数值计算，即数值分析，是一门研究各种数学问题数值解法及其理论的学科。在实际中，当精确解析法难以求解数学问题时，数值计算发挥重要作用。它涵盖函数逼近与插值、数值积分与微分、线性方程组求解、非线性方程（组）求解以及常微分方程初值问题数值解法等方面。通过各种特定的方法，如插值法、最小二乘法、梯形法、辛普森法、高斯消元法、迭代法、牛顿法、欧拉法、龙格-库塔法等，为科学与工程领域，包括物理学、工程学、计算机科学、经济学等提供强大的解决复杂实际问题的工具，进行模拟、预测和优化。

+++info 课程章节

- CH1 数值计算方法绪论。
- CH2 插值法。
- CH3 函数逼近与曲线拟合。
- CH4 数值积分与数值微分。
- CH5 线性方程组的直接解法。
- CH6 线性方程组的迭代解法。
- CH7 非线性方程（组）的数值解法。
- CH8 常微分方程初值问题数值解法。
- CH9 深度学习中的数值问题。

误差

在数值计算中可能产生的误差主要有：

- 模型误差
- 观测误差
- 截断误差
- 舍入误差

在数值计算中将着重研究 [**截断误差、舍入误差**]{.red}，并对它们的传播与积累作出分析

---

1. 绝对误差

近似值：x^* ；准确值：x

绝对误差：近似值与准确值之差

$e^* = x^* - x$

绝对误差限：误差绝对值的上界

$$|e^*| = |x^* - x| \le \epsilon^*$$
$$x = x^* \pm \epsilon^*$$

2. 相对误差

相对误差：误差与准确值的比值

$$e_r^* = \frac{e^*}{x} \approx \frac{e^*}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$$

相对误差限：相对误差绝对值的上界 ϵ_r^* ，即 $|e_r^*| \le \epsilon_r^*$

$$\epsilon_r^* = \frac{\epsilon^*}{|x^*|}$$

> ϵ^* 是绝对误差限

3. 有效数字

一、有效数字的定义

在数值计算中，若一个近似值 x 的误差限是其某一位上的 `半个单位`，且从该位到 x 的左边第一个非零数字一共有 n 位，则称近似值 x 有 n 位有效数字。

例如，取圆周率 π 的近似值为 3.14，它的误差限不超过 0.005，从左边第一个非零数字 3 到最后一位数字 4 一共有三位，则近似值 3.14 有三位有效数字。

二、有效数字和相对误差限的关系

1. 设近似值 x 表示为 $x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$，其中 $a_1, a_2, \cdots, a_n$ 是 0 到 9 中的数字，$a_1 \neq 0$，m 为整数。若 x 有 n 位有效数字，则其相对误差限为：
   - $\delta \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$。

   反过来，如果已知近似值 x 的相对误差限满足上述条件，也可以确定 x 具有 n 位有效数字。
2. 举例说明：
   - 若近似值 $x = 0.00324$ 有三位有效数字，从左边第一个非零数字 3 开始，到最后一位数字 4 一共有三位。此时 $a_1 = 3$，$n = 3$，代入相对误差限公式可得：

     $\delta \leq \frac{1}{2\times3} \times 10^{-(3-1)} = \frac{1}{6} \times 10^{-2} = 0.00167$。
   - 若已知一个近似值的相对误差限为 0.005，假设这个近似值为 $x = \pm 10^m \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$，根据相对误差限公式 $\delta \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$，当 $a_1 = 1$ 时，$0.005 = \frac{1}{2\times1} \times 10^{-(n-1)}$，通过求解可得 $n = 2$，即该近似值有两位有效数字。

4. 病态问题和条件数

一、病态问题

当一个数学问题的解对数据的微小变化非常敏感时，就称这个问题为病态问题。

例如，考虑线性方程组 $Ax = b$，其中 A 是系数矩阵，x 是未知向量，b 是右端项。如果系数矩阵 A 的微小变化会导致解 x 发生很大的变化，那么这个线性方程组就是病态的。

