数值计算方法

陈鸿峥

2019.05*

目录

1 简介 **2**

1.1 误差 2

1.2 需要注意的问题 2

2 插值 **2**

2.1 拉格朗日插值 3

2.2 牛顿插值 3

2.3 埃尔米特插值 5

2.4 三次样条插值 5

3 线性方程组直接解法 **5**

3.1 高斯消元法 5

3.2 三角分解 6

3.3 LU分解 6

3.4 乔列斯基(Choleskey)分解 6

3.5 追赶法 7

3.6 分块三角分解 7

4 线性方程组迭代解法 **7**

4.1 范数与条件数 7

4.2 基本迭代法 9

5 函数逼近 **10**

5.1 内积与正交多项式 10

5.2 最佳一致逼近 12

5.3 最佳平方逼近 13

5.4 最小二乘法 13

*Build 20190520

6 数值积分与数值微分 **14**

6.1 基本公式 14

6.2 牛顿-科茨公式 16

6.3 高斯公式 17

6.4 多重积分 17

6.5 数值微分 17

7 非线性方程求根 **18**

1 简介

1.1 误差

- 原始误差：模型误差
- 观测误差：测量数据产生的误差
- 方法误差：截断误差
- 计算误差：舍入误差

1.2 需要注意的问题

- 避免相近的数相减，如$\sqrt{1001}-\sqrt{1000}$有效数字会损失，分子有理化可使误差减小。**数学上等价的公式在计算上是不等价的!**
- 避免数量级相差太大的两数相除，容易溢出
- 避免大数和小数相加减，浮点数计算要对阶
- 简化计算步骤

2 插值

定理 1 (唯一性). *n次插值多项式存在且唯一*

分析. 设n次多项式$p(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$为函数$f(x)$在$[a,b]$上$n+1$个互异节点$x_i(i=0,1,\ldots,n)$上的插值多项式，则求$p(x)$的系数$a_i$相当于解线性方程组

$$\begin{cases} a_0+a_1x_0+\cdots+a_nx_0^n=y_0 \\ a_0+a_1x_1+\cdots+a_nx_1^n=y_1 \\ \vdots \\ a_0+a_1x_n+\cdots+a_nx_n^n=y_n \end{cases}$$

其系数行列式为范德蒙特行列式$V=\prod_{i=1}^{n}\prod_{j=0}^{i-1}(x_i-x_j)$，因为$x_i$互不相同，故$V\neq 0$。进而由克莱姆法则，$a_i$解存在且唯一。

由于$p(x)$为线性空间$P_n(x)$[1]的一个点，因而其基底/插值基函数$\phi(x)$不唯一，有多种表示方法（不同的线性组合）

$$p(x)=a_0\phi_0(x)+a_1\phi_1(x)+\cdots+a_n\phi_n(x)$$

2.1 拉格朗日插值

定义 1 (拉格朗日插值基函数). 节点x_k上的插值基函数$l_k(x)$满足

$$l_k(x_k)=\begin{cases}1 & i=k\\ 0 & i\neq k\end{cases}$$

由定义知$l_k(x)$的零点为$x_i,i\neq k$，待定系数A_k

$$l_k(x)=A_k(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)$$

可求得A_k，进而得到插值基函数

$$l_k(x)=\prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n}\frac{(x-x_i)}{x_k-x_i}$$

因此拉格朗日插值函数为

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n}f(x_k)\prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n}\frac{(x-x_i)}{x_k-x_i}$$

其中$L_1(x)$称为线性插值，$L_2(x)$称为抛物线插值

误差估计

$$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i),\ \xi=\xi(x)\in(a,b)$$

2.2 牛顿插值

定义 2 (牛顿插值基函数).

$$\begin{cases}\varphi_0(x)=1\\ \varphi_j(x)=\prod_{i=0}^{j-1}(x-x_i),\ j=1,2,\ldots,n\end{cases}$$

进而牛顿插值函数为

$$N_n(x)=a_0+a_1(x-x_0)+a_2(x-x_0)(x-x_1)+\cdots=a_0+\sum_{i=1}^{n}a_i\prod_{j=0}^{i-1}(x-x_j)$$

[1]次数小于等于n的代数多项式的集合

实际上就是将x_i之后的项全部为0消掉了。

由$f(x_k)=N_n(x_k)$，对比系数可得

$$
\begin{aligned}
a_0 &= f(x_0) \\
a_1 &= \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0} \\
a_2 &= \frac{\dfrac{f(x_2)-f(x_0)}{x_2-x_0}-\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}}{x_2-x_1}
\end{aligned}
$$

