：对于特殊的线性方程组 $Ax=f$，若A是一个三对角矩阵，即

$$A=\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$ 满足 $a_i\neq 0\ (i=2,3,\cdots,n)$，$c_i\neq 0\ (i=1,2,\cdots,n-1)$

$|b_1|>|c_1|$，$|b_n|>|a_n|$，$|b_i|\geq|a_i|+|c_i|$，$i=2,3,\cdots,n-1$

可以对A作LU分解，有以下形式：
$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix}=A=LU=\begin{pmatrix} \alpha_1 & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_n & \alpha_n \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-1} \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow\therefore\begin{cases} b_1=\alpha_1,\ c_1=\alpha_1\beta_1 \\ a_i=\gamma_i,\ b_i=\gamma_i\beta_{i-1}+\alpha_i\ (i=2,3,\cdots,n) \\ c_i=\alpha_i\beta_i\ \ (i=2,3,\cdots,n-1) \end{cases}$$

$\Rightarrow$ 从中知 $|\beta_1|=\dfrac{|c_1|}{|\alpha_1|}=\dfrac{|c_1|}{|b_1|}<1$

而 $\alpha_i=b_i-\gamma_i\beta_{i-1}\Rightarrow|\alpha_i|\geq|b_i|-|\gamma_i|\cdot|\beta_{i-1}|$

$\therefore|\beta_i|=\dfrac{|c_i|}{|\alpha_i|}\leq\dfrac{|c_i|}{|b_i|-|\gamma_i||\beta_{i-1}|}\overset{归纳}{<}\dfrac{|c_i|}{|b_i|-|a_i|}<\dfrac{|c_i|}{|c_i|}=1$

$\Rightarrow\therefore|\beta_i|<1$

$\therefore$ 使用追赶法时：①计算 β_i：$\begin{cases}\beta_1=c_1/b_1\\ \beta_i=\dfrac{c_i}{\alpha_i}=c_i/(b_i-\gamma_i\beta_{i-1})=c_i/(b_i-a_i\beta_{i-1}),\ i=2,\cdots,n-1\end{cases}$

②解 $Ly=f\Rightarrow\begin{cases}y_1=f_1/b_1\\ y_i=(f_i-a_iy_{i-1})/(b_i-a_i\cdot\beta_{i-1}),\ i=2,3,\cdots,n\end{cases}$

③解 $Ux=y\Rightarrow\begin{cases}x_n=y_n\\ x_i=y_i-\beta_ix_{i+1},\ i=n-1,\cdots,2,1\end{cases}$

$\Rightarrow\therefore$ 追赶法：追：$\beta_1\to\beta_2\to\cdots\to\beta_n$；$y_1\to y_2\to\cdots\to y_n$

赶：$x_n\to x_{n-1}\to\cdots\to x_1$

3. 向量与矩阵的范数.

def1（向量范数）：若向量 $x\in R^n$（或 C^n）的某个非负实值函数 $N(x)=\|x\|$ 满足

(1) 正定性：$\|x\|\geq 0$，等号成立当且仅当 $x=0$

(2) 齐次性：$\forall\alpha\in R$，$\|\alpha x\|=|\alpha|\cdot\|x\|$

(3) 三角不等式：$\|x+y\|\leq\|x\|+\|y\|$，$x,y\in R^n$，

则称 $\|x\|$ 为 x 的范数或模.

则有 $\big|\|x\|-\|y\|\big|\leq\|x-y\|$，$\forall x,y\in R^n$，这是因为 $\|x\|=\|y+(x-y)\|\leq\|y\|+\|x-y\|$，$\|y\|=\|x+(y-x)\|\leq\|x\|+\|x-y\|$

def2:（收敛）设 $x^{(k)}$ 为 R^n 中一向量序列，记 $x^{(k)}=(x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)})^T$，

$x^*=(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$，若 $\lim\limits_{k\to\infty}x_i^{(k)}=x_i^*$，$i=1,2,\cdots,n$，则称 $x^{(k)}$ 收敛 x^*，记为 $\lim\limits_{k\to\infty}x^{(k)}=x^*$

Th1：设 $N(x)=\|x\|$ 为 R^n 上任一向量范数，则 $N(x)$ 是 x 的分量 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的连续函数.

pf. $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$，$e_i=(0,0,\cdots,0,1,0,0\cdots0)^T$，$y=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^T$

$\Rightarrow\therefore x=\sum\limits_{i=1}^n x_ie_i$，$y=\sum\limits_{i=1}^n y_ie_i$，证明 $N(x)$ 关于 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 连续 $\Leftrightarrow$ 证明 $x\to y$ 时，$N(x)\to N(y)$

$\therefore|N(x)-N(y)|=\big|\|x\|-\|y\|\big|\leq\|x-y\|=\|\sum\limits_1^n(x_i-y_i)e_i\|=\sum\limits_1^n|x_i-y_i|\cdot\|e_i\|\leq(\sum\limits_{i=1}^n\|e_i\|)\cdot\|x-y\|_\infty$

$\therefore|N(x)-N(y)|\leq c\|x-y\|_\infty\to 0.\Rightarrow x\to y$ 时，$N(x)\to N(y)$

$\therefore N(x)$ 是 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的连续函数.

Th2:(向量范数的等价性) 设 $\|x\|_s, \|x\|_t$ 是 R^n 上向量任意两种范数，则 $\exists c_1, c_2>0$, s.t $\forall x\in R^n$，有

$$c_1\|x\|_s \le \|x\|_t \le c_2\|x\|_s.$$

pf. 若有 $a_1\|x\|_\infty \le \|x\|_t \le a_2\|x\|_\infty$，$b_1\|x\|_\infty \le \|x\|_s \le b_2\|x\|_\infty$，

则有 $\frac{a_1}{b_2}\|x\|_s \le \frac{a_1}{b_2}b_2\|x\|_\infty = a_1\|x\|_\infty \le \|x\|_t \le a_2\|x\|_\infty = \frac{a_2}{b_1}\cdot b_1\|x\|_\infty \le \frac{a_2}{b_1}\|x\|_s$

$\therefore$ 仅需证任一向量范数与无穷范数等价即可，不妨设 $\|x\|_s = \|x\|_\infty$

考虑 $f(x)=\|x\|_t \ge 0, x\in R^n$，记 $S=\{x \mid \|x\|_\infty=1, x\in R^n\}$，则 S 为一个有界闭集

