数值计算方法

陈鸿峥

2019.07*

目录

*Build 20190702

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

定义 1 (误差限). 绝对误差限

$$|\Delta x| = |x - \bar{x}| \leq \varepsilon$$

相对误差限

$$|\delta x| = \frac{|x - \bar{x}|}{x} \leq \varepsilon_r$$

设十进制数有以下**标准形式**：

$$x = \pm 10^m \times 0.x_1 x_2 \cdots x_n x_{n+1} \cdots = 10^m \cdot a$$

其中$m \in \mathbb{Z}, \{x_i\} \subset \{0, 1, 2, \ldots, 9\}, x_1 \neq 0, |a| \in [0, 1)$，即有效数字的表示法，除了整数位，小数位首位不能为0。

对x四舍五入保留n位数字，得到近似值$\bar{x}$：

$$\bar{x} = \begin{cases} \pm 10^m \times 0.x_1 x_2 \cdots x_n & x_{n+1} \leq 4 \\ \pm 10^m \times 0.x_1 x_2 \cdots (x_n + 1) & x_{n+1} \geq 5 \end{cases}$$

进而，四舍五入近似数误差限满足（相邻两个小数之间，故取一半）

$$|x-\bar{x}| \leq 10^m \times \left(\frac{1}{2} \times 10^{-n}\right) = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

例 1. 已知$\sqrt{7}$可由下述迭代公式计算

$$\begin{cases} x_{k+1} = \dfrac{1}{2}\left(x_k + \dfrac{7}{x_k}\right) & ,k=0,1,2,\ldots \\ x_0 = 2 \end{cases}$$

若x_k是$\sqrt{7}$是具有n位有效数字的近似值，证明：x_{k+1}具有$2n$位有效数字的近似值

分析. 用计算器算得

$$\sqrt{7} = 10^1 \times 0.2645\cdots$$

故

$$|x_k - \sqrt{7}| \leq \frac{1}{2} \times 10^{1-n}$$

注意到*(AM-GM)*

$$x_{k+1} = \frac{1}{2}\left(x_k + \frac{7}{x_k}\right) \geq \sqrt{7}$$

故

$$|x_{k+1} - \sqrt{7}| = \frac{1}{2x_k}(x_k - \sqrt{7})^2 \leq \frac{1}{2\sqrt{7}}|x_k - \sqrt{7}|^2 \leq \frac{1}{2\sqrt{7}} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot 10^{1-n}\right)^2 \leq \frac{1}{2} \cdot 10^{1-2n}$$

定义 2 (有效数字)**.** 若x的近似值$\bar{x}$有标准形式，且满足上述四舍五入误差限，则称$\bar{x}$有n位有效数字，$\bar{x}$为有效数（全由有效数字组成）

注意：由于有效数本身就体现了误差限（末位数单位的一半），故有效数末尾不能随便添加0。

1.2 需要注意的问题

- 如果舍入误差在整个运算过程中能够得到有效控制或舍入误差的增长不影响产生可靠的结果，则称该算法是**数值稳定**的
- 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，如海伦-秦九韶算法

2 线性方程组直接解法

2.1 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

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

为避免求解过程中不稳定的现象，可采用下列两种方法

- 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

2.2 三角分解

2.2.1 LU分解与LDU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

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -m_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -m_{n1} & \cdots & -m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

  其中，$m_{ij} = -a_{ij}/a_{jj}$
- 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，$D = \mathrm{diag}(u_{11}, u_{22}, \ldots, u_{nn})$（易知$D^{-1} = \mathrm{diag}(1/u_{11}, 1/u_{22}, \ldots, 1/u_{nn})$），$\tilde{U} = D^{-1}U$为**单位**上三角

实际上，由LDU分解，$A = L(D\tilde{U})$可得杜利脱尔分解，$A = (LD)\tilde{U}$可得克洛脱分解

例 2. *用Doolittle分解解方程组*

$$\begin{cases} x_1 + x_3 & = 5 \\ x_2 + x_4 & = 3 \\ x_1 + 2x_2 + 4x_3 + 3x_4 & = 17 \\ x_2 + 3x_4 & = 7 \end{cases}$$

分析. 由题设可得系数矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 3 \\ 0 & 1 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

进而得到LU分解

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

由$L\mathbf{y} = \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 5 & 3 & 17 & 7 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$回代，有

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 5 & 3 & 6 & 4 \end{bmatrix}$$

再对$U\mathbf{x} = \mathbf{y}$回代有

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 11/3 & 1 & 4/3 & 2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$$

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 1. 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 2. 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

2.2.2 乔列斯基分解

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，U为单位上三角，由A的对称性有

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

又由分解的唯一性，有$L = U^{\mathrm{T}}$，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

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

式中G是对角元素均大于0的**下三角**矩阵，称该分解为正定矩阵A的乔列斯基(Choleskey)分解。

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} g_{ik}(g^{\mathrm{T}})_{kj} = \sum_{k=1}^{i} g_{ik}g_{jk} \implies \begin{cases} g_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{ik}^2} \\ g_{ji} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{ik}g_{jk} \right) \Big/ g_{ii} \quad j = i+1, i+2, \ldots, n \end{cases}$$

注意上式只不过是$A = GG^{\mathrm{T}}$的显式表达。

若正定矩阵已经有了乔列斯基分解$A = GG^{\mathrm{T}}$，则原线性方程组可转化为

$$\begin{cases} G\mathbf{y} = \mathbf{b} \\ G^{\mathrm{T}}\mathbf{x} = \mathbf{y} \end{cases}$$