定义 3 (差商). 一阶差商$f[x_i,x_k]=\dfrac{f(x_k)-f(x_i)}{x_k-x_i}$，二阶差商$f[x_i,x_j,x_k]=\dfrac{f[x_i,x_k]-f[x_j,x_k]}{x_k-x_j}$，高阶差商为

$$f[x_0,x_1,\ldots,x_{k-1},x_k]=\frac{f[x_0,x_1,\ldots,x_{k-2},x_k]-f[x_0,x_1,\ldots,x_{k-1}]}{x_k-x_{k-1}}$$

由差商定义可得以下差商表（注：下面$f_i:=f(x_i)$）

x_k	y_k	一阶	二阶	三阶
x_0	f_0			
x_1	f_1	$f[x_0,x_1]$		
x_2	f_2	$f[x_1,x_2]$	$f[x_0,x_1,x_2]$	
x_3	f_3	$f[x_2,x_3]$	$f[x_1,x_2,x_3]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3]$

并且有

$$
\begin{aligned}
a_0 &= f(x_0) \\
a_1 &= f[x_0,x_1] \\
a_2 &= f[x_0,x_1,x_2] \\
&\ \vdots \\
a_n &= f[x_0,x_1,\ldots,x_n]
\end{aligned}
$$

由误差估计的计算可得差商与导数之间的关系

$$f[x_0,x_1,\ldots,x_k]=\frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$$

可以看出，当增加一个节点时，牛顿插值只需增加一项，而拉格朗日插值需要全部重新算。

定义 4 (差分). 设已知函数$f(x)$在等距节点$x_i=x_0+ih(i=0,1,2,\ldots,n)$上的函数值为$f(x_i)=f_i$，其中$h>0$为步长，则称$\Delta f_i=f(x_i+h)-f(x_i)=f_{i+1}-f_i$为$f(x)$在$x_i$处步长为$h$的一阶向前差分。称$\Delta^2 f_i=\Delta(\Delta f_i)=\Delta f_{i+1}-\Delta f_i$为函数$f(x)$在$x_i$处的二阶向前差分。一般地$\Delta^n f_i=\Delta(\Delta^{n-1}f_i)$为函数$f(x)$在$x_i$处的$n$阶向前差分。并规定，$\Delta^0 f_i=f_i$为零阶差分。

差分与差商的关系为

$$f[x_0,x_1,\ldots,x_k]=\frac{\Delta^k f_0}{k!h^k},\ k=1,2,\ldots,n$$

则牛顿插值公式的向前差分形式为

$$N_n(x)=N_n(x_0+th)=f_0+\frac{t}{1!}\Delta f_0+\frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f_0+\cdots+\frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f_0,\, t\in[0,1]$$

类似于泰勒展开。

2.3 埃尔米特插值

不仅要求插值点的函数值$H(x_i)$与原函数的值$f(x_i)$相同，还要求它们有公切线，即$H'(x_i)=f'(x_i)$。若所有插值点都要满足上述条件，则埃尔米特(Hermite)插值多项式为$2n+1$次的。

2.4 三次样条插值

分多段，每段用三次函数逼近

三次样条条件

- 插值条件：$s_k(x_j)=y_j,\quad j=k-1,k,\quad k=1,2,\ldots,n$，共$2n$个条件
- 端点导数条件：$\lim_{x\to x_k^-}s^{(p)}(x)=\lim_{x\to x_k^+}s^{(p)}(x),\quad p=1,2,\quad k=1,\ldots,n-1$，共$2n-2$个条件
- 边界条件：
  - 第一类边界条件：$s'(x_0)=f_0', s'(x_n)=f_n'$，其中$f_0', f_n'$为给定值
  - 第二类边界条件：$s''(x_0)=f_0'', s''(x_n)=f_n''$，其中$f_0'', f_n''$为给定值，若为0，则为**自然**边界条件
  - 周期性条件：$\lim_{x\to x_0^+}s^{(p)}(x)=\lim_{x\to x_n^-}s^{(p)}(x), p=1,2$

三转角方法，用一阶导数求解；三弯矩方法，用二阶导数求解。

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & & \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & & \\ & \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ & & & & 1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix}$$

3 线性方程组直接解法

3.1 高斯消元法

即逐行做**消元**，变为上三角矩阵后**回代**

但由于浮点误差，高斯消元容易产生“大数吃小数”的现象，而达到错误的解（不稳定），如下式

$$\begin{cases} \varepsilon x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