$\therefore f$ 在 S 上是连续函数，有最大最小值，设 $f(x')=\min_S f(x)=c_1$，$f(x'')=\max_S f(x)=c_2$

$\because \|\frac{x}{\|x\|_\infty}\|_\infty=1$，$\therefore \frac{x}{\|x\|_\infty}\in S. \Rightarrow c_1\le f(\frac{x}{\|x\|_\infty})\le c_2$

$\Rightarrow c_1\le \frac{\|x\|_t}{\|x\|_\infty}\le c_2 \Rightarrow c_1\|x\|_\infty \le \|x\|_t \le c_2\|x\|_\infty$

Th3: $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)}=x^* \Leftrightarrow \lim\limits_{k\to\infty}\|x^{(k)}-x^*\|=0$，$\|\cdot\|$ 为任意一种范数。

pf. $\because \lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)}=x^* \Leftrightarrow \lim\limits_{k\to+\infty} x_i^{(k)}=x_i^*, i=1,2,\dots,n \Leftrightarrow \lim\limits_{k\to+\infty}\|x^{(k)}-x^*\|_\infty=0 \Leftrightarrow \lim\limits_{k\to+\infty}\|x^{(k)}-x^*\|=0$

可以将向量范数推广到矩阵范数上：将 $R^{n\times n}$ 中的矩阵视为 R^{n^2} 上的向量

则 R^{n^2} 上的2范数 $\Leftrightarrow R^{n\times n}$ 上的F范数 $\|A\|_F=\sqrt{\sum\limits_{i=1}^n\sum\limits_{j=1}^n|a_{ij}|^2}$

def3:(矩阵范数) $\forall A\in R^{n\times n}$ 的某个非负实值函数 $N(A)=\|A\|$ 满足：

(1) 正定性：$\|A\|\ge 0$，等号成立当且仅当 $A=0$

(2) 齐次性：$\forall \alpha\in R, \|\alpha A\|=|\alpha|\cdot\|A\|$

(3) 三角不等式：$\|A+B\|\le\|A\|+\|B\|, \forall A,B\in R^{n\times n}$

(4) $\|AB\|\le\|A\|\cdot\|B\|, \forall A,B\in R^{n\times n}$

则称 $\|A\|$ 为矩阵 A 的范数或模。

def4:(矩阵的算子范数，向量诱导的范数，满足与向量范数的相容性 $\|Ax\|_v\le\|A\|\|x\|$)

设 $x\in R^n, A\in R^{n\times n}$，对于一种给定的向量范数 $\|x\|_v$ (如 $v=1,2,\infty$)，定义：

$\|A\|_v=\max\limits_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}$ 为矩阵的算子范数.

Th4: $\|A\|_v$ 是 $R^{n\times n}$ 上的一种矩阵范数，且满足相容性条件 $\|Ax\|_v\le\|A\|_v\cdot\|x\|_v, \forall A\in R^{n\times n}, x\in R^n$

pf. ①正定性：$\|A\|_v=\max\limits_{x\neq0}\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}\ge0$，且 $\|A\|_v=0\Leftrightarrow \forall x\neq0, \|Ax\|_v=0\Leftrightarrow Ax=0\Leftrightarrow A=0$

②齐次性：$\|\alpha A\|_v=\max\limits_{x\neq0}\frac{\|\alpha Ax\|_v}{\|x\|_v}=|\alpha|\max\limits_{x\neq0}\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}=|\alpha|\cdot\|A\|_v$

③三角不等式：$\|A+B\|_v=\max\limits_{x\neq0}\frac{\|(A+B)x\|_v}{\|x\|_v}\le\max\limits_{x\neq0}\frac{\|Ax\|_v+\|Bx\|_v}{\|x\|_v}\le\max\limits_{x\neq0}\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}+\max\limits_{x\neq0}\frac{\|Bx\|_v}{\|x\|_v}=\|A\|_v+\|B\|_v$

④ $\because \|A\|_v=\max\limits_{x\neq0}\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} \Rightarrow \therefore \forall x\neq0, \|A\|_v\ge\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}\Rightarrow\|Ax\|_v\le\|A\|_v\cdot\|x\|_v$，而 $x=0$ 时也成立 $\Rightarrow$ 满足相容性

$\therefore \|ABx\|_v\le\|A\|_v\cdot\|Bx\|_v\le\|A\|_v\cdot\|B\|_v\|x\|_v \Rightarrow \therefore \forall x\neq0. \frac{\|ABx\|_v}{\|x\|_v}\le\|A\|_v\|B\|_v$

$\Rightarrow \therefore \|AB\|_v\le\|A\|_v\cdot\|B\|_v$

∴可以推出几种常用矩阵的算子范数：设 $A\in R^{n\times n}$，

$\|A\|_\infty=\max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$（行范数）；$\|A\|_1=\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$（列范数）

$\|A\|_2=\sqrt{矩阵A^TA的最大特征值}$（2范数）

Th5：$\forall A\in R^{n\times n}$，则 $\max_{1\le i\le n}|\lambda_i|=\rho(A)\le\|A\|$（任一范数）

pf. 对A的任意特征值λ，存在特征向量 $x\ne0$. s.t. $Ax=\lambda x$

∴ $|\lambda|\cdot\|x\|=\|\lambda x\|=\|Ax\|\le\|A\|\cdot\|x\|\Rightarrow\therefore|\lambda|\le\|A\|$，$\Rightarrow\therefore\rho(A)\le\|A\|$.