从而得到计算公式

$$\begin{cases} y_i = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} g_{ij} y_j \right) \Big/ g_{ii}, \qquad i = 1, 2, \ldots, n \\ x_i = \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} g_{ji} x_j \right) \Big/ g_{ii}, \qquad i = n, n-1, \ldots, 1 \end{cases}$$

该求解方法称之为**平方根法**。

2.3 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

$$A = LU = \begin{bmatrix} l_1 & l_1 u_1 & & & \\ v_2 & v_2 u_1 + l_2 & l_2 u_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & v_{n-1} & v_{n-1} u_{n-2} + l_{n-1} & l_{n-1} u_{n-1} \\ & & & v_n & v_n u_{n-1} + l_n \end{bmatrix}$$

做两次回代即可

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

得到追赶法

1. （追）对$i=1,2,\ldots,n-1$做

$$\begin{cases} a_i = v_i \\ b_i = v_i u_{i-1} + l_i \\ c_i = l_i u_i \\ d_i = y_{i-1} a_i + y_i l_i \end{cases} \implies \begin{cases} l_i = b_i - a_i u_{i-1} \\ y_i = (d_i - y_{i-1} a_i)/l_i \\ u_i = c_i / l_i \end{cases}$$

这里，置$u_0 = y_0 = a_1 = 0$

2. （追）$l_n = b_n - a_n u_{n-1}, y_n = (d_n - y_{n-1} a_n)/l_n$
3. （赶）$x_n = y_n$
4. （赶）对$i = n-1, \ldots, 2, 1$做

$$x_i = y_i - u_i x_{i+1}$$

为方便记忆，将LU两个矩阵整合

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

2.4 分块三角分解

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

且满足$A = LU$，经计算有

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

其中$S = D - CA^{-1}B$为A的舒尔(schur)补。

3 线性方程组迭代解法

3.1 范数与条件数

定义 3 (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. 正定性：$\|\mathbf{x}\| \geq 0$，当且仅当$\mathbf{x} = \mathbf{0}$时等号成立
2. 数乘：对任意$\alpha \in \mathbb{R}$，$\|\alpha\mathbf{x}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{x}\|$
3. 三角不等式：对任意的n维向量$\mathbf{x}$和$\mathbf{y}$，满足$\|\mathbf{x}+\mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$

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 4 (矩阵的范数). 对于n阶方阵A，若对应非负实数$\|A\|$，满足

1. $\|A\|\ge 0$，当且仅当$A=\mathbf{0}$时等号成立
2. 对任意$\alpha\in\mathbb{R}$，$\|\alpha A\|=|\alpha|\cdot\|A\|$
3. 对任意两个n阶方阵A和B，满足三角不等式$\|A+B\|\le\|A\|+\|B\|$
4. 对任意两个n阶方阵A和B，满足矩阵乘法要求$\|AB\|\le\|A\|\cdot\|B\|$

则称$\|A\|$为方阵A的矩阵范数。记$\rho(A)=\max_{1\le i\le n}|\lambda_i|$为$A$的谱半径，这里$\lambda_i$为$A$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

$$\|A\|_1=\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$$
$$\|A\|_2=\sqrt{\rho(A^{\mathrm{T}}A)}$$
$$\|A\|_\infty=\max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$
$$\|A\|_F=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2}$$

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

定义 5 (向量范数与矩阵范数相容). 向量范数与矩阵范数相容，则满足

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

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

例 3. 证明：对于矩阵范数，如果$\|A\|<1$，则

$$\left\|(I+A)^{-1}\right\|\le\frac{1}{1-\|A\|}$$

分析. 首先证明$I+A$为非奇异矩阵，若不然，$(I+A)\mathbf{x}=\mathbf{0}$有非零解$\mathbf{x}\neq\mathbf{0}$，即$\mathbf{x}=-A\mathbf{x}$。两侧取向量范数有

$$\|\mathbf{x}\|=\|A\mathbf{x}\|\leq\|A\|\cdot\|\mathbf{x}\|$$

由于$\|\mathbf{x}\|\neq 0$，所以$\|A\|\geq 1$，与题设矛盾。
由$(I+A)^{-1}(I+A)=I$得到

$$(I+A)^{-1}=I-(I+A)^{-1}A$$

两边取矩阵范数，有

$$\left\|(I+A)^{-1}\right\|\leq 1+\left\|(I+A)^{-1}\right\|\cdot\|A\|$$

故原式成立

定义 6 (条件数). 设A为n阶非奇异矩阵，称数$\mathrm{cond}(A)=\|A\|\left\|A^{-1}\right\|$为线性方程组$A\mathbf{x}=\mathbf{b}$或矩阵$A$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
如果A对称正定，则有

$$\mathrm{cond}_2(A)=\lambda_{\max}(A)/\lambda_{\min}(A)$$

分析. 考虑方程$A\mathbf{x}=\mathbf{b}$，在方程组右端有一个小扰动δb，则解$\mathbf{x}$产生一个扰动$\delta\mathbf{x}$，即

$$A(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x})=\mathbf{b}+\delta\mathbf{b}$$

于是有

$$\delta\mathbf{x}=A^{-1}\delta\mathbf{b}$$

两边取范数有

$$\|\delta\mathbf{x}\|\leq\left\|A^{-1}\right\|\|\delta\mathbf{b}\|$$

在原式中取范数有

$$\|\mathbf{b}\|=\|A\|\|\mathbf{x}\|$$

上面两条不等式相乘，整理得

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}\leq\|A\|\left\|A^{-1}\right\|\frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