- 列主元高斯消去法：每次选择一列中最大的元素所在行，然后与当前行交换
- 全主元消去法：每次选择矩阵中最大元素所在行，与当前行交换

3.2 三角分解

3.3 LU分解

- 杜利脱尔(Doolittle)分解：由高斯消元法，$A = L_1^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} U = LU$，其中$L$为**单位**下三角矩阵，$U$为上三角
- 克洛脱(Crout)分解：$A = LU$，其中L为下三角，U为**单位**上三角
- LDU分解：$A = LD\tilde{U}$，其中L为**单位**下三角，$D = \mathrm{diag}(u_{11}, u_{22}, \ldots, u_{nn})$，$\tilde{U} = D^{-1}U$为单位上三角

杜利脱尔分解要求对A高斯消去时，所有主元元素$a_{ii}^{(i)}$不为零

定理 2. *主元元素$a_{ii}^{(i)}$不为零的充要条件为n阶矩阵A的所有顺序主子式均不为0*

定理 3. *若A的所有顺序主子式均不为0，则矩阵A的LU分解都具有唯一性*

3.4 乔列斯基(Choleskey)分解

当A为**对称正定**矩阵时，所有顺序主子式都大于0，因而存在唯一LU分解。用LDU分解，D为非奇异的对角矩阵，由A的对称性有

$$A = LDU = U^{\mathrm{T}} D U^{\mathrm{T}}$$

又由分解的唯一性，有$L = D^{\mathrm{T}}$，得$A = LDL^{\mathrm{T}}$

设$D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n), d_i \neq 0$，则$D$的对角元素均为正数

记$D^{1/2} = \mathrm{diag}(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \ldots, \sqrt{d_n})$，则

$$A = LDL^{\mathrm{T}} = LD^{1/2} D^{1/2} L^{\mathrm{T}} = (LD^{1/2})(LD^{1/2})^{\mathrm{T}} = GG^{\mathrm{T}}$$

求解方法为平方根法。

3.5 追赶法

设n阶方程组$A\mathbf{x}=\mathbf{d}$，其中A为三对角方程

$$A=\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix},\ \mathbf{d}=\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix}$$

对矩阵A做克洛脱分解，有

$$L=\begin{bmatrix} l_1 & & & & \\ v_2 & l_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & v_{n-1} & l_{n-1} & \\ & & & v_n & l_n \end{bmatrix},\ U=\begin{bmatrix} 1 & u_1 & & & \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & u_{n=1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

进而$A=LU$，做两次回代即可

$$\begin{cases} L\mathbf{y}=\mathbf{d} \\ U\mathbf{x}=\mathbf{y} \end{cases}$$

3.6 分块三角分解

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{E} & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \mathbf{U}=\begin{bmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{G} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H} \end{bmatrix}$$

且满足$\mathbf{A}=\mathbf{LU}$，经计算有

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{CA}^{-1} & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \mathbf{U}=\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}-\mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B} \end{bmatrix}$$

其中$\mathbf{S}=\mathbf{D}-\mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}$为$\mathbf{A}$的舒尔(schur)补。

4 线性方程组迭代解法

4.1 范数与条件数

定义 5 (向量的范数)**.** 对任意n维向量$\mathbf{x}$，若对应非负实数$\|\mathbf{x}\|$，满足

1. $\|\mathbf{x}\|\geq 0$，当且仅当$\mathbf{x}=\mathbf{0}$时等号成立

2. 对任意$\alpha\in\mathbb{R}$，$\|\alpha\mathbf{x}\|=|\alpha|\cdot\|\mathbf{x}\|$

3. 对任意的n维向量$\mathbf{x}$和$\mathbf{y}$，满足三角不等式$\|\mathbf{x}+\mathbf{y}\| \le \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$

则称$\|\mathbf{x}\|$为$\mathbf{x}$的范数，其中*1*-范数、*2*-范数、无穷范数定义如下

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2}$$

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1\le i\le n} |x_i|$$

定义 6 (矩阵的范数)**.** 对于n阶方阵$\mathbf{A}$，若对应非负实数$\|\mathbf{A}\|$，满足

1. $\|\mathbf{A}\| \ge 0$，当且仅当$\mathbf{A} = \mathbf{0}$时等号成立

2. 对任意$\alpha \in \mathbb{R}$，$\|\alpha\mathbf{A}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{A}\|$

