

数值计算方法

陈鸿峥

2019.06*

目录

1	简介	2
1.1	误差	2
1.2	需要注意的问题	3
2	多项式插值	3
2.1	拉格朗日插值	4
2.2	牛顿插值	5
2.3	埃尔米特插值	6
2.4	三次样条插值	7
3	线性方程组直接解法	8
3.1	高斯消元法	8
3.2	三角分解	8
3.3	追赶法	9
3.4	分块三角分解	10
4	线性方程组迭代解法	10
4.1	范数与条件数	10
4.2	基本迭代法	12
5	函数逼近	13
5.1	内积与正交多项式	14
5.2	最佳一致逼近	16
5.3	最佳平方逼近	16
5.4	最小二乘法	17

*Build 20190626

6	数值积分与数值微分	18
6.1	基本公式	18
6.2	牛顿-科茨公式	20
6.3	高斯公式	20
6.4	多重积分	21
6.5	数值微分	21
7	非线性方程求根	22
7.1	二分法和不动点法	22
7.2	牛顿法	22
8	常微分方程	23
8.1	欧拉公式	23
8.2	龙格库塔公式	24

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**:

$$x = \pm 10^m \times 0.x_1x_2 \cdots x_nx_{n+1} \cdots$$

其中 $m \in \mathbb{Z}, \{x_i\} \subset \{0, 1, 2, \dots, 9\}, x_1 \neq 0$, 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} :

$$\bar{x} = \begin{cases} \pm 10^m \times 0.x_1x_2 \cdots x_n & x_{n+1} \leq 4 \\ \pm 10^m \times 0.x_1x_2 \cdots (x_n + 1) & x_{n+1} \geq 5 \end{cases}$$

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）

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

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

2 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 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 $x_i (i = 0, 1, \dots, n)$ 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

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

, 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 $P_n(x)$ 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 3 (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

定理 2 (Lagrange函数的误差估计).

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

分析. 设 $R_n(x) = f(x) - L_n(x)$, 则在节点 x_i 上有

$$R_n(x_i) = f(x_i) - L_n(x_i) = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

¹次数小于等于 n 的代数多项式的集合

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, \dots, 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 η , 使得 $\phi'(\eta) = 0$, 于是 $\phi'(x)$ 在 (a, b) 上至少有 $n+1$ 个零点。对 $\phi'(t), \phi''(t), \dots, \phi^{(n)}(t)$ 反复使用罗尔定理, 最后得到在 (a, b) 上至少存在一个点 ξ , 使得 $\phi^{(n+1)}(\xi) = 0$, 而

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

式中, $L_n(x)$ 是次数不超过 n 的多项式, $P_i(x)$ 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

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

2.2 牛顿插值

定义 4 (牛顿插值基函数).

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

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

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

定义 5 (差商). 一阶差商 $f[x_i, x_k] = \frac{f(x_k) - f(x_i)}{x_k - x_i}$, 二阶差商 $f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_k] - f[x_j, x_k]}{x_k - x_j}$, 高阶差商为

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

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

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

由误差估计的计算可得差商与导数之间的关系

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

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 6 (差分). 设已知函数 $f(x)$ 在等距节点 $x_i = x_0 + ih (i = 0, 1, 2, \dots, n)$ 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

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

则牛顿插值公式的向前差分形式为

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

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

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

2.4 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

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

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

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

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 7 (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 $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ 是给定节点, 则称 $s(x)$ 是节点 x_0, x_1, \dots, x_n 上的三次样条函数。若在节点 x_j 上给定函数值 $y_j = f(x_j), j = 0, 1, \dots, n$, 并使

$$s(x_j) = y_j, \quad j = 0, 1, \dots, n$$

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: $s_k(x_j) = y_j, \quad j = k - 1, k, \quad k = 1, 2, \dots, n$, 共 $2n$ 个条件
- 端点导数条件: $\lim_{x \rightarrow x_k^-} s^{(p)}(x) = \lim_{x \rightarrow x_k^+} s^{(p)}(x), \quad p = 1, 2, \quad k = 1, \dots, n - 1$, 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: $\lim_{x \rightarrow x_0^+} s^{(p)}(x) = \lim_{x \rightarrow x_n^-} s^{(p)}(x), p = 1, 2$