特别地，当 $A\in R^{n\times n}$ 为对称矩阵时. $\|A\|_2=\sqrt{A^TA的最大特征值}=\sqrt{A^2最大特征值}=A最大特征值=\rho(A)$

Th6：如果 $\|B\|<1$，则 $I\pm B$ 可逆，且 $\|(I\pm B)^{-1}\|\le\frac{1}{1-\|B\|}$

pf. 反证：若 $|I-B|=0$，则 $(I-B)x=0$ 有非零解 x_0，

∴ $\exists x_0\ne0$, s.t. $(I-B)x_0=0\Rightarrow Bx_0=x_0\Rightarrow\frac{\|Bx_0\|}{\|x_0\|}=1\Rightarrow\therefore\|B\|=\max_{x\ne0}\frac{\|Bx_0\|}{\|x_0\|}\ge1$，矛盾

∴ $I-B$ 可逆. $(I-B)\cdot(I-B)^{-1}=I\Rightarrow(I-B)^{-1}=I+B(I-B)^{-1}$

$\Rightarrow\therefore\|(I-B)^{-1}\|\le\|I\|+\|B\|\|(I-B)^{-1}\|=1+\|B\|\cdot\|(I-B)^{-1}\|\Rightarrow\|(I-B)^{-1}\|\le\frac{1}{1-\|B\|}$，对 $I+B$ 类似，得证

4. 误差分析

考虑 $Ax=b$，若A, b中的项发生微小的变化，引起 $Ax=b$ 的解的巨大变化，

则称A为病态矩阵，否则称为良态矩阵.

$Ax=b\Rightarrow$ b扰动 $Ax^*=b+\delta b$，$x^*=x+\delta x\Rightarrow$ 相对误差 $\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\|A^{-1}\|\cdot\|A\|\cdot\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$

A扰动 $(A+\delta A)x^*=b$，$x^*=x+\delta x\Rightarrow$ 相对误差 $\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\frac{\|A^{-1}\|\cdot\|A\|\cdot\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1-\|A^{-1}\|\cdot\|A\|\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}$，当 $\|A^{-1}\|\cdot\|\delta A\|<1$ 时.

∴可以发现，若 $\|A^{-1}\|\cdot\|A\|$ 很大，则 x 的相对误差则可能很大

def：设 $A\in R^{n\times n}$ 为可逆矩阵，则A的条件数 $cond(A)_v=\|A\|_v\cdot\|A^{-1}\|_v$，$(v=1,2,\infty)$

特别地：$cond(A)_2=\|A\|_2\cdot\|A^{-1}\|_2=\sqrt{\frac{\lambda_{max}(A^TA)}{\lambda_{min}(A^TA)}}$，若A为对称阵，$cond(A)_2=\frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}$

对于条件数 $cond(A)_v$：① $cond(A)_v=\|A\|_v\cdot\|A^{-1}\|_v\ge\|A\cdot A^{-1}\|_v=\|I\|_v=1$

② $cond(cA)_v=\|cA\|_v\cdot\|(cA)^{-1}\|_v=\|A\|_v\cdot\|A^{-1}\|_v=cond(A)_v$

③ A为正交矩阵时. $\lambda_A=1$，∴ $cond(A)_2=1$，

R为正交矩阵时，A非奇异，则 $cond(RA)_2=cond(AR)_2=cond(A)_2$

处理病态矩阵的方法是：$Ax=b\Leftrightarrow\begin{cases}PAQy=Pb\\Qy=x\end{cases}$，$cond(PAQ)<cond(A)$

设x是 $Ax=b$ 的准确解. $\bar{x}$ 为方程的近似解，$r=b-A\bar{x}$

∴相对误差 $\frac{\|x-\bar{x}\|}{\|x\|}\le cond(A)\cdot\frac{\|r\|}{\|b\|}$ $\Rightarrow$ ∴若 $cond(A)$ 很大，即使 $\|r\|$ 很小，相对误差也会很大.

解线性方程组的迭代法

对于线性方程组 $Ax=b$，例如 $\begin{cases}8x_1-3x_2+2x_3=20\\4x_1+11x_2-x_3=33\\6x_1+3x_2+12x_3=36\end{cases}\Leftrightarrow\begin{cases}x_1=\frac{1}{8}(20+3x_2-2x_3)\\x_2=\frac{1}{11}(33-4x_1+x_3)\\x_3=\frac{1}{12}(36-6x_1-3x_2)\end{cases}\Leftrightarrow x=Bx+f$

$\therefore$ 对于一个 $Ax=b$，可通过变形得到一个等价的 $x=Bx+f$，设其有唯一解 x^*，

可通过设取初值 $x^{(0)}$，构造迭代序列 $x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+f$，得到解 x 的过程即为迭代法.

若 $\lim\limits_{k\to+\infty}x^{(k)}=x^*$，则称迭代法收敛.

$\Rightarrow$ 误差向量 $\varepsilon^{(k)}=x^{(k)}-x^*$，$\because x^*=Bx^*+f$，$x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+f$，两式相减 $\varepsilon^{(k+1)}=B\varepsilon^{(k)}$

$\therefore\varepsilon^{(k)}=B\varepsilon^{(k-1)}=\cdots=B^{k}\varepsilon^{(0)}$，$\therefore\lim\limits_{k\to+\infty}\varepsilon^{(k)}=0\Leftrightarrow\lim\limits_{k\to+\infty}B^k=0$

1. 雅可比迭代法

对于 $Ax=b$，对 A 进行矩阵分裂：$A=M-N\Rightarrow Mx-Nx=b\Rightarrow Mx=Nx+b\Rightarrow x=M^{-1}Nx+M^{-1}b=Bx+f$

$B=M^{-1}N=M^{-1}(M-A)=I-M^{-1}A$

$$Ax=b\Leftrightarrow\begin{cases}x_1=\frac{1}{a_{11}}(b_1-a_{12}x_2-\cdots-a_{1n}x_n)\\ \vdots\\ x_i=\frac{1}{a_{ii}}(b_i-\sum\limits_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j-\sum\limits_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j)\\ \vdots\\ x_n=\frac{1}{a_{nn}}(b_n-a_{n1}x_1-\cdots-a_{n,n-1}x_{n-1})\end{cases}\Rightarrow A=\begin{pmatrix}a_{11}&\cdots&a_{1n}\\ \vdots&&\vdots\\ a_{n1}&\cdots&a_{nn}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_{11}&&&\\&a_{22}&&\\&&\ddots&\\&&&a_{nn}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&&\\-a_{21}&\ddots&\\-a_{n1}\cdots&-a_{n,n-1}&0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&\cdots&-a_{1n}\\&\ddots&\vdots\\&&0\end{pmatrix}\triangleq D-L-U$$

$\Leftrightarrow M=D,N=L+U$，$Dx^{(k+1)}=(L+U)x^{(k)}+b\Rightarrow x^{(k+1)}=D^{-1}(L+U)x^{(k)}+D^{-1}b\triangleq B_Jx+f_J$