3. 对任意两个n阶方阵$\mathbf{A}$和$\mathbf{B}$，满足三角不等式$\|\mathbf{A}+\mathbf{B}\| \le \|\mathbf{A}\| + \|\mathbf{B}\|$

4. 对任意两个n阶方阵$\mathbf{A}$和$\mathbf{B}$，满足矩阵乘法要求$\|\mathbf{AB}\| \le \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{B}\|$

则称$\|\mathbf{A}\|$为方阵$\mathbf{A}$的矩阵范数。记$\rho(\mathbf{A}) = \max_{1\le i\le n} |\lambda_i|$为$\mathbf{A}$的谱半径，这里$\lambda_i$为$\mathbf{A}$的特征值，矩阵的*1*-范数、*2*-范数、无穷范数和F范数分别定义如下

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1\le j\le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\rho(A^{\mathrm{T}}A)}$$

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

$$\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|^2}$$

注意矩阵的F-范数才是向量*2*-范数的直接推广，而矩阵的*2*-范数是计算$A^{\mathrm{T}}A$的谱半径，又被称为谱范数

相容的向量范数和矩阵范数，满足

$$\|\mathbf{Ax}\| \le \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{x}\|$$

一些相容的范数如下

- 矩阵1-范数与向量1-范数
- 矩阵2-范数与向量2-范数
- 矩阵无穷范数与向量无穷范数
- 矩阵F范数与向量2-范数

定义 7 (条件数)**.** 设$\mathbf{A}$为n阶非奇异矩阵，称数$cond(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|\,\|\mathbf{A}^{-1}\|$为线性方程组$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$或矩阵$\mathbf{A}$的条件数。其对方程组的解的相对误差起到关键的控制作用

4.2 基本迭代法

给定线性方程组$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$，设$\mathbf{A}=\mathbf{M}-\mathbf{N}$，其中$\mathbf{M}$为非奇异矩阵，则原式变为

$$\mathbf{Mx}=\mathbf{Nx}+\mathbf{b}$$

左右乘上$\mathbf{M}^{-1}$，有

$$\mathbf{x}=\mathbf{M}^{-1}\mathbf{Nx}+\mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}=\mathbf{Bx}+\mathbf{g}$$

给定初始向量$\mathbf{x}^{(0)}$，按照下式迭代

$$\mathbf{x}^{(n+1)}=\mathbf{Bx}^{(n)}+\mathbf{g}$$

最终若收敛至$\mathbf{x}^\star$，则原方程得出解。实际迭代还是用

$$\mathbf{Mx}^{(k+1)}=\mathbf{Nx}^{(k)}+\mathbf{b}$$

将$\mathbf{A}$拆分成三个矩阵之和（只是将矩阵$\mathbf{A}$元素分块而已）

$$\mathbf{A}=\mathbf{D}-\mathbf{L}-\mathbf{U}$$

对角线阵$\mathbf{D}$、负的严格下三角阵$\mathbf{L}$和严格上三角阵$\mathbf{U}$

4.2.1 雅可比迭代法

取$\mathbf{M}=\mathbf{D}$和$\mathbf{N}=\mathbf{L}+\mathbf{U}$，即得雅可比迭代法

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

4.2.2 高斯-赛德尔迭代法

如果在雅可比迭代算法的第三步，将算出来的$\mathbf{x}^{(k+1)}$的分量立即投入到下一个迭代方程，则得到Gauss-Seidel迭代法

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

4.2.3 超松弛(SOR)迭代法

将GS迭代改写为

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(k+1)}&=\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Lx}^{(k+1)}+\mathbf{Ux}^{(k)}+\mathbf{b}\\&=\mathbf{x}^{(k)}+\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Lx}^{(k+1)}+\mathbf{Ux}^{(k)}-\mathbf{Dx}^{(k)}+\mathbf{b})\end{aligned}$$

等号右侧第二项为修正量，为获得更快的收敛速度，在其前面乘系数ω，即得到逐次超松弛(SOR)迭代法，其中ω为松弛因子

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

此时迭代矩阵为

$$\mathbf{B}_{SOR} = (\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1}[(1-\omega)\mathbf{D} + \omega\mathbf{U}]$$