病态问题在实际计算中会带来很大的困难，因为数据的测量或计算过程中不可避免地会存在误差，而对于病态问题，这些误差可能会被极大地放大，使得计算结果的可靠性大大降低。

二、条件数

条件数是用来衡量一个问题病态程度的指标。

1. 对于++线性方程组++$Ax = b$，矩阵 A 的条件数定义为 $\|A\|\|A^{-1}\|$，其中 $\|\cdot\|$ 表示矩阵的某种范数。
   - 条件数越大，说明问题越病态，解对数据的微小变化就越敏感。
   - 条件数越小，问题的病态程度就越低，解相对比较稳定。
2. 例如，当条件数非常大时，即使右端项 b 只有很小的误差，解 x 可能会产生很大的误差。而当条件数较小时，数据的微小误差对解的影响相对较小。

在数值计算中，了解问题的病态程度是非常重要的，可以通过分析条件数来判断问题是否病态，并采取相应的措施来减少误差的影响，比如使用更稳定的算法、提高数据的精度等。

> 矩阵为方阵且满秩则存在逆矩阵

---

1. ++计算函数值问题的条件数++定义为：相对误差比值 $\left|\frac{f(x)-f(x^*)}{f(x)}\right| / \left|\frac{\Delta x}{x}\right| \approx \left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right|$，记为 C_p。
2. 如果条件数 C_p 很大，即使自变量相对误差一般不大，也会引起函数值相对误差很大。出现这种情况的问题被称为病态问题。
3. 一般情况下，当条件数 $C_p \geq 10$ 时，就认为是病态问题，并且条件数越大，病态越严重。

+++info 病态问题

1. 病态问题在数值计算中会带来很大的挑战。因为在实际计算中，数据往往存在一定的误差，而对于病态问题，这些误差会被极大地放大，导致计算结果的可靠性降低。
2. 为了应对病态问题，可以采取一些措施。例如，使用更稳定的算法、提高数据的精度、进行数据预处理以减少误差等。
3. 在实际应用中，判断一个问题是否为病态问题是非常重要的。可以通过计算条件数来初步判断问题的病态程度。如果条件数较大，就需要更加谨慎地处理问题，以避免误差的过度放大。
4. 不同的问题可能具有不同程度的病态性。有些问题可能在特定的参数范围内是病态的，而在其他参数范围内则是良态的。因此，在分析问题时，需要综合考虑各种因素，以确定问题的病态程度。
5. 除了计算函数值问题，在其他数值计算问题中，也可以类似地定义条件数来衡量问题的病态程度。例如，在求解线性方程组、插值问题、数值积分等问题中，都可以通过分析条件数来判断问题的稳定性和可靠性。

> additional : 数值稳定性

插值

1. 拉格朗日插值

一、基本概念

给定 $n+1$ 个互异的节点 $(x_0,y_0),(x_1,y_1),\cdots,(x_n,y_n)$，其中 x_i 互不相同，y_i 为对应的函数值。拉格朗日插值的目的是构造一个次数不超过 n 的多项式 $L_n(x)$，使得在这些节点上，$L_n(x_i)=y_i$，即多项式在给定的节点处与函数值相等。

二、插值多项式的形式

拉格朗日插值多项式的形式为：

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} y_i l_i(x)$$

其中 $L_i(x)$ 为拉格朗日基函数，定义为：

$$l_i(x)=\prod_{j=0,j\neq i}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}$$

::: info

定义 1：若 n 次多项式 $l_j(x)(j=0,1,\cdots,n)$ 在 $n+1$ 个节点 $x_0<x_1<\cdots<x_n$ 上满足条件：

$$l_j\left(x_k\right)=\begin{cases}1, & k=j;\\ 0, & k\neq j.\end{cases}\ (j,k=0,1,\cdots,n)\ (2.7)$$

就称这 $n+1$ 个 n 次多项式 $l_0(x),l_1(x),\cdots,l_n(x)$ 为节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 上的 n 次插值基函数。

:::