2. 高斯-塞德尔迭代法

$$x^{(0)}=(x_1^{(0)},x_2^{(0)},\cdots,x_n^{(0)})^T,\quad x_i^{(k+1)}=\Big(b_i-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}\underbrace{x_j^{(k+1)}}_{\text{更新}}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j^{(k)}\Big)/a_{ii},\ i=1,2,\cdots,n$$

$\Rightarrow Dx^{(k+1)}=Lx^{(k+1)}+Ux^{(k)}+b\Rightarrow x^{(k+1)}=(D-L)^{-1}Ux^{(k)}+(D-L)^{-1}b\triangleq B_Gx^{(k)}+f_G$

注意到 $x_i^{(k+1)}=\Big(b_i-\sum\limits_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j^{(k+1)}-\sum\limits_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j^{(k)}\Big)/a_{ii}=x_i^{(k)}+\Big(b_i-\sum\limits_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j^{(k+1)}-\sum\limits_{j=i}^{n}a_{ij}x_j^{(k)}\Big)/a_{ii}$

$\triangleq x_i^{(k)}+\Delta x_i$

3. 超松弛迭代法 SOR

SOR：$x_i^{(k+1)}=x_i^{(k)}+w\cdot\Delta x_i$，$w$ 为松弛因子

当 $w=1$ 时，即为高斯-塞德尔迭代法，$w>1$ 为超松弛，$w<1$ 为低松弛.

4. 收敛性分析：

$Ax=b$ 有精确解 x^*，A 非奇异 $\Leftrightarrow x=Bx+f$，$\therefore x^*=Bx^*+f$，$x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+f$

$\therefore x^*-x^{(k+1)}=B(x^*-x^{(k)})\Rightarrow\varepsilon^{(k+1)}=B\varepsilon^{(k)}=B^2\varepsilon^{(k-1)}=B^k\varepsilon^{(1)}=B^{k+1}\varepsilon^{(0)}$

$\therefore\lim\limits_{k\to+\infty}x^{(k)}=x^*\Leftrightarrow\lim\limits_{k\to+\infty}B^k=0$，$\therefore$ 需研究 B^k 的收敛性.

def.1：$A_k=(a_{ij}^{(k)})\in R^{n\times n}$，$A=(a_{ij})\in R^{n\times n}$，若有：

$\lim\limits_{k\to+\infty}a_{ij}^{(k)}=a_{ij}$，$\forall i=1,2,\cdots,n;j=1,2,\cdots,n$，则称 $\{A_k\}$ 收敛于 A，$\lim\limits_{k\to+\infty}A_k=A$

Th1: $\lim_{k\to+\infty} A_k = A \Leftrightarrow \lim_{k\to+\infty} \|A_k - A\| = 0$, $\|\cdot\|$为矩阵的任一算子范数.

pf. $\lim_{k\to+\infty} A_k = A \Leftrightarrow \lim_{k\to+\infty} \|A_k - A\|_\infty = 0 \Leftrightarrow \lim_{k\to+\infty} \|A_k - A\| = 0$

Th2: $\lim_{k\to+\infty} A_k = 0 \Leftrightarrow \forall x \in R^n$, $\lim_{k\to+\infty} A_k x = 0$

pf. "$\Rightarrow$" $\because \|A_k x\| \le \|A_k\| \cdot \|x\|$, $\because \lim_{k\to+\infty} A_k = 0 \Rightarrow \therefore \lim_{k\to+\infty} \|A_k\| = 0$,

$\therefore$ 由迫敛性: $\overset{\forall x \in R^n}{\lim_{k\to+\infty}} \|A_k x\| = 0 \Rightarrow \therefore \lim_{k\to+\infty} A_k x = 0$

"$\Leftarrow$" 令 $x = e_j = (0, \cdots 0, 1, 0, \cdots 0)'$, $\therefore A_k x = (A_k)_j$, $(A_k)_j$ 表示 A_k 的第 j 列

$\therefore \lim_{k\to+\infty} A_k e_j = 0 \Rightarrow \|(A_k)_j\|_\infty \to 0$, $k \to +\infty$, $\forall j = 1, 2, \cdots, n$

$\Rightarrow \therefore \lim_{k\to+\infty} \|A_k\|_\infty = 0 \Rightarrow \lim_{k\to+\infty} A_k = 0$

Th3: $B \in R^{n\times n}$, 则 $\lim_{k\to+\infty} B^k = 0 \Leftrightarrow B$的谱半径$\rho(B) < 1 \Leftrightarrow$ 至少存在一种矩阵范数$\|\cdot\|_\varepsilon$, s.t $\|B\|_\varepsilon < 1$

pf. (1)$\Rightarrow$(2) 反证. 若$\exists$一个B的特征值λ, s.t. $|\lambda| \ge 1$, 则$\exists x \ne 0$, s.t. $Bx = \lambda x$

$\therefore B^k x = B^{k-1}(Bx) = B^{k-1}(\lambda x) = \cdots = \lambda^k x$

$\therefore \|B^k x\| = \|\lambda^k x\| = |\lambda|^k \cdot \|x\| \nrightarrow 0$, $k \to +\infty \Rightarrow \therefore B^k \nrightarrow 0$, 矛盾

(2)$\Rightarrow$(3) $\forall \varepsilon > 0$, $\exists \|\cdot\|_\varepsilon$, s.t. $\|B\|_\varepsilon \le \rho(B) + \varepsilon$, 取 $\varepsilon = \frac{1-\rho(B)}{2}$

$\therefore \|B\|_\varepsilon \le \frac{1-\rho(B)}{2} + \rho(B) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\rho(B) < 1$.