5 函数逼近

用函数$f(x)$和$p(x)$的**最大误差**

$$\|p - f\|_\infty = \max_{a \le x \le b} |p(x) - f(x)|$$

作为度量逼近函数$p(x)$对被逼近函数$f(x)$的逼近程度。若存在一个函数序列满足

$$\lim_{n\to\infty} \|p_n(x) - f(x)\|_\infty = 0$$

则意味着序列$\{p_n(x)\}$在区间$[a,b]$上一致收敛至$f(x)$。序列$\{p_n(x)\}$对$f(x)$的逼近称为**一致逼近**。

也可用积分

$$\|p - f\|_2 = \left(\int_a^b (p(x) - f(x))^2 \, \mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{2}}$$

作为度量函数。若存在一个函数序列满足

$$\lim_{n\to\infty} \|p_n(x) - f(x)\|_2 = 0$$

则意味着序列$\{p_n(x)\}$在区间$[a,b]$上平方收敛至$f(x)$。序列$\{p_n(x)\}$对$f(x)$的逼近称为**平方逼近**。

5.1 内积与正交多项式

定义 8 (权函数)**.** 设$[a,b]$为有限或无限区间，$\rho(x)$是定义在$[a,b]$上的非负函数，$\int_a^b x^k \rho(x) \, \mathrm{d}x$对$k = 0, 1, \ldots$都存在，且对非负的$f(x) \in C[a,b]$[2]，若$\int_a^b f(x)\rho(x) \, \mathrm{d}x = 0$，则$f(x) \equiv 0$，称$\rho(x)$为$[a,b]$上的权函数，其刻画了点$x$在$[a,b]$上的重要性

定义 9 (内积)**.** 设$f(x), g(x) \in C[a,b]$，$\rho(x)$为$[a,b]$上的权函数，则函数$f(x)$和$g(x)$的内积为

$$\langle f, g\rangle := \int_a^b \rho(x)f(x)g(x) \, \mathrm{d}x$$

定义了内积的线性空间称为内积空间。内积需满足

1. $\langle f, g\rangle = \langle g, f\rangle$
2. $\langle c_1 f + c_2 g, h\rangle = c_1\langle f, h\rangle + c_2\langle g, h\rangle$, c_1, c_2为常数
3. $\langle f, f\rangle \ge 0 \iff f \equiv 0, \langle f, f\rangle = 0$

[2] $C[a,b]$表示区间$[a,b]$上连续函数的全体

定义 10 (范数). 对内积空间$C[a,b]$中的每一个函数$f(x)$，都赋予一个数值

$$\|f\| = \sqrt{\int_a^b \rho(x)[f(x)]^2 \, \mathrm{d}x}$$

范数需满足

1. $\|f\| \geq 0$，当且仅当$f \equiv 0$时，$\|f\| = 0$
2. $\|cf\| = |c| \cdot \|f\|$，c是常数
3. $\|f+g\| \leq \|f\| + \|g\|$

正交函数系

定义 11 (正交). 设$f(x), g(x) \in C[a,b]$，$\rho(x)$为$[a,b]$上的权函数，若内积

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) \, \mathrm{d}x = 0$$

则称$f(x), g(x)$在$[a,b]$上带权$\rho(x)$正交

5.1.1 勒让德多项式

勒让德(Legendre)多项式是区间$[-1,1]$上权函数$\rho(x)=1$的正交多项式

$$P_0(x) = 1, \qquad P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n$$

勒让德多项式有许多重要的性质

1. 正交性

$$\langle P_n, P_m \rangle = \int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) \, \mathrm{d}x = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ \frac{2}{2n+1} & m = n \end{cases}$$

2. 递推公式

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x), P_0(x) = 1, P_1(x) = x$$

5.1.2 切比雪夫多项式

切比雪夫(Chebyshev)多项式为区间$[-1,1]$上关于权函数$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$的正交多项式

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

1. 正交性

$$\langle T_n, T_m \rangle = \int_{-1}^1 \frac{T_n(x) P_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} \, \mathrm{d}x = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ \frac{\pi}{2} & m = n \neq 0 \\ \pi & m = n = 0 \end{cases}$$

分析. 令$x=\cos\theta$，由三角函数正交性[3]即得结论

2. 递推公式

$$T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x),T_0(x)=1,T_1(x)=x$$

分析. 同样三角代换$x=\cos\theta$，并结合和差化积即得结论

3. 奇偶性

$$T_n(-x)=(-1)^nT_n(x)$$

4. $T_n(x)$在$(-1,1)$内的n个零点为$x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi$，在$[-1,1]$上有$n+1$个极值点$y_k=\cos\frac{k}{n}\pi$
5. $T_n(x)$的最高次幂x^n的系数为$2^{n-1},n\geq 1$