三、计算步骤

1. 确定插值节点：给定一组互异的节点 $(x_0,y_0),(x_1,y_1),\cdots,(x_n,y_n)$。
2. 计算拉格朗日基函数：对于每个 i，计算 $L_i(x)$。
   - 例如，当 $n=2$ 时，假设有三个节点 $(x_0,y_0),(x_1,y_1),(x_2,y_2)$，则：
     - $l_0(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$；
     - $l_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$；
     - $l_2(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$。
3. 计算插值多项式：将节点的函数值 y_i 和对应的基函数 $L_i(x)$ 代入插值多项式公式，得到 $L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} y_i l_i(x)$。

四、特点和应用

1. 特点：
   - 拉格朗日插值多项式在节点处与给定的函数值完全相等，具有较高的精度。
   - ++当节点增加时，需要重新计算整个插值多项式，计算量较大++。
   - 对于高次插值，可能会出现龙格现象，即在插值区间的两端，插值多项式的波动较大，与原函数的差异较大。
2. 应用：
   - 函数逼近：可以用拉格朗日插值多项式来逼近一个未知的函数。
   - 数据拟合：当只有离散的数据点时，可以通过拉格朗日插值得到一个连续的函数表达式。
   - 数值积分和数值微分：可以利用插值多项式进行数值积分和数值微分的计算。

+++primary 例题

假设有三个数据点 $(1,2)$、$(2,5)$、$(3,10)$，要求通过拉格朗日插值法构造一个插值多项式来逼近函数关系。

1. 首先确定插值基函数：
   - 对于三个节点，$n=2$。
   - 当 $j=0$ 时，$x_0=1$，对应的基函数 $l_0(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}=\frac{(x-2)(x-3)}{(1-2)(1-3)}=\frac{(x-2)(x-3)}{2}$.
   - 当 $j=1$ 时，$x_1=2$，对应的基函数 $l_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}=\frac{(x-1)(x-3)}{(2-1)(2-3)}=(x-1)(x-3)$.
   - 当 $j=2$ 时，$x_2=3$，对应的基函数 $l_2(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}=\frac{(x-1)(x-2)}{(3-1)(3-2)}=\frac{(x-1)(x-2)}{2}$。
2. 然后构造插值多项式：
   - 插值多项式为

$$L_2(x)=y_0l_0(x)+y_1l_1(x)+y_2l_2(x)$$

- 已知 $y_0=2$，$y_1=5$，$y_2=10$. 则

$$L_2(x)=2\times\frac{(x-2)(x-3)}{2}+5\times(x-1)(x-3)+10\times\frac{(x-1)(x-2)}{2}.$$

- 化简可得：$L_2(x)=x^2+2x-1$。这个插值多项式 $L_2(x)$ 在给定的三个节点处与函数值相等，即 $L_2(1)=2$，$L_2(2)=5$，$L_2(3)=10$。它可以用来逼近这三个数据点所代表的函数关系。
- 事实上如果这是一个 2 次函数，则二次拉格朗日插值得到的就是 `原函数`。

> 在拉格朗日插值中，利用余项表达式（2.12）可知，若被插函数 $f(x)\in H_n$，由于 $f^{(n+1)}(x)=0$，故 $R_n(x)=f(x)-L_n(x)=0$，即它的插值多项式 $L_n(x)=f(x)$。

在拉格朗日插值中，插值余项与误差估计是评估插值效果的重要指标。

五、插值余项

若在区间 $[a,b]$ 上用 $L_n(x)$ 近似 $f(x)$，则截断误差 $R_n(x)=f(x)-L_n(x)$ 被称为插值多项式的余项。

六、误差估计

[**定理 2**]{.red}：设 $f^{(n)}(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续，$f^{(n+1)}(x)$ 在 (a,b) 内存在，节点 $a\le x_0<x_1<\cdots<x_n\le b$，$L_n(x)$ 是满足特定条件的插值多项式，则对任何 $x\in[a,b]$，插值余项

$$R_n(x)=f(x)-L_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x).$$

这里 $\xi\in(a,b)$ 且依赖于 x，$\omega_{n+1}(x)=\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$.