(3)$\Rightarrow$(1) $\because \|B\|_\varepsilon < 1$. $\therefore \|B^k\|_\varepsilon \le \|B\|_\varepsilon^k \to 0$, $\therefore \lim_{k\to+\infty} \|B^k\|_\varepsilon = 0 \Rightarrow \lim_{k\to+\infty} B^k = 0$

Th4: $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 对$\forall x^{(0)}$收敛 $\Leftrightarrow \rho(B) < 1$

pf. "$\Leftarrow$" $\because \rho(B) < 1$. $\therefore \exists \|\cdot\|_\varepsilon$, s.t $\|B\|_\varepsilon < 1 \Rightarrow \therefore I - B$非奇异

$\therefore (I - B)x = f$ 有唯一解 $x^* \Rightarrow x = Bx + f$ 有唯一解 x^*

而 $\varepsilon^{(k)} = B^k \varepsilon^{(0)}$, $\because \rho(B) < 1 \Rightarrow \therefore \lim_{k\to+\infty} B^k = 0 \Rightarrow \lim_{k\to+\infty} \varepsilon^{(k)} = 0 \Rightarrow \lim_{k\to+\infty} x^{(k)} = x^*$

"$\Rightarrow$" $B^k \varepsilon^{(0)} = \varepsilon^{(k)} \to 0 \Rightarrow \therefore \forall \varepsilon^{(0)}$, $\lim_{k\to+\infty} B^k \varepsilon^{(0)} = 0 \Rightarrow \therefore \lim_{k\to+\infty} B^k = 0 \Rightarrow \rho(B) < 1$

$\therefore$ 对于Jacobi, G-S, SOR, 判断其收敛性 $\Leftrightarrow$ 判断 $J = D^{-1}(L+U)$, $G = (D-L)^{-1}U$, $L_w = (D-wL)^{-1}((1-w)D + wU)$

$\rho(J), \rho(G), \rho(L_w) < 1$

Th5: 若B的某种范数$\|B\| = q < 1$, 则迭代法收敛.

pf. $\rho(B) = \|B\| = q < 1 \Rightarrow \therefore$ 迭代法收敛

此外: $\|\varepsilon^{(k)}\| = \|x^* - x^{(k)}\| \le \|B\|^k \cdot \|x^* - x^{(0)}\| = q^k \cdot \|x^* - x^{(0)}\|$

$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| = \|(x^* - x^{(k)}) - (x^* - x^{(k+1)})\| \ge \|x^* - x^{(k)}\| - \|x^* - x^{(k+1)}\| \ge (1-q)\|x^* - x^{(k)}\|$

$\Rightarrow \therefore \|x^* - x^{(k)}\| \le \frac{1}{1-q}\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| = \frac{q}{1-q}\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$

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

def2: 严格对角占优: $|a_{ii}| > \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|$, $i=1,2,\cdots,n$, (按行)

弱对角占优: $|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|$, $i=1,2,\cdots,n$, 至少一个不等号严格成立 (按行)

def3: 可约矩阵: $A\in R^{n\times n}$, 若存在置换矩阵 P, s.t. $P^TAP=\begin{pmatrix}A_{11} & A_{12}\\ 0 & A_{22}\end{pmatrix}$, A_{11}为方阵, 则A为可约矩阵

Th6: 若A按行(列)严格对角占优或弱对角占优且不可约, 则A非奇异.

Th7: 若A按行(列)严格对角占优或弱对角占优且不可约, 则 Jacobi, G-S迭代法收敛

pf. 对G-S迭代法: 反证: 若 $\rho(B_G)\geq 1$, 即 $\exists B_G$ 的一个特征值 λ, s.t. $|\lambda|\geq 1$

$\therefore 0=|\lambda I-B_G| = |\lambda I-(D-L)^{-1}U| = |(D-L)^{-1}|\cdot|\lambda(D-L)-U| \Rightarrow \therefore |\lambda(D-L)-U|=0 \Rightarrow \lambda(D-L)-U$ 奇异.

但 $\lambda(D-L)-U=\begin{pmatrix}\lambda a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1n}\\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & a_{2,n-1} & a_{2n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots\\ \lambda a_{n1} & \lambda a_{n2} & \cdots & \lambda a_{n,n-1} & \lambda a_{nn}\end{pmatrix}$ $\therefore |\lambda a_{ii}| = |\lambda|\cdot|a_{ii}| > (\geq) |\lambda|\left(\sum_{1}^{i-1}|a_{ij}| + \sum_{i+1}^{n}|a_{ij}|\right) \geq |\lambda|\sum_{1}^{i-1}|a_{ij}| + \sum_{i+1}^{n}|a_{ij}|$

$\therefore \lambda(D-L)-U$ 与A有相同的对角占优性, 而0与非0元素与A相同 $\Rightarrow$ 由Th6, $\lambda(D-L)-U$ 可逆, 矛盾

对Jacobi迭代法: 同样地, 研究 $\lambda D-L-U$ 即可.

Th8: 若SOR迭代收敛, 则 $0<w<2$,

pf. 记SOR的迭代法的迭代矩阵为 L_w, 其特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$.

$\therefore 1>(\rho(L_w))^n \geq |\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n| = |\det(L_w)| = |\det((D-wL)^{-1}((1-w)D+wU))|$

$=|\det((D-wL)^{-1})|\cdot|\det((1-w)D+wU)| = |\det(D^{-1})|\cdot|\det((1-w)D)| = (1-w)^n$

$\Rightarrow \therefore |1-w|<1 \Rightarrow 0<w<2$

Th9: 对于 $Ax=b$, 若A为对称正定矩阵, 则 $0<w<2$ 时, SOR迭代法收敛

Th10: 对于 $Ax=b$, 若A严格对角占优或弱对角占优且不可约, 则 $0<w\leq 1$ 时, SOR迭代法收敛

pf.(Th9) 记 L_w 的特征值为 λ, 则 $\exists y\neq 0$, s.t. $L_w y=\lambda y \Rightarrow (D-wL)^{-1}((1-w)D+wU)y=\lambda y$

$\Rightarrow ((1-w)D+wU)y=\lambda(D-wL)y$, 两边与y做内积 $(1-w)(Dy,y)+w(Uy,y)=\lambda(Dy,y)-w\lambda(Ly,y)$

记 $(Dy,y)=\sum_{i=1}^{n}a_{ii}y_i^2=\sigma\ (:=\sigma)$, $-(Ly,y)=\alpha+i\beta$, $\therefore -(Uy,y)=-(L^Ty,y)=-(\overline{L^Ty})^Ty=-y^TLy=-(y,Ly)=-\overline{(Ly,y)}=\alpha-i\beta$

代入 $\lambda=\dfrac{(1-w)(Dy,y)+w(Uy,y)}{(Dy,y)-w(Ly,y)}=\dfrac{(1-w)\sigma-w(\alpha-i\beta)}{\sigma+w(\alpha+i\beta)}$