5.1.3 其他正交多项式

1. 拉盖尔(Laguerre)多项式
2. 埃尔米特(Hermite)多项式

5.2 最佳一致逼近

定义 12. 设$f(x)\in\mathcal{C}[a,b]$，以及多项式序列$p_n(x)$，若$\forall\varepsilon,\exists N,n>N$，不等式

$$\max_{a\leq x\leq b}|p_n(x)-f(x)|<\varepsilon$$

成立，则称多项式$p_n(x)$在$[a,b]$上一致逼近于$f(x)$

定义 13. 若$\exists x_0\in[a,b]$，使得

$$|p(x_0)-f(x_0)|=\mu=\|p-f\|_\infty=\max_{a\leq x\leq b}|p(x)-f(x)|$$

则称x_0是$p(x)$关于$f(x)$的正/负偏差点

定理 4 (Chebyshev)**.** $p_n^\star(x)\in P_n$是$f(x)\in\mathcal{C}[a,b]$的最佳一致逼近多项式的充分必要条件是：在$[a,b]$上至少有$n+2$个交替为正负的偏差点，即至少有$n+2$个点$a\leq x_1<x_2\cdots<x_{n+2}\leq b$，使得

$$p_n^\star(x_k)-f(x_k)=(-1)^k\sigma\left\|f-p_n^\star\right\|_\infty,\ \sigma=\pm1,\ k=1,2,\ldots,n+2$$

上述点$\{x_k\}_1^{n+2}$称为切比雪夫交错点组

线性最佳一致逼近：设$f(x)$在$[a,b]$上有二阶导数，且$f''(x)$在$[a,b]$上不变号，$p_1(x)=a_0+a_1x$为线性最佳一致逼近，其中

$$\begin{cases}a_0=\dfrac{1}{2}(f(a)+f(x_2))-\dfrac{a+x_2}{2}\dfrac{f(b)-f(a)}{b-a} & f'(x_2)=a_1\\ a_1=\dfrac{f(b)-f(a)}{b-a}\end{cases}$$

[3]数学分析傅里叶级数一节，三角函数系$\{1,\cos x,\sin x,\ldots,\cos nx,\sin nx,\ldots\}$中任意两个不同函数在$[-\pi,\pi]$都正交

即拟合直线的斜率与连接a,b两点的割线斜率相同(Lagrange切线，x_2为切点)，且过a和x_2的中点。

5.3 最佳平方逼近

定义 14 (最佳平方逼近)**.** 设$f(x)\in C[a,b]$，如果存在$s^\star(x)\in\varphi$，使

$$\int_a^b \rho(x)[f(x)-s^\star(x)]^2\ \mathrm{d}x=\min_{s(x)\in\varphi}\int_a^b \rho(x)[f(x)-s(x)]^2\ \mathrm{d}x$$

则称$s^\star$为$f(x)$在集合φ中的最佳平方逼近函数。若$\varphi=P_n=\mathrm{Span}\{1,x,\ldots,x^n\}$，则$s^\star(x)$为$f(x)$的$n$次最佳平方逼近多项式。

$$G_n=\begin{bmatrix}\langle\varphi_0,\varphi_0\rangle & \langle\varphi_0,\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_n\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle\varphi_n,\varphi_0\rangle & \langle\varphi_n,\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_n\rangle\end{bmatrix}$$

希尔伯特(Hilbert)矩阵

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

法方程为

$$H_{n+1}\mathbf{a}=\mathbf{d}$$

解为$\mathbf{a}=\mathbf{a}^\star$，进而得到最佳平方逼近式$p_n^\star(x)$

5.4 最小二乘法

拟合函数为

$$\sum_{j=0}^n a_j\varphi_j(x)$$

$\varphi_i(x)$为基函数，且线性无关，求解下面法方程

$$\begin{bmatrix}\langle\varphi_0,\varphi_0\rangle & \langle\varphi_0,\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_n\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle\varphi_n,\varphi_0\rangle & \langle\varphi_n,\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_n\rangle\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\ \vdots\\ a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\langle f,\varphi_0\rangle\\ \vdots\\ \langle f,\varphi_n\rangle\end{bmatrix}$$

其中

$$\begin{cases}\langle\varphi_j,\varphi_k\rangle=\sum\limits_{i=0}^m\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)\\ \langle f,\varphi_k\rangle=\sum\limits_{i=0}^m f(x_i)\varphi_k(x_i)\end{cases}$$