1. 这个公式可以用来估计插值的误差。当 $f^{(n+1)}(x)$ 在区间上有界时，可以++通过余项公式得到误差的上界++。
   - 例如，如果能确定 $f^{(n+1)}(x)$ 的一个上界 M，即对于所有的 $x\in(a,b)$，有

     $$|f^{(n+1)}(x)|\le M$$

     那么误差

     $$|R_n(x)|=|\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)|\le\frac{M}{(n+1)!}|\omega_{n+1}(x)|.$$
2. 从误差估计可以看出以下几点：
   - 插值多项式的次数 n 越高，理论上误差可能会越小。因为分母 $(n+1)!$ 随着 n 的增大而增大。
   - 然而，在实际应用中，高次插值并不一定总是能得到更好的结果。这是因为高次插值可能会出现龙格现象，即在插值区间的两端，插值多项式的波动较大，与原函数的差异较大。
   - 插值节点的分布也会影响误差。如果插值节点分布不均匀或者过于密集，可能会导致误差增大。

2. 差商

一、定义

设有函数 $f(x)$ 以及一系列互不相等的点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$，则 f 在这些点处的一阶差商定义为：

$$f[x_i,x_{i+1}]=\frac{f(x_{i+1})-f(x_i)}{x_{i+1}-x_i}$$

二阶差商定义为：

$$f[x_i,x_{i+1},x_{i+2}]=\frac{f[x_{i+1},x_{i+2}]-f[x_i,x_{i+1}]}{x_{i+2}-x_i}$$

以此类推，n 阶差商定义为：

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\frac{f[x_1,x_2,\cdots,x_n]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{n-1}]}{x_n-x_0}$$

二、性质

1. 对称性：差商的值与节点的顺序无关。即对于任意的置换 σ，有 $f[x_{\sigma(0)},x_{\sigma(1)},\cdots,x_{\sigma(n)}]=f[x_0,x_1,\cdots,x_n]$。
2. 可通过 **差商表** 计算：可以通过构造差商表来方便地计算高阶差商。差商表是一个二维表格，其中第一列是节点，其余列是对应节点的差商。从低阶到高阶逐步计算差商，可以提高计算效率。
3. 若 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上存在 n 阶导数，且节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n\in[a,b]$，则 n 阶均差与导数关系如下：

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

这公式可直接用罗尔定理证明。

> 设 $q(x)=f[x,x_0,\cdots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$，$q(x)$
> 在 $x_0,\cdots,x_n$ 处均为零，所以 $q(x)$ 在 $[a,b]$ 上有 $n+1$ 个零点。
> 根据罗尔定理，$q'(x)$ 在 $q(x)$ 的两个零点间至少有一个零点，故 $q'(x)$ 在 $[a,b]$ 内至少有 n 个零点；反复应用罗尔定理，可知 $q^{(n)}(x)$ 在 $[a,b]$ 内至少有 1 个零点，记为 $\xi\in[a,b]$，使
> $q^{(n)}(\xi)=f^{(n)}(\xi)-n!f[x_0,\cdots,x_n]=0$，
> 所以 $f[x_0,\cdots,x_n]=\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$。

三、应用

1. 牛顿插值：差商在牛顿插值法中起着关键作用。牛顿插值多项式的形式为：

$$N_n(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)+\cdots+f[x_0,x_1,\cdots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$$

通过差商可以确定插值多项式的系数，从而实现对函数的逼近。

2. 数值微分：可以利用差商来近似计算函数的导数。例如，一阶导数可以近似为一阶差商，即 $f'(x)\approx\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$，其中 h 是一个小的增量。

四、差商表计算

以下是升序下标的差商表示例：

x_k	$f(x_k)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商	四阶差商	$\cdots$	n 阶差商
x_0	$f(x_0)$					$\cdots$	
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0,x_1]$				$\cdots$	
x_2	$f(x_2)$	$f[x_1,x_2]$	$f[x_0,x_1,x_2]$			$\cdots$	
x_3	$f(x_3)$	$f[x_2,x_3]$	$f[x_1,x_2,x_3]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3]$		$\cdots$	
x_4	$f(x_4)$	$f[x_3,x_4]$	$f[x_2,x_3,x_4]$	$f[x_1,x_2,x_3,x_4]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3,x_4]$	$\cdots$	
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
x_n	$f(x_n)$	$f[x_{n-1},x_n]$	$f[x_{n-2},x_{n-1},x_n]$	$f[x_{n-3},x_{n-2},x_{n-1},x_n]$	$f[x_{n-4},x_{n-3},x_{n-2},x_{n-1},x_n]$	$\cdots$	$f[x_0,x_1,\cdots,x_n]$