进而得到扰动变化与条件数相关

条件数满足以下四条性质

- 对于任意n阶非奇异矩阵A，$\mathrm{cond}(A)\geq 1$成立
- 对于任意n阶非奇异矩阵A及任意非零常数c，$\mathrm{cond}(cA)=\mathrm{cond}(A)$成立
- 对于任意正交矩阵A，有$\mathrm{cond}_2(A)=1$
- 对于任意n阶非奇异矩阵A及任意n阶正交矩阵P，有$\mathrm{cond}_2(PA)=\mathrm{cond}_2(AP)=\mathrm{cond}_2(A)$

一类十分典型的病态矩阵是希尔伯特矩阵H_n，其条件数$\mathrm{cond}_2(H_n)\approx\mathrm{e}^{3.5n}$，病态非常严重

3.2 基本迭代法

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

$$M\mathbf{x}^{(k+1)}=N\mathbf{x}^{(k)}+\mathbf{b}$$

将A拆分成三个矩阵之和（只是将矩阵A元素分块而已）

$$A=D-L-U$$

对角线阵D、负的严格下三角阵L和严格上三角阵U

$$D=\mathrm{diag}(a_{11},a_{22},\ldots,a_{nn})$$
$$L=-\begin{bmatrix}0&0&\cdots&0\\a_{21}&0&\cdots&0\\\vdots&\ddots&\ddots&\vdots\\a_{n1}&\cdots&a_{n,n-1}&0\end{bmatrix}$$
$$U=-\begin{bmatrix}0&a_{12}&\cdots&a_{1n}\\\vdots&\ddots&\ddots&\vdots\\0&\ddots&\ddots&a_{n-1,n}\\0&0&\cdots&0\end{bmatrix}$$

3.2.1 雅可比迭代法

取$M=D$和$N=L+U$，即得雅可比迭代法

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

可以得到迭代格式

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

定理 3. *若A是对称正定矩阵，则雅可比迭代收敛的充要条件是$2D-A$也是对称正定矩阵*

3.2.2 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

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

可以得到迭代格式

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

将原迭代格式

$$M\mathbf{x}^{(k+1)} = N\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}$$

变为

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = B\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{g}$$

其中，$B = M^{-1}N$，$\mathbf{g} = M^{-1}\mathbf{b}$

定理 4. 对于上述迭代格式，给定任意初值$\mathbf{x}^{(0)}$，有下列收敛结果和误差估计：

1. 迭代格式收敛的充要条件为谱半径$\rho(B) < 1$
2. 如果$\|B\| < 1$，则有估计

$$\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{\star}\right\| \leq \frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|}\left\|\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(0)}\right\|$$

和

$$\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{\star}\right\| \leq \frac{\|B\|}{1 - \|B\|}\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\right\|$$

定义 7 (不可约)**.** 一个每行每列仅有唯一的非零元1的方阵称为排列矩阵。设A是$n \geq 2$阶方阵，如果存在n阶排列矩阵P，使

$$P^{\mathrm{T}}AP = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ \mathbf{0} & A_{22} \end{bmatrix}$$

则称A为可约矩阵，否则为不可约阵
简单来说，就是能否交换矩阵的行列使其变为上三角矩阵

定义 8 (对角占优)**.** 设A是n阶方阵，若A满足

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|,\ i = 1, 2, \ldots, n$$

且其中至少有一个严格不等式成立，则称A是弱对角占优；若每一个不等式都是严格不等式，则称A是（行）严格对角占优

定理 5. 若A是严格对角占优或不可约弱对角占优矩阵，则雅可比迭代和GS迭代都收敛

3.2.3 超松弛(SOR)迭代法

将GS迭代改写为

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

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

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(k+1)} &= \mathbf{x}^{(k)} + \omega D^{-1}(L\mathbf{x}^{(k+1)} + U\mathbf{x}^{(k)} - D\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}) \\ &= (D - \omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U]\mathbf{x}^{(k)} + \omega(D - \omega L)^{-1}\mathbf{b} \qquad \text{将}D\text{乘回左边再化简}\end{aligned}$$

可以得到迭代格式

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

记忆这些迭代格式只需理解清楚L, U, D的含义即可，然后看每一行(i)的迭代，L是下三角，那么从第1列算到$i-1$列，其他类似。

定理 6. *SOR迭代收敛的必要条件是$\omega \in (0,2)$*

定理 7. *设系数矩阵A对称正定*[1]*，则$0 < \omega < 2$时SOR迭代收敛*

三种迭代法的迭代矩阵（注意到$U + A = D - L$）

$$\begin{aligned} B_J &= D^{-1}(L+U) = I - D^{-1}A \\ B_G &= (D-L)^{-1}U = I - (D-L)^{-1}A \\ B_{SOR} &= (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U] \end{aligned}$$

4 多项式插值

关于函数表达式，有以下三个问题：

1. 给定一系列$\{x_i, y_i\}$，给出函数过这些点，进而可以计算其他位置的值（插值方法）
2. 计算函数f非常麻烦，找到f一个简单求值的合适逼近（连续函数逼近）
3. 若$\{x_i, y_i\}$存在误差，找到公式近似表示这些数据（离散函数逼近）

定理 8 (唯一性). *n次插值多项式存在且唯一*

注意：过$n+1$个点的插值多项式并不唯一，因过$n+1$个节点的插值多项式不一定是n次（如后面提到的埃尔米特多项式）

分析. *设n次多项式$p(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$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*