三转角方法，用一阶导数求解；三弯矩方法，用二阶导数求解。

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

该矩阵严格对角占优，故有唯一解，可以用追赶法求解

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

3.2.1 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
- 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， $D = \text{diag}(u_{11}, u_{22}, \dots, u_{nn})$ ， $\tilde{U} = D^{-1}U$ 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 3. 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 4. 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

3.2.2 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, 由 A 的对称性有

$$A = LDU = U^T D U^T$$

又由分解的唯一性, 有 $L = D^T$, 得 $A = LDL^T$

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

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

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

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。

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

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

从而得到计算公式

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

该求解方法称之为平方根法。

3.3 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 $A = LU$ ，做两次回代即可

$$\begin{cases} Ly = d \\ Ux = y \end{cases}$$

3.4 分块三角分解

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

且满足 $A = LU$ ，经计算有

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

其中 $S = D - CA^{-1}B$ 为 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 8 (向量的范数). 对任意 n 维向量 x ，若对应非负实数 $\|x\|$ ，满足

1. $\|x\| \geq 0$ ，当且仅当 $x = 0$ 时等号成立
2. 对任意 $\alpha \in \mathbb{R}$ ， $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$
3. 对任意的 n 维向量 x 和 y ，满足三角不等式 $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

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

$$\begin{aligned} \|x\|_1 &= \sum_{i=1}^n |x_i| \\ \|x\|_2 &= \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2} \\ \|x\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \end{aligned}$$

定义 9 (矩阵的范数). 对于 n 阶方阵 A ，若对应非负实数 $\|A\|$ ，满足

1. $\|A\| \geq 0$ ，当且仅当 $A = 0$ 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 $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$
4. 对任意两个 n 阶方阵 A 和 B ，满足矩阵乘法要求 $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$

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

$$\begin{aligned}\|A\|_1 &= \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \\ \|A\|_2 &= \sqrt{\rho(A^T A)} \\ \|A\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \\ \|A\|_F &= \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}\end{aligned}$$

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 $A^T A$ 的谱半径，又被称为谱范数
定义 10 (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

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

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 11 (条件数). 设 A 为 n 阶非奇异矩阵，称数 $\text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$ 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

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

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

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

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

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

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 , $\text{cond}(A) \geq 1$ 成立
 - 对于任意 n 阶非奇异矩阵 A 及任意非零常数 c , $\text{cond}(cA) = \text{cond}(A)$ 成立
 - 对于任意正交矩阵 A , 有 $\text{cond}_2(A) = 1$
 - 对于任意 n 阶非奇异矩阵 A 及任意 n 阶正交矩阵 P , 有 $\text{cond}_2(PA) = \text{cond}_2(AP) = \text{cond}_2(A)$
- 一类十分典型的病态矩阵是希尔伯特矩阵 H_n , 其条件数 $\text{cond}_2(H_n) \approx e^{3.5n}$, 病态非常严重

4.2 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

$$M\mathbf{x} = N\mathbf{x} + \mathbf{b}$$

左右乘上 M^{-1} , 有

$$\mathbf{x} = M^{-1}N\mathbf{x} + M^{-1}\mathbf{b} = B\mathbf{x} + \mathbf{g}$$

给定初始向量 $\mathbf{x}^{(0)}$, 按照下式迭代

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

最终若收敛至 \mathbf{x}^* , 则原方程得出解。实际迭代还是用

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

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

4.2.1 雅可比迭代法

取 $M = D$ 和 $N = L + U$, 即得雅可比迭代法

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

定理 5. 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

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

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

定理 6. 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

4.2.3 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

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

此时迭代矩阵为

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

定理 7. SOR迭代收敛的必要条件是 $\omega \in (0, 2)$

定理 8. 设系数矩阵 A 对称正定, 则 $0 < \omega < 2$ 时SOR迭代收敛

5 函数逼近

用函数 $f(x)$ 和 $p(x)$ 的最大误差

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

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

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

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

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

作为度量函数。若存在一个函数序列满足

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

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 12 (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, $\int_a^b x^k \rho(x) dx$ 对 $k = 0, 1, \dots$ 都存在, 且对非负的 $f(x) \in C[a, b]^2$, 若 $\int_a^b f(x)\rho(x) dx = 0$, 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 13 (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

$$\langle f, g \rangle := \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx$$