$\Rightarrow \therefore |\lambda|^2=\dfrac{(\sigma-w\sigma-w\alpha)^2+w^2\beta^2}{(\sigma+w\alpha)^2+w^2\beta^2}$ $\Rightarrow \therefore$ 分子-分母 $=(\sigma-w\sigma-w\alpha)^2-(\sigma+w\alpha)^2=-w(\sigma+2\alpha)(2-w)\sigma$
$=w(w-2)(\sigma+2\alpha)\sigma$

$\because$ A正定, $\therefore \sigma>0$; $\because 0<((D-L-U)y,y)=(Dy,y)-(Ly,y)-(Uy,y)=\sigma+2\alpha>0$, $w(w-2)<0$

$\Rightarrow \therefore$ 分子-分母 $<0 \Rightarrow |\lambda|^2<1 \Rightarrow |\lambda|<1 \Rightarrow \rho(A)<1 \Rightarrow$ 收敛

若 $\rho(B)<1$, B对称, 则 $\|\varepsilon^{(k)}\|_2=\|B^k\varepsilon^{(0)}\|_2\leq\|B\|_2^k\|\varepsilon^{(0)}\|_2 \overset{B对称}{=} (\rho(B))^k\cdot\|\varepsilon^{(0)}\|_2$

$\therefore$ 欲使 $(\rho(B))^k\leq 10^{-s} \Rightarrow k\geq\dfrac{s\cdot\ln 10}{-\ln\rho(B)} \Rightarrow \therefore \rho(B)$ 越小, k越小 $\Rightarrow \rho(B)$ 越小收敛越快 $\Rightarrow$ 选w的准则.

def: $R=-\ln\rho(B)$ 为迭代收敛速度.

解非线性方程的迭代法

非线性方程 $\begin{cases} \text{代数方程 } a_0x^n+a_1x^{n-1}+\cdots+a_{n-1}x+a_n=0 \\ \text{超越方程 } e^{-x/10}\cdot\sin 10x=0 \end{cases}$

m重根：$f(x)=(x-x^*)^m g(x)$，$|g(x^*)|\in(0,+\infty)$，则 x^* 为 $f(x)$ 的m重根，

有 $f(x^*)=f'(x^*)=f''(x^*)=\cdots=f^{(m-1)}(x^*)=0$，$f^{(m)}(x^*)\neq 0$

1. 二分法：$f(x)\in C[a,b]$，$f(a)\cdot f(b)<0$，取 $x_0=(a+b)/2$

若 $f(x_0)=0$，output x_0 & stop

若 $f(x_0)$ 与 $f(a)$ 同号，$a_1=x_0, b_1=b$；else $a_1=a$，$b_1=x_0$，…

$\therefore [a,b]\supset[a_1,b_1]\supset\cdots\supset[a_k,b_k]\supset\cdots \Rightarrow \therefore x_k=\frac{a_k+b_k}{2}\to x^*$，且 $|x_k-x^*|\le\frac{b_k-a_k}{2}=\frac{b-a}{2^{k+1}}\to 0$

二分法算法简单，收敛性有保证，但收敛速度较慢

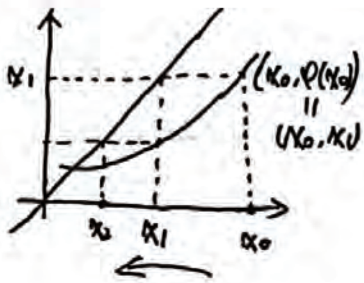
2. 不动点法：将 $f(x)=0$ 化为等价形式 $x=\varphi(x)$，$\therefore f(x^*)=0 \Leftrightarrow x^*=\varphi(x^*)$，$x^*$ 为 $\varphi(x)$ 的一个不动点

$\therefore$ 选取初值 x_0 后可构造序列：$x_1=\varphi(x_0)$，$x_2=\varphi(x_1)$，…，$x_{k+1}=\varphi(x_k)$，…

若对于 $\forall x_0\in[a,b]$，都有 $\lim\limits_{k\to+\infty}x_k=x^*$，则称迭代公式收敛，此方法为不动点收敛法。

例：$x^3-x-1=0$ 于 1.5 附近的根

$f(x)=x^3-x-1=0 \Leftrightarrow \begin{matrix}\varphi_1(x)=\sqrt[3]{x+1} \to \text{收敛} \\ \varphi_2(x)=x^3-1 \to \text{不收敛}\end{matrix}$ （初值1.5）



$\therefore$ 不动点收敛法对 $\varphi(\cdot)$ 的选择有要求

Th：若迭代函数 $\varphi(x)\in C[a,b]$，且满足：(1) $\forall x\in[a,b]$，$\varphi(x)\in[a,b]$，

(2) $\exists\, 0\le L<1$，s.t. $\forall x,y\in[a,b]$，有 $|\varphi(x)-\varphi(y)|\le L|x-y|$，

则 $\varphi(x)$ 在 $[a,b]$ 上 $\exists$ 唯一不动点 x^*

pf. 若 $\varphi(a)=a$ 或 $\varphi(b)=b$，则 $\varphi(x)$ 在 $[a,b]$ 上有不动点，

否则 $\varphi(a)>a$，$\varphi(b)<b$，构造 $g(x)=\varphi(x)-x$，$g(a)>0$，$g(b)<0$，

$\therefore$ 在 $[a,b]$ 上 $\exists x^*$，s.t. $\varphi(x^*)=x^*$，即存在不动点。

下证不动点唯一，若 $\exists\, x_1^*, x_2^*$，s.t. $x_1^*=\varphi(x_1^*)$，$x_2^*=\varphi(x_2^*)$

$|x_1^*-x_2^*|=|\varphi(x_1^*)-\varphi(x_2^*)|\le L|x_1^*-x_2^*|<|x_1^*-x_2^*|$，矛盾，即证

Th：在上述定理的条件下，对 $\forall x_0\in[a,b]$，迭代序列收敛于 x^*，且 $|x_k-x^*|\le\frac{L^k}{1-L}|x_1-x_0|$

pf. 设 x^* 为 $[a,b]$ 上唯一不动点，则 $|x_k-x^*|=|\varphi(x_{k-1})-\varphi(x^*)|\le L|x_{k-1}-x^*|\cdots\le L^k|x_0-x^*|\to 0$