其中一阶差商计算公式为：

$f[x_i,x_{i+1}]=\frac{f(x_{i+1})-f(x_i)}{x_{i+1}-x_i}$；

二阶差商计算公式为：$f[x_i,x_{i+1},x_{i+2}]=\frac{f[x_{i+1},x_{i+2}]-f[x_i,x_{i+1}]}{x_{i+2}-x_i}$，

以此类推，n 阶差商计算公式为：$f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\frac{f[x_1,x_2,\cdots,x_n]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{n-1}]}{x_n-x_0}$。

3. 牛顿插值

牛顿插值法是一种数值插值方法，它通过差商来构建插值多项式。与拉格朗日插值法不同，牛顿插值法在增加新的插值节点时，++不需要重新计算整个插值多项式，只需要计算新节点对应的差商项并加入到原有的多项式中即可++。

1. 牛顿插值多项式的形式
   - 设给定 $n+1$ 个互异的节点 $(x_0,y_0),(x_1,y_1),\cdots,(x_n,y_n)$，**牛顿插值多项式** 为：

   $$N_n(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)+\cdots+f[x_0,x_1,\cdots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$$
2. 牛顿插值法的步骤
   - 首先计算差商表：从一阶差商开始，逐步计算高阶差商，形成一个差商表。
   - 然后根据差商表中的数据构建牛顿插值多项式：从最低阶的项开始，依次加入高阶差商项，直到得到所需的插值多项式。

[**以下是通过差商表达式迭代推出牛顿插值公式的过程**]{.red}：

1. 首先从一阶差商开始：

- 已知 $f[x,x_0]=\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$，变形可得 $f(x)=f(x_0)+f[x,x_0](x-x_0)$。

2. 接着引入二阶差商：
   - $f[x,x_0,x_1]=\frac{f[x,x_0]-f[x_0,x_1]}{x-x_1}$，将 $f[x,x_0]=\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$ 代入可得：

- $f[x,x_0,x_1]=\frac{\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}-f[x_0,x_1]}{x-x_1}=\frac{f(x)-f(x_0)-(x-x_0)f[x_0,x_1]}{(x-x_0)(x-x_1)}$。
- 进一步变形得到 $f(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x,x_0,x_1](x-x_0)(x-x_1)$。

3. 然后引入三阶差商：
   - $f[x,x_0,x_1,x_2]=\frac{f[x,x_0,x_1]-f[x_0,x_1,x_2]}{x-x_2}$，把前面得到的 $f[x,x_0,x_1]$ 表达式代入可得：
   - $f[x,x_0,x_1,x_2]=\frac{\frac{f(x)-f(x_0)-(x-x_0)f[x_0,x_1]}{(x-x_0)(x-x_1)}-f[x_0,x_1,x_2]}{x-x_2}=\frac{f(x)-f(x_0)-(x-x_0)f[x_0,x_1]-(x-x_0)(x-x_1)f[x_0,x_1,x_2]}{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}$。
   - 进而得到 $f(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)+f[x,x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$。
4. 以此类推：
   - 最终可以得到牛顿插值公式
     $N_n(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)+\cdots+f[x_0,x_1,\cdots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$

已知三个数据点 $(1,2)$、$(2,5)$、$(3,10)$，求牛顿插值多项式。

1. 计算差商表：
   - 首先列出数据点：

x	y
1	2
2	5
3	10

   - 计算一阶差商：
     - $f[x_0,x_1]=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}=\frac{5-2}{2-1}=3$。
     - $f[x_1,x_2]=\frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1}=\frac{10-5}{3-2}=5$。
   - 计算二阶差商：