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. $\langle f, f \rangle \geq 0 \iff f \equiv 0, \langle f, f \rangle = 0$

定义 14 (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

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

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

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx = 0$$

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

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

勒让德多项式有许多重要的性质

² $C[a, b]$ 表示区间 $[a, b]$ 上连续函数的全体

1. 正交性

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

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

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

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

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

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

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}), \quad n = 0, 1, \dots$$

递推公式为

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

2. 埃尔米特(Hermite)多项式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \quad n = 0, 1, \dots$$

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

递推公式为

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

5.2 最佳一致逼近

定义 16. 设 $f(x) \in C[a, b]$, 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 17. 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 9 (Chebyshev). $p_n^*(x) \in P_n$ 是 $f(x) \in C[a, b]$ 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 $a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_{n+2} \leq b$, 使得

$$p_n^*(x_k) - f(x_k) = (-1)^k \sigma \|f - p_n^*\|_\infty, \quad \sigma = \pm 1, k = 1, 2, \dots, n + 2$$

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

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

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

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

则称 s^* 为 $f(x)$ 在集合 φ 中的最佳平方逼近函数。若 $\varphi = P_n = \text{Span}\{1, x, \dots, x^n\}$, 则 $s^*(x)$ 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 $\mathbf{a} = \mathbf{a}^*$, 进而得到最佳平方逼近式 $p_n^*(x)$

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

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

特别地, 如果用代数多项式拟合, 即取

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

有法方程

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

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 $\max_{a \leq x \leq b} |f(x) - P_n(x)| \leq \varepsilon$, 就有误差估计

$$\left| \int_a^b f(x) \, dx - \int_a^b P_n(x) \, dx \right| \leq (b-a)\varepsilon$$

6.1 基本公式

- 中点公式

$$I = \int_a^b f(x) \, dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$R = \frac{1}{24}(b-a)^3 f''(\xi)$$

- 梯形公式 (一次插值)

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

$$R = -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\xi)$$

- 辛普森公式 (二次插值)

$$I = \int_a^b f(x) \, dx \approx \frac{1}{6}(b-a) \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]$$

$$R = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi)$$

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

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

通常记

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

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 19 (代数精度). 对所有次数小于等于 m 的多项式 $f(x)$ ，等式

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

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 $f(x) = 1, x, x^2, \dots$ (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

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

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

$$\begin{aligned}M_n &:= \sum_{i=0}^{n-1} h f\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right) \\ R_M &= \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{24} h^3 f''(\xi_i)\end{aligned}$$

- 复合梯形公式

$$\begin{aligned}T_n &:= \frac{h}{2} [f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)] \\ R_T &= -\frac{1}{12} (b-a) h^2 f''(\eta), \eta \in (a, b)\end{aligned}$$

- 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（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 $T_n^{(m)} (m \leq n)$ 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

$$Q = (b-a) \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-i}}{ni!(n-i)!} \left(\int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (t-j) dt \right) f(x_i)$$

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

$$= \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)$$

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: $C_i^{(n)} = C_{n-1-i}^{(n)}$

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

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

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 11. x_i 是求积公式的高斯点的充分必要条件是, 多项式 $\Pi(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$ 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

$$\int_a^b \rho(x) \Pi(x) q(x) dx = 0$$

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: $\rho(x) = e^{-x}, [a, b] = [0, \infty)$
4. 高斯-埃尔米特(Hermite)公式: $\rho(x) = e^{-x^2}, (a, b) = (-\infty, +\infty)$

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

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

- 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

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

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

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

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： $x^* = \phi(x^*)$

定理 12. 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

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

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 $x^* = \phi(x^*)$
- 序列 $\{x_k\}$ 的收敛速度估计

$$|x_k - x^*| \leq \frac{1}{1-L} |x_{k+1} - x_k|$$

和

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

迭代加速：利用导数估计 $\phi'(\xi) \approx L$ ，得到

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

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 13 (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 $\forall x \in [a, b] : f'(x) \neq 0, f''(x) \neq 0$ 。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^*

定理 14. 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 $f'(x) \neq 0, f''(x) \neq 0$, 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^*

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:

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

8 常微分方程

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

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

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

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

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

定理 15. 若常微分初值问题的计算公式

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

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。

8.2 龙格库塔公式

标准四阶龙格库塔公式

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