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + \cdots + a_n x_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + \cdots + a_n x_1^n = y_1 \\ \vdots \\ a_0 + a_1 x_n + \cdots + a_n x_n^n = y_n \end{cases}$$

[1]用顺序主子式全为正判定

其系数行列式为范德蒙特(*Vandermonde*)行列式

$$V = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{i=1}^{n}\prod_{j=0}^{i-1}(x_i - x_j) = \prod_{1\le i<j\le n}(x_i - x_j)$$

，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，从而$p(x)$被唯一确定

由于$p(x)$为线性空间$P_n(x)$[2]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）

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

4.1 拉格朗日插值

定义 9 (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（$n+1$个结点插值成n次L_n多项式）

定理 9. *Lagrange*插值基函数之和为1

分析. 取$f(x) = 1$，对$f(x)$进行插值，由*Lagrange*插值函数的唯一性有

$$\sum_{i=0}^{n} l_i(x) \equiv 1$$

[2]次数小于等于n的代数多项式的集合

定理 10 (Lagrange函数的误差估计).

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

分析. 设$R_n(x)=f(x)-L_n(x)$，则在节点x_i上有

$$R_n(x_i)=f(x_i)-L_n(x_i)=0, \qquad i=0,1,\ldots,n$$

即$R_n(x)$在$[a,b]$上至少有$n+1$个零点，故有

$$R_n(x)=K(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)=K(x)\Pi(x)$$

其中$K(x)$为待定函数，$\Pi(x)$为零点乘积

引入辅助函数$\phi(t)=f(t)-L_n(t)-K(x)\Pi(t)$（误差-误差），视$x\neq x_i\in(a,b)$为固定点，则$\phi(t)$在$n+2$个点$x,x_0,x_1,\ldots,x_n$上取值为0。由罗尔定理，在$\phi(t)$任两个零点之间必存在一点$\eta$，使得$\phi'(\eta)=0$，于是$\phi'(x)$在$(a,b)$上至少有$n+1$个零点。对$\phi'(t),\phi''(t),\ldots,\phi^{(n)}(t)$反复使用罗尔定理，最后得到在$(a,b)$上至少存在一个点$\xi$，使得$\phi^{(n+1)}(\xi)=0$，而

$$\phi^{(n+1)}(\xi)=f^{(n+1)}(\xi)-L_n^{(n+1)}(\xi)-K(x)\Pi^{(n+1)}(\xi)$$

式中，$L_n(x)$是次数不超过n的多项式，$Pi(x)$是$n+1$次多项式，故$L_n^{(n+1)}(\xi)=0,\Pi^{(n+1)}(\xi)=(n+1)!$，于是求得

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

代入$R_n(x)$即得证

若求区间内误差的最大值，有

$$\max_{a\le x\le b}|R_n(x)|\le\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\max_{a\le x\le b}|\Pi(x)|$$

其中$\Pi(x)$常用AM-GM不等式

4.2 牛顿插值

定义 10 (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

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

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 11 (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$f[x_i,x_j,x_k]=\dfrac{f[x_i,x_k]-f[x_i,x_j]}{x_k-x_j}$（一阶差商的差商），高阶差商为

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

类比导数的定义就可以很快记忆

差商有下列性质

1. 差商可以表示为函数值的线性组合

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

分析. 用数学归纳法，$k=1$易证，假设$k=k$成立，证明$k=k+1$成立

$$
\begin{aligned}
&f[x_0,x_1,\ldots,x_{k-1},x_k,x_{k+1}]\\
&=\frac{f[x_0,x_1,\ldots,x_{k-1},x_{k+1}]-f[x_0,x_1,\ldots,x_{k-1},x_k]}{x_{k+1}-x_k}\\
&=\left(\sum_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{k+1}\frac{f(x_j)}{(j;0,\ldots,j-1,j+1,\ldots,k-1,k+1)}-\sum_{j=0}^{k}\frac{f(x_j)}{(j;0,\ldots,j-1,j+1,\ldots,k)}\right)\Big/(x_{k+1}-x_k)\\
&=\left(\sum_{j=0}^{k-1}\frac{f(x_j)(x_j-x_k)-f(x_j)(x_j-x_{k+1})}{(j;0,\ldots,j-1,j+1,\ldots,k)}+\frac{f(x_{k+1})}{(k+1;0,\ldots,k-1)}-\frac{f(x_k)}{(k;0,\ldots,k-1)}\right)\Big/(x_{k+1}-x_k)\\
&=\sum_{j=0}^{k-1}\frac{f(x_j)}{(j;0,\ldots,j-1,j+1,\ldots,k)}+\frac{f(x_{k+1})}{(k+1;0,\ldots,k-1,k)}+\frac{f(x_k)}{(k;0,\ldots,k-1,k+1)}\\
&=\sum_{j=0}^{k+1}\frac{f(x_j)}{(j;0,\ldots,j-1,j+1,\ldots,k,k+1)}
\end{aligned}
$$

2. 差商关于所含节点是对称的，即任意调换节点x_i和x_j的次序，值不变

$$
f[x_0,\ldots,x_i,\ldots,x_j,\ldots,x_k]=f[x_0,\ldots,x_j,\ldots,x_i,\ldots,x_k]
$$