- $f[x_0,x_1,x_2]=\frac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0}=\frac{5-3}{3-1}=1$。

差商表如下：

x	y	**一阶差商**	**二阶差商**
$x_0=1$	$y_0=1$		
$x_1=2$	$y_1=5$	$f[x_0,x_1]=3$	
$x_2=3$	$y_2=10$	$f[x_1,x_2]=5$	$f[x_0,x_1,x_2]=\frac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0}=1$

2. 构建牛顿插值多项式：
   - 根据差商表，牛顿插值多项式为：
$$N_2(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)$$
   - 代入数据点的值和差商：
$$N_2(x)=2+3(x-1)+1(x-1)(x-2)$$
   - 化简得：
$$N_2(x)=2+3x-3+x^2-3x+2=x^2+1$$

所以，对于给定的三个数据点，牛顿插值多项式为 $N_2(x)=x^2+1$。

4. 差分

以下是对上述内容的总结：

一、等距节点下的牛顿插值公式简化

在实际应用中常遇到等距节点的情形，即 $x_k=x_0+kh$（$k=0,1,\cdots,n$），其中 h 为常数步长。此时插值公式可以进一步简化且计算更简单。

二、差分的定义与计算

1. 对于等距节点，设 x_k 点的函数值为 $f_k = f(x_k)$。
    - 称 $\Delta f_k = f_{k+1} - f_k$ 为 x_k 处以 h 为步长的一阶（向前）差分。
    - 类似地，$\Delta^2 f_k = \Delta f_{k+1} - \Delta f_k$ 为 x_k 处的二阶差分。
    - 一般地，$\Delta^n f_k = \Delta^{n-1} f_{k+1} - \Delta^{n-1} f_k$ 为 x_k 处的 n 阶差分。

三、引入算子符号

为了表示方便，引入两个常用算子符号：

- I 为不变算子，$If_k = f_k$。
- E 为步长为 h 的移位算子，$Ef_k = f_{k+1}$。
- 由此可得
- $$\Delta f_k = Ef_k - If_k = (E-I)f_k$$
- 进一步有
- $$\Delta^n f_k = (E-I)^n f_k = \sum_{j=0}^{n}(-1)^j \binom{n}{j} E^{n-j} f_k = \sum_{j=0}^{n}(-1)^j \binom{n}{j} f_{n+k-j}$$
- 其中 $\binom{n}{j} = \frac{n(n-1)\cdots(n-j+1)}{j!}$ 为二项式展开系数。
- 另{.red}
- $$f_{n+k} = E^n f_k = (I+\Delta)^n f_k = \left[\sum_{j=0}^{n} \binom{n}{j} \Delta^j\right] f_k$$
- $$f[x_k, x_{k+1}] = \frac{f_{k+1} - f_k}{x_{k+1} - x_k} = \frac{\Delta f_k}{h}$$
- $$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}] = \frac{f[x_{k+1}, x_{k+2}] - f[x_k, x_{k+1}]}{x_{k+2} - x_k} = \frac{1}{2h^2}\Delta^2 f_k$$

四、差分与差商的关系及与导数的关系

1. 一般地有
   $$f[x_k, \cdots, x_{k+m}] = \frac{1}{m!}\frac{1}{h^m}\Delta^m f_k$$
2. 由上述关系和前面的公式又可得到差分与导数的关系：
   $$\Delta^n f_k = h^n f^{(n)}(\xi)$$
   其中 $\xi \in (x_k, x_{k+n})$。

::: primary

牛顿前插公式可以简单的理解为将 `等距均差/差商` 替换为 `前向差分`

:::

5. 分段插值

函数逼近

> - 插值：在节点处函数值相等
> - 拟合：在数据点处误差平凡和最小

1. 内积空间

一、定义

设 $C[a,b]$ 是区间 $[a,b]$ 上所有连续函数构成的集合。对于任意的 $f(x), g(x) \in C[a,b]$，定义内积为：
$(f,g) = \int_a^b f(x)g(x)dx$。