$\therefore x_k\to x^*$，迭代序列收敛。且对 $\forall p\in\mathbb{Z}^+$，有：

$|x_{k+p}-x_k|\le|x_{k+p}-x_{k+p-1}|+\cdots+|x_{k+1}-x_k|\le(L^{k+p-1}+\cdots+L^k)\cdot|x_1-x_0|\le\frac{L^k}{1-L}\cdot|x_1-x_0|$

事实上还有 $|x_{k+p}-x_k|\le(L^p+L^{p-1}+\cdots+1)\cdot|x_{k+1}-x_k|\le\frac{1}{1-L}\cdot|x_{k+1}-x_k|$

推论. $\varphi(x)\in C^1[a,b]$, 若对 $\forall x\in[a,b]$, $\varphi(x)\in[a,b]$; $\exists 0\le L<1$, s.t $\forall x\in[a,b]$ 有 $|\varphi'(x)|\le L<1$

则 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上有唯一的根. 且 $\forall x_0\in[a,b]$, 迭代序列均收敛

如果 $\{x_k\}$ 在 $[a,b]$ 上均有收敛性. 则称为全局收敛性. 往往我们只考虑局部收敛性.

def. 若 $\exists$ x^* 的某个邻域 R: $|x-x^*|\le\delta$, s.t. $\forall x_0\in R$ 迭代序列均收敛于 $x^*=\varphi(x^*)$, 则称序列局部收敛

Th: x^* 为 $\varphi(x)$ 的不动点, $\varphi(x)$ 在 x^* 的某邻域内有连续导数 且 $|\varphi'(x^*)|<1$, 则迭代法局部收敛.

pf. $\varphi'(x)$ 连续, 且 $|\varphi'(x^*)|<1$, $\Rightarrow\exists$ x^* 的邻域 R: $|x-x^*|\le\delta$, 对 $\forall x\in R$, 有 $|\varphi'(x)|\le L<1$

且 $|\varphi(x)-x^*|=|\varphi(x)-\varphi(x^*)|\le L|x-x^*|<|x-x^*|\le\delta$.

$\therefore$ 对 $\forall x\in(x^*-\delta, x^*+\delta)$. 有 $\varphi(x)\in(x^*-\delta, x^*+\delta)$ $\Rightarrow\therefore$ 由以上两点, 其局部收敛

def: 设迭代过程 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 收敛于 x^*, 记误差 $e_k=x_k-x^*$, 若:

$\lim\limits_{k\to+\infty}\dfrac{e_{k+1}}{e_k^p}=C\neq0$, 则迭代过程 p 阶收敛. $p=1$ 线性收敛, $p>1$ 超线性收敛, $p=2$ 平方收敛

Th: 若 $\varphi(x)$ 在 x^* 处附近有 p 阶连续导数, 并且 $\varphi'(x^*)=\varphi''(x^*)=\cdots=\varphi^{(p-1)}(x^*)=0$, $\varphi^{(p)}(x^*)\neq0$.

则迭代过程在 x^* 附近是 p 阶收敛的.

pf. $\because\varphi'(x^*)=0<1\Rightarrow\therefore$ 迭代法局部收敛.

又 $\varphi(x_k)=\varphi(x^*)+\varphi'(x^*)\cdot(x_k-x^*)+\cdots+\varphi^{(p-1)}(x^*)\dfrac{(x_k-x^*)^{p-1}}{(p-1)!}+\dfrac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!}\cdot(x_k-x^*)^p=\cancel{x^*+}\dfrac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!}\cdot(x_k-x^*)^p$

$\Rightarrow\therefore x_{k+1}-x^*=\varphi(x_k)-x^*=\dfrac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!}(x_k-x^*)^p$

$\Rightarrow\therefore\dfrac{e_{k+1}}{e_k^p}=\dfrac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!}\Rightarrow\lim\limits_{k\to+\infty}\dfrac{e_{k+1}}{e_k^p}=\dfrac{\varphi^{(p)}(x^*)}{p!}\neq0\Rightarrow p$ 阶收敛.

$\therefore$ 如上可知: $0<|\varphi'(x^*)|<1$ 时, 线性收敛; $\varphi'(x^*)=0$, $\varphi''(x^*)\neq0$ 时, 平方收敛

3. 加速法

Aitken 加速: $x_1=\varphi(x_0)$, $x_2=\varphi(x_1)$, 若 $\varphi'(x)$ 变化不大, $\varphi'(x)\approx L$

$\therefore$ $x_1-x^*=\varphi(x_0)-\varphi(x^*)\doteq L(x_0-x^*)$

$x_2-x^*=\varphi(x_1)-\varphi(x^*)\doteq L(x_1-x^*)$ $\Rightarrow\therefore\dfrac{x_1-x^*}{x_2-x^*}=\dfrac{x_0-x^*}{x_1-x^*}$

$\Rightarrow\therefore x_1^2-2x_1x^*+x^{*2}=x_0x_2-(x_0+x_2)x^*+x^{*2}\Rightarrow(x_2-2x_1+x_0)x^*=x_0x_2-x_1^2$

$\Rightarrow\therefore x^*=\dfrac{x_0x_2-x_1^2}{x_2-2x_1+x_0}=x_0-\dfrac{(x_1-x_0)^2}{x_2-2x_1+x_0}$

$\therefore$ Aitken 加速 $\overline{x}_{k+1}=x_k-\dfrac{(\Delta x_k)^2}{\Delta^2x_k}$, 可以证明 $\lim\limits_{k\to+\infty}\dfrac{\overline{x}_{k+1}-x^*}{x_k-x^*}=0$,

即 $\{\overline{x}_k\}$ 的收敛速度比 $\{x_k\}$ 快

将 Aitken 加速法应用即可得到 Steffensen 迭代法

Steffensen迭代法：$y_k=\varphi(x_k)$，$z_k=\varphi(y_k)$，$x_{k+1}=x_k-\frac{(y_k-x_k)^2}{z_k-2y_k+x_k}$

即 $x_{k+1}=\psi(x_k)$，$\psi(x)=x-\frac{(\varphi(x)-x)^2}{\varphi(\varphi(x))-2\varphi(x)+x}$

Th：若x^*是$\psi(x)$的不动点，则x^*是$\varphi(x)$的不动点.