3. 设$f(x)$在含有$x_0,x_1,\dots,x_n$区间(a,b)上具有n阶导数，则在这区间上至少有一点ξ，使

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

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	$\underline{f_0}$			
x_1	f_1	$\underline{f[x_0,x_1]}$		
x_2	f_2	$f[x_1,x_2]$	$\underline{f[x_0,x_1,x_2]}$	
x_3	f_3	$f[x_2,x_3]$	$f[x_1,x_2,x_3]$	$\underline{f[x_0,x_1,x_2,x_3]}$

并且有

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

从而牛顿插值多项式为

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

且有递推式

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

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。

定理 11 (Newton多项式的误差估计)**.**

$$R_n(x)=f[x_0,x_1,\dots,x_n,x]\Pi(x)$$

分析. $N_{n+1}(t)$是$\{(x_0,f(x_0)),\dots,(x_n,f(x_n)),(x,f(x))\}$上的$n+1$次牛顿插值多项式，则在点$x$处一定满足插值条件

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

从而余项为

$$f(x)-N_n(x)=f[x_0,x_1,\dots,x_n,x]\Pi(x)$$

又由插值多项式的唯一性，有$N_n(x)=L_n(x)$，故可得差商与导数之间的关系

$$f[x_0,x_1,\dots,x_k]=\frac{f^{(k)}(\xi)}{k!},\ \xi\in(a,b)$$

定义 12 (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。

4.3 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，则为次数不超过$2n+1$的埃尔米特(Hermite)插值多项式

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{k=0}^{m}(1 - 2l_k'(x_k)(x - x_k))l_k^2(x)f_k + \sum_{k=0}^{n}(x - x_k)l_k^2(x)f_k'$$

式中，$l_k(x)$为节点$\{x_i\}_{i=0}^n$上的拉格朗日基函数。余项为

$$R_{2n+1}(x) = f(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}(\Pi(x))^2, \, \xi \in (a, b)$$

其中$\Pi(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j)$

例 4. 若函数$f(x)$在$[a, b]$上有四阶连续导数，且已知函数$f(x)$在$[a, b]$的互异节点x_0, x_1, x_2上的函数值以及节点x_0的一阶导数值如下表所示

x	*0*	*1*	*2*
$f(x)$	*0*	*1*	*1*
$f'(x)$	*-3*		

求一个三次埃尔米特插值多项式$H(x)$，使其满足

$$\begin{cases} H(x_i) = f(x_i) & i = 0, 1, 2 \\ H'(x_0) = f'(x_0) \end{cases}$$

并估计余项

分析. 先构造过x_0, x_1, x_2的拉格朗日插值函数

$$L(x) = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{3}{2}x$$

令$H(x)=L(x)+A(x-0)(x-1)(x-2)$，求导（用乘法法则）

$$H'(0)=L'(0)+A(0-1)(0-2)$$

解得$A=-9/4$，故

$$H(x)=-\frac{9}{4}x^3+\frac{25}{4}x^2-3x$$

记$\Pi(x)=(x-x_0)^2(x-x_1)(x-x_2)$，将余项表为

$$R(x)=f(x)-H(x)=K(x)\Pi(x)$$

引入构造函数$\phi(t)=f(t)-H(t)-K(x)\Pi(t)$，类似推理可得

$$R(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}\Pi(x),\ \xi(x)\in(a,b)$$

例 5. 若函数$f(x)$在$[a,b]$上有五阶连续导数，且已知函数$f(x)$在$[a,b]$的互异节点x_0,x_1,x_2上的函数值以及节点x_0,x_1的一阶导数值如下表所示

x	0	1	2
$f(x)$	0	1	1
$f'(x)$	-3	9	

求一个三次埃尔米特插值多项式$H(x)$，使其满足

$$\begin{cases} H(x_i)=f(x_i) & i=0,1,2 \\ H'(x_0)=f'(x_0) & i=0,1 \end{cases}$$

并估计余项

分析. 构造差商表（有导数的点构造两份）

x_k	$f(x_k)$	一阶	二阶	三阶	四阶
0	0				
0	0	-3			
1	1	1	4		
1	1	9	8	4	
2	1	0	-9	17/2	-25/4

得到插值多项式

$$H(x)=-\frac{25}{4}x^4+\frac{33}{2}x^3-\frac{25}{4}x^2-3x$$

4.4 三次样条插值

龙格(Runge)现象告诉我们并非插值多项式的次数越高，精度就越高，其源于等距分布的插值节点。

更好的方式是选择切比雪夫节点，如在$[-1,1]$上选择

$$x_i = \cos\left[\left(\frac{i}{n}\pi\right)\right], \qquad 0 \le i \le n$$

任意区间$[a,b]$上$n+1$个切比雪夫节点可以通过线性变换得到

$$x_i = \frac{1}{2}(a+b) + \frac{1}{2}(b-a)\cos\left[\left(\frac{i}{n}\pi\right)\right], \qquad 0 \le i \le n$$

另一种解决收敛性的方法则是分段低次插值，同时使插值函数具有一定的光滑性，故用样条(spline)插值的方式，每段用三次函数逼近，最终使得样条函数处处有二阶连续导数。