在这个定义下，$C[a,b]$ 构成一个内积空间。

二、性质

1. 对称性：$(f,g) = \overline{(g,f)}$，其中 $\overline{(g,f)}$ 表示 (g,f) 的共轭。对于实函数，即 $(f,g) = (g,f)$。
2. 线性性：对于任意的函数 $f(x), g(x), h(x) \in C[a,b]$ 和实数 α, β，有 $(\alpha f + \beta g, h) = \alpha(f,h) + \beta(g,h)$。
3. 正定性：$(f,f) \geq 0$，且 $(f,f) = 0$ 当且仅当 $f(x) = 0$。

在数值计算中，函数的范数是一个重要的概念。

2. 范数

一、定义

设 $f(x)$ 是定义在区间 $[a,b]$ 上的函数，函数的范数通常有以下几种定义：

1. L_p 范数：
   - 对于 $p \geq 1$，$f(x)$ 的 L_p 范数定义为 $\|f\|_{L_p} = \left(\int_a^b |f(x)|^p dx\right)^{\frac{1}{p}}$。
   - 当 $p=2$ 时，称为 L_2 范数，也记为 $\|f\|_2 = \sqrt{\int_a^b f(x)^2 dx}$。
2. 无穷范数：
   - $f(x)$ 的无穷范数定义为 $\|f\|_\infty = \max_{a \leq x \leq b} |f(x)|$。

二、性质

1. 正定性：对于任意函数 $f(x)$，$\|f\| \geq 0$，且 $\|f\| = 0$ 当且仅当 $f(x) = 0$。
2. 齐次性：对于任意实数 α 和函数 $f(x)$，$\|\alpha f\| = |\alpha|\|f\|$。
3. 三角不等式：对于任意函数 $f(x)$ 和 $g(x)$，$\|f+g\| \leq \|f\| + \|g\|$。
4. 平行四边形定理：$\|f+g\|_2^2 + \|f-g\|_2^2 = 2(\|f\|_2^2 + \|g\|_2^2)$。

   +++primary 证明如下：

   1. 首先计算 $\|f+g\|_2^2$：

      $\|f+g\|_2^2 = \int_a^b (f(x)+g(x))^2 dx = \int_a^b (f(x)^2 + 2f(x)g(x) + g(x)^2) dx = \int_a^b f(x)^2 dx + \int_a^b 2f(x)g(x) dx + \int_a^b g(x)^2 dx = \|f\|_2^2 + 2\int_a^b f(x)g(x)dx + \|g\|_2^2$$

5. 接着计算 $\|f-g\|_2^2$：

   $$\|f-g\|_2^2 = \int_a^b (f(x)-g(x))^2 dx = \int_a^b (f(x)^2 - 2f(x)g(x) + g(x)^2) dx = \int_a^b f(x)^2 dx - \int_a^b 2f(x)g(x) dx + \int_a^b g(x)^2 dx = \|f\|_2^2 - 2\int_a^b f(x)g(x)dx + \|g\|_2^2$$

6. 最后计算 $\|f+g\|_2^2 + \|f-g\|_2^2$

   $$\|f+g\|_2^2 + \|f-g\|_2^2 = (\|f\|_2^2 + 2\int_a^b f(x)g(x)dx + \|g\|_2^2) + (\|f\|_2^2 - 2\int_a^b f(x)g(x)dx + \|g\|_2^2) = 2(\|f\|_2^2 + \|g\|_2^2)$$

2.1 向量矩阵

一、向量范数

1. 定义：
   - 对于一个 n 维向量 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$，向量范数是一个非负实数 $\|\boldsymbol{x}\|$，满足以下三个性质：
     - 正定性：$\|\boldsymbol{x}\| \geq 0$，且 $\|\boldsymbol{x}\| = 0$ 当且仅当 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$。
     - 齐次性：对于任意实数 α，有 $\|\alpha\boldsymbol{x}\| = |\alpha|\|\boldsymbol{x}\|$。
     - 三角不等式：对于任意两个向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$，有 $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\| \leq \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\|$。
2. 常见的向量范数：