特别地，如果用代数多项式拟合，即取

$$\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\} = \{1, x, \ldots, x^n\}$$

有法方程

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^m 1 & \sum_{i=1}^m x_i & \cdots & \sum_{i=1}^m x_i^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^m x_i^n & \sum_{i=0}^m x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=0}^m x_i^{2n} \end{bmatrix}$$

例 1. 用最小二乘法求下面数据的二次拟合$y = a\theta + b\theta^2$

θ	1	2	3	4
f	0.8	1.5	1.8	2.0

分析. 注意基底分别为$\varphi_1(x) = \theta, \varphi_2(x) = \theta^2$，则

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^4 \theta_i^2 & \sum_{i=1}^4 \theta_i^3 \\ \sum_{i=1}^4 \theta_i^3 & \sum_{i=1}^4 \theta_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^4 \theta_i f_i \\ \sum_{i=1}^4 \theta_i^2 f_i \end{bmatrix}$$

代入数据可解得

$$\begin{cases} a = 0.9491 \\ b = -0.11274 \end{cases}$$

6 数值积分与数值微分

只要$\max\limits_{a \le x \le b} |f(x) - P_n(x)| \le \varepsilon$，就有误差估计

$$\left| \int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x - \int_a^b P_n(x)\ \mathrm{d}x \right| \le (b-a)\varepsilon$$

6.1 基本公式

- 中点公式

$$I = \int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$
$$R = \frac{1}{24}(b-a)^3 f''(\xi)$$

- 梯形公式（一次插值）

$$I = \int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx \frac{1}{2}(b-a)[f(a) + f(b)]$$
$$R = -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\xi)$$

- 辛普森公式（二次插值）

$$
\begin{aligned}
I &= \int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx \frac{1}{6}(b-a)\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \\
R &= -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi)
\end{aligned}
$$

分析. 误差公式的推导通常**在某一点处展开**，然后结合**积分第一中值定理**计算。如下例计算中点公式误差，由泰勒公式

$$
f(x)=f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)+\frac{1}{2}f''(\eta(x))\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2, \eta(x)\in(a,b)
$$

左右两边积分，连续用两次积分第一中值定理有

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x &= \int_a^b f\left(\frac{a+b}{2}\right)\ \mathrm{d}x + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\int_a^b\left(x-\frac{a+b}{2}\right)\ \mathrm{d}x+\frac{1}{2}\int_a^b f''(\eta(x))\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2\ \mathrm{d}x, \eta(x)\in(a,b) \\
&= (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)+0+\frac{1}{2}f''(\xi)\int_a^b\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2\ \mathrm{d}x, \xi\in(a,b) \\
&= \frac{1}{24}(b-a)^3
\end{aligned}
$$

通常记

$$
I[f]=\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i) = Q[f]
$$

为求积公式，其中x_i为求积节点，ω_i为求积系数，误差/余项则记为

$$
R[f]=I[f]-Q[f]
$$

定义 15 (代数精度)**.** 对**所有**次数小于等于m的多项式$f(x)$，等式

$$
\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)
$$

成立，但对于$m+1$次的某个多项式不精确成立，则称该求积公式代数精度为m次。

对于使代数精度尽可能高的题目，都是令$f(x)=1,x,x^2,\ldots$（相当于取特殊值），然后左右两边相等解方程组。

记

$$
x_{i+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(x_i+x_{i+1})
$$

由定积分性质

$$
\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\ \mathrm{d}x
$$

进而每一个小段都可以用前面的基本公式，进而得到复合积分公式。记$h=\frac{b-a}{n}$，则

- 复合中点公式

$$M_n := \sum_{i=0}^{n-1} hf\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right)$$

$$R_M = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{24} h^3 f''(\xi_i)$$

- 复合梯形公式

$$T_n := \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)]$$

$$R_T = -\frac{1}{12}(b-a)h^2 f''(\eta), \eta \in (a,b)$$

- 复合辛普森公式

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

$$R_S = -\frac{1}{2880}(b-a)h^4 f^{(4)}(\eta)$$

龙贝格(Romberg)求积方法

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

可证$T_n^{(m)}(m \leq n)$的计算精度为$O(h^{2m})$

6.2 牛顿-科茨公式

直接用n次的拉格朗日函数代替被积函数，即得牛顿-科茨(Newton-Cotes)公式

$$\begin{aligned} Q &= (b-a)\sum_{i=0}^{n} \frac{(-1)^{n-i}}{ni!(n-i)!}\left(\int_0^n \Pi_{j=0,j\neq i}^{n}(t-j)\ \mathrm{d}t\right) f(x_i) \\ &= \sum_{i=0}^{n}(b-a)C_i^{(n)} f(x_i) \\ &= \sum_{i=0}^{n}\omega_i f(x_i) \end{aligned}$$