定义 13 (三次样条函数). *若函数$s(x) \in C^2[a,b]$（区间$[a,b]$上具有二阶连续导数的函数全体），且在每个小区间$[x_j, x_{j+1}]$是三次多项式，其中$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$是给定节点，则称$s(x)$是节点$x_0, x_1, \ldots, x_n$上的三次样条函数。若在节点$x_j$上给定函数值$y_j = f(x_j), j = 0, 1, \ldots, n$，并使*

$$s(x_j) = y_j, \qquad j = 0, 1, \ldots, n$$

则称$s(x)$为$f(x)$在$[a,b]$上的三次样条插值函数

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：$\lim_{x\to x_0^+} s^{(p)}(x) = \lim_{x\to x_n^-} s^{(p)}(x), p = 1, 2$

$$\begin{cases} \lambda_j = \dfrac{h_{j+1}}{h_j + h_{j+1}} \\ \mu_j = 1 - \lambda_j = \dfrac{h_j}{h_j + h_{j+1}} \\ d_j = \dfrac{6}{h_j + h_{j+1}}\left(\dfrac{y_{j+1} - y_j}{h_{j+1}} - \dfrac{y_j - y_{j-1}}{h_j}\right) = 6f[x_{j-1}, x_j, x_{j+1}] \end{cases}$$

三转角方法，用一阶导数求解；三弯矩方法，用二阶导数求解。

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

该矩阵严格对角占优，故有唯一解，可以用追赶法求解

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 14 (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$f(x)\in C[a,b]$[3]，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 15 (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. （正定性）$\langle f,f\rangle \ge 0 \iff f\equiv 0, \langle f,f\rangle = 0$
2. （线性性）$\langle c_1f+c_2g,h\rangle = c_1\langle f,h\rangle + c_2\langle g,h\rangle$, c_1,c_2为常数
3. （交换律）$\langle f,g\rangle = \langle g,f\rangle$

[3] $C[a,b]$表示区间$[a,b]$上连续函数的全体

定义 16 (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

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

定义 17 (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

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

$P_n(x)$的首项x^n系数为$\dfrac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$，记

$$\tilde{P}_0(x) = 1, \qquad \tilde{P}_n(x) = \frac{n!}{(2n)!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n$$

则$\tilde{P}_n(x)$是首项x^n系数为1的勒让德多项式

勒让德多项式有许多重要的性质

1. 正交性

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

分析. 令$\varphi(x) = (x^2-1)^n$，则$\varphi^{(k)}(\pm 1) = 0, k = 0, 1, \ldots, n-1$，且$P_n(x) = \dfrac{1}{2^n n!}\varphi^{(n)}(x)$，用分部积分法可证

2. 递推公式

$$P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x P_n(x) - \frac{n}{n+1} P_{n-1}(x), P_0(x) = 1, P_1(x) = x$$

可推得后面几项为

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1),\ P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3-3x),\ P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)$$

3. 奇偶性

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$$

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

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

分析. 令$x=\cos\theta$，由三角函数正交性[4]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

后面几项为

$$T_2(x)=2x^2-1,\ T_3(x)=4x^3-3x,\ T_4(x)=8x^4-8x^2+1$$

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$x_k=\cos\dfrac{2k-1}{2n}\pi$，在$[-1,1]$上有$n+1$个极值点$y_k=\cos\dfrac{k}{n}\pi$
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

$$L_n(x)=\mathrm{e}^x\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^n\mathrm{e}^{-x}),\qquad n=0,1,\ldots$$

递推公式为

$$L_{n+1}(x)=(1+2n-x)L_n(x)-n^2L_{n-1}(x),\qquad n=1,2,\ldots$$

2. 埃尔米特(Hermite)多项式

$$H_n(x)=(-1)^n\mathrm{e}^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\mathrm{e}^{-x^2},\qquad n=0,1,\ldots$$

递推公式为

$$H_{n+1}(x)=2xH_n(x)-2nH_{n-1}(x),\qquad n=1,2,\ldots$$

[4]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

5.2 最佳一致逼近

定义 18. 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

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

成立，则称多项式$p_n(x)$在$[a,b]$上一致逼近于$f(x)$

定义 19. 若$\exists x_0 \in [a,b]$，使得

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

则称x_0是$p(x)$关于$f(x)$的正/负偏差点

定理 12 (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$a \le x_1 < x_2 \cdots < x_{n+2} \le b$，使得

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

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，$p_1(x) = a_0 + a_1 x$为线性最佳一致逼近，其中

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

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

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

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

定理 13. 设$f(x) \in C[a,b]$，则$f(x)$在Φ中存在唯一最佳平方逼近函数$s^\star(x)$

分析.

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

对于最佳平方逼近式，解法方程

$$G_n\mathbf{a}=\mathbf{d}$$

对于最佳平方**多项式**，则$G_n=H_{n+1}$为希尔伯特(Hilbert)矩阵

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

也可以采用前面的正交多项式作为基底进行拟合。

例 6. 设$f(x)=\cos x, x\in[-\pi,\pi]$，求$p(x)=a+bx^2$的最佳平方逼近

分析. 基函数为$\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x^2$，故

$$\begin{aligned}d_0&=\langle\varphi_0(x),f\rangle=\int_{-\pi}^{\pi}\cos x\,\mathrm{d}x=0\\ d_1&=\langle\varphi_1(x),f\rangle=\int_{-\pi}^{\pi}x^2\cos x\,\mathrm{d}x=-4\pi\end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned}\langle\varphi_0,\varphi_0\rangle&=\int_{-\pi}^{\pi}\,\mathrm{d}x=2\pi\\ \langle\varphi_0,\varphi_1\rangle&=\int_{-\pi}^{\pi}x^2\,\mathrm{d}x=\frac{2}{3}\pi^3\\ \langle\varphi_1,\varphi_1\rangle&=\int_{-\pi}^{\pi}x^4\,\mathrm{d}x=\frac{2}{5}\pi^5\end{aligned}$$