反之，若x^*是$\varphi(x)$的不动点，设$\varphi''(x)$存在，且$\varphi'(x^*)\neq 1$，则x^*为$\psi(x)$的不动点，且Steffensen法2阶收敛

$\Rightarrow$ ∴ Steffensen法可以使原本不收敛的变收敛；收敛的加快收敛速度.

4. 牛顿法：$f(x)=0$有近似根x_k，假定$f'(x_k)\neq 0$，

利用Taylor展开：$f(x)\approx f(x_k)+f'(x_k)(x-x_k) \Rightarrow x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$

∴牛顿法实际上也是一个迭代法，迭代函数 $\varphi(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}$

∴其局部收敛性 $\Leftrightarrow |\varphi'(x^*)|\leq L<1$?

$\varphi'(x)=1-\frac{(f'(x))^2-f(x)\cdot f''(x)}{(f'(x))^2}=\frac{f(x)\cdot f''(x)}{(f'(x))^2}$

当x^*为单根时，$f'(x)\neq 0 \Rightarrow |\varphi'(x^*)|=0<1 \Rightarrow$ ∴至少平方收敛

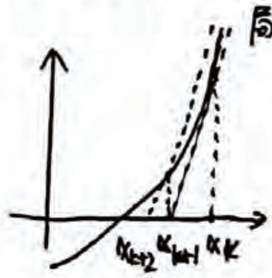
又 $\varphi''(x)=\frac{(f'\cdot f''+f f''')\cdot f'^2-f f''\cdot 2f'\cdot f''}{(f'(x))^4} \Rightarrow \varphi''(x^*)=\frac{f''\cdot (f')^3}{(f')^4}=\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\neq 0$

$\Rightarrow \lim\limits_{k\to+\infty}\frac{x_{k+1}-x^*}{(x_k-x^*)^2}=\frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}$

但是牛顿法需要求导数且需要找到合适的初值，对牛顿法进行改进

简化牛顿法：$x_{k+1}=x_k-Cf(x_k) \Rightarrow \varphi(x)=x-Cf(x) \Rightarrow |\varphi'(x)|=|1-Cf'(x)| \Rightarrow 0<Cf'(x)<2$时，公式局部收敛

取 $C=\frac{1}{f'(x_0)} \Rightarrow$ 简化牛顿法 $x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_0)}$，仅线性收敛



牛顿下山法：通过下山因子的折半使函数值递减得到

$x_{k+1}=x_k-\lambda\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$，通过$\lambda$的选取使得$|f(x_{k+1})|<|f(x_k)|$

$\begin{cases}\text{若}\lambda=0 \Rightarrow x_{k+1}=x_k \\ \text{若}\lambda=1 \Rightarrow x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}\ \text{原牛顿法}\end{cases} \Rightarrow$ $\lambda=1$，逐次折半，直至 $|f(x_{k+1})|<|f(x_k)|$

若有重根，则$f(x)=(x-x^*)^m g(x)$，则$f(x^*)=f'(x^*)=\cdots=f^{(m-1)}(x^*)=0$，$f^{(m)}(x^*)\neq 0$.

当$f'(x_k)\neq 0$时，$\varphi(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)} \Rightarrow \varphi'(x^*)=1-\frac{1}{m}$（代入$f=(x-x^*)^m g$）

$\Rightarrow$ ∴ $\varphi'(x^*)\neq 0$且$|\varphi'(x^*)|<1 \Rightarrow$ 有重根时线性收敛，使$\varphi(x)=x-m\frac{f(x)}{f'(x)}$可平方收敛，但需要知道m

若令$\mu(x)=\frac{f(x)}{f'(x)}$，若$x^*$是$f(x)=0$的m重根，则$\mu(x)=\frac{(x-x^*)g(x)}{mg(x)+(x-x^*)g'(x)}$，$x^*$是$\mu(x)=0$的单根

$\Rightarrow \varphi(x)=x-\frac{\mu(x)}{\mu'(x)}=x-\frac{f\cdot f'}{(f')^2-ff''}$ 二阶收敛

即 $x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)f'(x_k)}{(f'(x_k))^2-f(x_k)f''(x_k)}$

5. 弦截法：以 x_k 和 x_{k-1} 为插值节点，可作插值函数：

$$P_1(x)=f(x_k)+\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}(x-x_k)$$

令 $P_1(x)=0 \Rightarrow x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f(x_k)-f(x_{k-1})}(x_k-x_{k-1}) \Rightarrow$ 这相当于牛顿法中取 $f'(x_k)=\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}$

两点弦截法按 $p=\frac{1+\sqrt{5}}{2}=1.618$ 超线性收敛

$\Rightarrow$ 可推广到3点 → 抛物线法 $P_2(x)=f(x_k)+f[x_k,x_{k-1}](x-x_k)+f[x_k,x_{k-1},x_{k-2}](x-x_k)(x-x_{k-1})$

令 $P_2(x)=0 \Rightarrow x_{k+1}=\cdots\cdots$ ，$p=1.840$ 收敛

6. 非线性方程组迭代法 $\begin{cases} f_1(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0 \\ f_2(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0 \\ \vdots \\ f_n(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0 \end{cases} \Rightarrow F(X)=0 \Rightarrow X=\phi(X)$

def: $\phi: D\subset R^n\to R^n$，$\exists L\in(0,1)$，s.t. $\|\phi(Y)-\phi(X)\|\le L\|Y-X\|$，$\forall X,Y\in D_0\subset D$，

则称 ϕ 在 D_0 上是压缩映射

定理1：若 ϕ 在 D_0 上是压缩的，且 ϕ 把 D_0 映入自身，即 $\phi(X)\in D_0$，$\forall X\in D_0$，

则 ϕ 在 D_0 中有唯一不动点 $X^*=\phi(X^*)$

定理2：$\phi: D\subset R^n\to R^n$ 在 D 内有一不动点 X^* 且 ϕ 在 X^* 可导，$\rho(\phi'(X^*))=\sigma<1$

则存在开球 $S=S(X^*,\delta)\subset D$ 对 $\forall X^{(0)}\in S$，迭代序列 $\{X^{(k)}\}\to X^*$

牛顿迭代公式 $X^{(k+1)}=X^{(k)}-[F'(X^{(k)})]^{-1}F(X^{(k)})$