其中$C_i^{(n)}$为科茨系数，有以下性质

- $\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} = 1$
- $C_i^{(n)}$对i有对称性：$C_i^{(n)} = C_{n-1}^{(n)}$
- $n \geq 8$科茨系数有正有负，求积公式稳定性得不到保证，故一般不采用太高阶

定理 5. 当n为奇数时，牛顿-科茨公式代数精度至少为n次；而当n为偶数时，代数精度至少为$n+1$次

6.3 高斯公式

前面的方法都基于等分节点，而高斯公式则基于**非等分**节点

定义 16. *若对于节点$x_i \in [a,b]$及求积系数ω_i，求积公式*

$$I[f] = \int_a^b \rho(x) f(x) \, \mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} \omega_i f(x_i)$$

的代数精度为$2n+1$，则称节点x_i为高斯点，ω_i为高斯系数

定理 6. *x_i是求积公式的高斯点的充分必要条件是，多项式$\Pi(x) = \Pi_{i=0}^{n}(x - x_i)$与任意次数不超过$n$的多项式$q(x)$关于权函数$\rho(x)$正交，即*

$$\int_a^b \rho(x) \Pi(x) q(x) \, \mathrm{d}x = 0$$

几种常见的高斯公式如下

1. 高斯-勒让德(Legendre)多项式：$\rho \equiv 1, [a,b] = [-1,1]$
2. 高斯-切比雪夫公式：$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, [a,b] = [-1,1]$
3. 高斯-拉盖尔公式：$\rho(x) = \mathrm{e}^{-x}, [a,b] = [0,\infty)$
4. 高斯-埃尔米特(Hermite)公式：$\rho(x) = \mathrm{e}^{-x^2}, (a,b) = (-\infty,+\infty)$

第一步都先变换积分区间，然后查表代入x_i和ω_i

6.4 多重积分

记ω_i, ω_j分别为x, y方向的求积系数

$$I = \iint_O mega f(x,y) \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \approx \sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{m} \omega_{ij} f(x_i, y_j)$$

6.5 数值微分

利用拉格朗日函数可以做线性、二次和高次插值，得到微分近似公式

两点公式：向前差商公式和向后差商公式，误差均为$O(h)$，精度都一阶

$$\begin{cases} f'(x_0) = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi), \xi \in (x_0, x_1) \\ f'(x_1) = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi), \xi \in (x_0, x_1) \end{cases}$$

三点求导公式：其中第二条为中心差商公式，精度均为二阶

$$\begin{cases} f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi) \\ f'(x_1) = \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)] - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi) \\ f'(x_2) = \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi) \end{cases}$$

7 非线性方程求根

对于下式，分别取$r = 1, 2, 3$时为线性收敛、平方收敛和立方收敛，当$r \in (1, 2)$时为超线性收敛

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^r} = C,\ C > 0$$

- 二分法：如果指定精度为ε，则最多需要迭代步数为

$$k = \lceil \log_2 \frac{b-a}{\varepsilon} \rceil$$

- 不动点法：$x^\star = \phi(x^\star)$

定理 7. 设一元函数$\phi(x)$在包含区间$[a, b]$的开区间上一阶连续可导，且

- $\forall x \in [a, b]:\ \phi(x) \in [a, b]$
- $\exists L \in [0, 1), \forall x \in [a, b]:\ |\phi'(x)| \le L$

则有下列结论成立：

- $\forall x_0 \in [a, b]$，由$x_{k+1} = \phi(x_k)$产生的迭代序列$\{x_k\}$必然收敛于函数$\phi(x)$在区间$[a, b]$上的唯一不动点，即$x^\star = \phi(x^\star)$
- 序列$\{x_k\}$的收敛速度估计

$$|x_k - x^\star \le \frac{1}{1-L}|x_{k+1} - x_k|$$

和

$$|x_k - x^\star \le \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0|$$

迭代加速：利用导数估计$\phi'(\xi) \approx L$，得到

$$\bar{\phi(x)} = \frac{\phi(x) - Lx}{1-L}$$

为新的不动点函数

牛顿法：下式的不动点迭代方法

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

牛顿下山法：

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

割线法：

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