有法方程

$$\begin{bmatrix}2\pi & \frac{2}{3}\pi^3\\ \frac{2}{3}\pi^3 & \frac{2}{5}\pi^5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\ b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ -4\pi\end{bmatrix}$$

解得

$$p(x)=\frac{15}{2\pi^2}-\frac{45}{2\pi^4}x^2$$

5.4 最小二乘法

最小二乘法即离散情形的最佳平方逼近，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

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

例 7. 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

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

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

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

- 梯形公式（一次插值）

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

- 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 21 (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。

例 8. 确定下列求积公式的待定系数，使其代数精度尽可能高，并指出其代数精度次数

$$\int_{-1}^{1} f(x)\ \mathrm{d}x \approx A_0 f(-\frac{1}{2}) + A_1 f(x_1) + A_2 f(\frac{1}{2})$$

分析. 分别令$f(x)=1,x,x^2,x^3$代入，使上式精确成立，得

$$\begin{cases} A_0+A_1+A_2=2 \\ -\frac{1}{2}A_0+x_1A_1+\frac{1}{2}A_2=0 \\ \frac{1}{4}A_0+x_1^2A_1+\frac{1}{4}A_2=\frac{2}{3} \\ -\frac{1}{8}A_0+x_1^3A_1+\frac{1}{8}A_2=0 \end{cases}$$

下式乘x_1减上式得

$$\begin{cases} (x+\frac{1}{2})A_0+(x_1-\frac{1}{2})A_2=2x_1 \\ (\frac{1}{4}+\frac{1}{2}x_1)A_0+(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}x_1)A_2=\frac{2}{3}x_1 \\ (\frac{1}{4}x_1+\frac{1}{8})A_0+(\frac{1}{4}x_1-\frac{1}{8})A_2=\frac{2}{3}x_1 \end{cases}$$

上式乘1/2减下式有

$$\begin{cases} (x_1-\frac{1}{2})A_2=\frac{1}{3}x_1 \\ (-\frac{1}{2}x_1+\frac{1}{4})A_2=-\frac{1}{3}x_1 \end{cases}$$

相加解得$x_1=0,A_0=\frac{4}{3},A_1=-\frac{2}{3},A_2=\frac{4}{3}$，故

$$\int_{-1}^{1} f(x)\ \mathrm{d}x = \frac{4}{3}f(-\frac{1}{2})+(-\frac{2}{3})f(0)+\frac{4}{3}f(\frac{1}{2})$$

令$f(x)=x^4$代入有

$$LHS=\frac{2}{5}\neq\frac{1}{6}=RHS$$

故代数精度为3

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$h=\dfrac{b-a}{n},x_i=a+ih,x_{i+\frac{1}{2}}=\dfrac{1}{2}(x_i+x_{i+1})$，则

- 复合中点公式

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

$$R_M=\frac{1}{24}(b-a)h^2f''(\eta)$$

- 复合梯形公式

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

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

- 复合辛普森公式

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

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

龙贝格(Romberg)求积方法（外推加速技术）

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

可证$T_n^{(m)}(m \le n)$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

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

其中$C_i^{(n)}$为科茨系数，有以下性质

- $\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} = 1$

  分析. 由牛顿-科茨公式

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

  令$f(x) = 1$代入，由于代数精度至少为0，故两边精确相等

- $C_i^{(n)}$对i有对称性：$C_i^{(n)} = C_{n-1}^{(n)}$

n	$C_i^{(n)}$			
1	1/2	1/2		
2	1/6	2/3	1/6	
3	1/8	3/8	3/8	1/8

- $n \geq 8$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 14. 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

注意：并不是节点取得越多，精度就越高

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 22. 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 15. $x_i (i = 0, 1, \ldots, n)$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

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

定理 16. 插值型求积公式

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

的代数精度至少为n次，至多为$2n+1$次。当达到最高代数精度$2n+1$次时，所有求积系数$\omega_i > 0$，即为高斯公式

定理 17. 设a, b为有限数，则对任意连续函数$f(x) \in C[a,b]$，当$n \to \infty$时，高斯公式收敛，即

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

几种常见的高斯公式如下，高斯点x_i为对应$n+1$多项式的零点

1. 高斯-勒让德(Legendre)多项式：$\rho \equiv 1, [a,b] = [-1,1]$

$$\omega_i = \frac{2}{(1 - x_i^2)[P'_{n+1}(x_i)]^2}$$

节点个数$n+1$	高斯点	高斯系数ω_i
1	0	2
2	$\pm 1/\sqrt{3}$	1
3	0	8/9
	$\pm\sqrt{3/5}$	5/9

2. 高斯-切比雪夫公式：$\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}},[a,b]=[-1,1]$

$$x_i=\cos\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi,\ \omega_i=\frac{\pi}{n+1}$$

3. 高斯-拉盖尔公式：$\rho(x)=\mathrm{e}^{-x},[a,b]=[0,\infty)$

$$\omega_i=\frac{(n!)^2x_i}{[(n+1)L_n(x_i)]^2}$$

4. 高斯-埃尔米特(Hermite)公式：$\rho(x)=\mathrm{e}^{-x^2},(a,b)=(-\infty,+\infty)$

$$\omega_i=\frac{2^{n+2}(n+1)!\sqrt{\pi}}{[H_{n+2}(x_i)]^2}$$

第一步都先变换积分区间$x=\dfrac{a+b}{2}+\dfrac{b-a}{2}t$，然后查表代入$x_i$和$\omega_i$

6.4 多重积分

记ω_i,ω_j分别为x,y方向的求积系数

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

- 横向纵向分别用一维的数值积分公式
- 蒙特卡洛(Monte Carlo)方法

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

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

分析. 做$f(x)$的线性插值

$$L_1(x)=\frac{x-x_1}{x-x_0}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1)$$

对上式求导，令$x=x_0,x_1-x_0=h$，有

$$L_1'(x_0)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}$$

故得到两点公式

三点求导公式：其中第二条为中心差商公式，误差均为$O(h^2)$，精度都二阶

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

分析. 做$f(x)$的二次插值

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

令$x = x_0 + th, x_i = x_0 + ih$，上式变为

$$L_2(x_0+th) = \frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0) - t(t-2)f(x_1) + \frac{1}{2}t(t-1)f(x_2)$$

两端对t求导，有（注意不要忘记将左侧的h除过去）

$$L_2'(x_0+th) = \frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0) - 4(t-1)f(x_1) + (2t-1)f(x_2)]$$

分别令$t = 0, 1, 2$即得三点求导公式
误差估计举例：对中心差商公式，利用泰勒展开

$$\begin{aligned} f(x_0) = f(x_1-h) = f(x_1) - hf'(x_1) + \frac{h^2}{2}f''(x_1) - \frac{h^3}{3!}f'''(x_1) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(\xi_1) \\ f(x_2) = f(x_1+h) = f(x_1) + hf'(x_1) + \frac{h^2}{2}f''(x_1) - \frac{h^3}{3!}f'''(x_1) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(\xi_2) \end{aligned}$$

进而

$$\frac{1}{h^2}[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)] = f''(x_1) + \frac{h^2}{4}[f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)]$$

即截断误差为$O(h^2)$

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

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

7.1 二分法和不动点法

- 二分法：如果指定精度为ε，则最多需要迭代步数为

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

- 不动点法：$x^\star=\phi(x^\star)$

定理 18. 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

7.2 牛顿法

牛顿法：相当于$\phi(x)=x-f(x)/f'(x)$的不动点迭代方法
$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

定理 19 (牛顿法全局收敛性)**.** 非线性函数f在$[a,b]$上二阶连续可微，满足$f(a)f(b)<0$，且$\forall x\in[a,b]:$ $f'(x)\neq0,f''(x)\neq0$。若选定初始点$x_0\in[a,b]$满足$f(x_0)f''(x_0)>0$，则牛顿迭代法收敛于方程唯一解$x^\star$

定理 20. 设在区间$[a,b]$上有二阶连续可微函数$f(x)$，$f(a)f(b)<0$，且对于所有$x\in[a,b]$，有$f'(x)\neq 0,f''(x)\neq0$，若a,b两点满足
$$\max\left(\left|\frac{f(a)}{f'(a)}\right|,\left|\frac{f(b)}{f'(b)}\right|\right)<b-a$$
则对于任何$x_0\in[a,b]$，牛顿迭代法收敛于方程的唯一根$x^\star$

牛顿下山法：相当于加了个步长
$$x_{k+1}(\lambda)=x_k-\lambda\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

割线法：即用割线斜率代替切线斜率
$$x_{k+1}=x_k-f(x_k)\frac{x_k-x_{k-1}}{f(x_k)-f(x_{k-1})}$$

8　常微分方程

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

其中，$y_0 \in \mathbb{R}^m$，$f(x,y)$是定义在$m+1$维区域

$$G = \{(x,y) \mid x \in [a,b], y \in \mathbb{R}^m\}$$

上的m维已知函数向量

8.1　欧拉公式

前向欧拉公式

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

后退欧拉公式（隐格式需要解方程）

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$$

梯形公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})]$$

改进欧拉公式

$$\begin{cases} \text{预估} \quad \bar{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ \text{校正} \quad y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1})] \end{cases}$$

定理 21. 若常微分初值问题的计算公式

$$y_{n+1} = y_n + hg(y_{n+1}, y_n, \ldots, y_{n-r})$$

的局部截断误差为

$$\varepsilon_{n+1} = y(x_{n+1}) - \hat{y}_{n+1} = O(h^{p+1})$$

则称该公式所代表的数值方法具有p阶精度或称为p阶方法。如欧拉公式就是一阶方法，梯形公式是二阶方法。

例 9. 将下列方程化为一阶方程组

$$\begin{cases} y'' - 3y' + 2y = 0 \qquad x \in (0,1) \\ y(0) = 1,\ y'(0) = 1 \end{cases}$$

分析. 令$y'=z$，则

$$z'=y''=3y'-2y=3z-2y$$

因此得到方程组

$$\begin{cases} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}\Big|_{x=0} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \end{cases}$$

8.2 龙格库塔公式

二阶龙格库塔公式（中点公式）

$$\begin{cases} y_{n+1} & = y_n + k_2 \\ k_1 & = hf(x_n, y_n) \\ k_2 & = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \end{cases}$$

三阶三段龙格库塔公式

$$\begin{cases} y_{n+1} & = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \\ k_1 & = hf(x_n, y_n) \\ k_2 & = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \\ k_3 & = hf\left(x_n + h, y_n - k_1 + 2k_2\right) \end{cases}$$

标准四阶龙格库塔公式

$$\begin{cases} y_{n+1} & = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 & = hf(x_n, y_n) \\ k_2 & = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \\ k_3 & = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2\right) \\ k_4 & = hf\left(x_n + h, y_n + k_3\right) \end{cases}$$