- p-范数：$\|\boldsymbol{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$，其中 $p \geq 1$。当 $p = 2$ 时，称为欧几里得范数或 2-范数，$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$。
- 1-范数：$\|\boldsymbol{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$。
- ∞-范数：$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$。

3. 应用：
   - 用于衡量向量的大小和长度，在数值分析、优化问题、机器学习等领域有广泛应用。例如，在优化算法中，向量范数可以用来衡量迭代过程中解的变化程度。

二、矩阵范数

1. 定义：
   - 对于一个 $m \times n$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}$，矩阵范数是一个非负实数 $\|\boldsymbol{A}\|$，满足以下四个性质：
     - 正定性：$\|\boldsymbol{A}\| \geq 0$，且 $\|\boldsymbol{A}\| = 0$ 当且仅当 $\boldsymbol{A} = \mathbf{0}$。
     - 齐次性：对于任意实数 α，有 $\|\alpha\boldsymbol{A}\| = |\alpha|\|\boldsymbol{A}\|$。
     - 三角不等式：对于任意两个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，有 $\|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\| \leq \|\boldsymbol{A}\| + \|\boldsymbol{B}\|$。
     - 相容性：对于任意两个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，有 $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\| \leq \|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{B}\|$。
2. 常见的矩阵范数：
   - Frobenius 范数：$\|\boldsymbol{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|^2}$，其中 a_{ij} 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 行第 j 列元素。
   - 诱导范数：由向量范数诱导而来，对于给定的向量范数 $\|\cdot\|$，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的诱导范数定义为 $\|\boldsymbol{A}\| = \max_{\boldsymbol{x}\neq\mathbf{0}} \frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}$。例如，由 2-范数诱导的矩阵范数也称为谱范数，$\|\boldsymbol{A}\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})}$，其中 $\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})$ 表示矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的最大特征值。

3. 正交

在数值计算中，带权正交是内积空间中一种特殊的正交关系。

一、定义

设 $C[a,b]$ 是区间 $[a,b]$ 上所有连续函数构成的内积空间，对于任意的 $f(x), g(x) \in C[a,b]$，定义带权内积为 $(f,g)_w = \int_a^b w(x)f(x)g(x)dx$，其中 $w(x)$ 是一个在区间 $[a,b]$ 上的非负函数，称为权函数。

如果两个函数 $f(x)$ 和 $g(x)$ 满足 $(f,g)_w = 0$，则称函数 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在带权内积空间中带权 $w(x)$ 正交。

二、举例

例如，在区间 $[-1,1]$ 上，取权函数 $w(x) = 1 - x^2$，函数 $f(x) = x$，$g(x) = x^2$。

$(f,g)_w = \int_{-1}^{1}(1-x^2)x \cdot x^2 dx = \int_{-1}^{1}(x^3 - x^5)dx = \left[\frac{x^4}{4} - \frac{x^6}{6}\right]_{-1}^{1} = \frac{1}{4} - \frac{1}{6} - \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{6}\right) = 0$。

所以在这个带权内积空间中，函数 x 与函数 x^2 带权 $w(x)$ 正交。

三、性质

1. 性质：
   - 带权正交也具有类似普通正交的一些性质，如对称性（若 f 与 g 带权正交，则 g 与 f 也带权正交）、线性性（若 f_1 与 g 带权正交，f_2 与 g 带权正交，则 $\alpha f_1 + \beta f_2$ 与 g 也带权正交，其中 α, β 为实数）等。
   - 零函数与任何函数在带权内积空间中都带权正交。

4. 最佳一致逼近

最佳一致逼近是数值分析中的一个重要概念。

一、基本概念

1. 设 $f(x) \in C[a,b]$，即 $f(x)$ 是区间 $[a,b]$ 上的连续函数。$p_n(x) \in H_n$，其中 H_n 是次数不超过 n 的多项式集合。

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

被称为 $f(x)$ 与 $p_n(x)$ 在 $[a,b]$ 上的偏差。

这个偏差衡量了多项式 $p_n(x)$ 与函数 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的++最大差异程度++.

$$E_n = \inf_{p_n \in H_n}\{\Delta(f, p_n)\} = \inf_{p_n \in H_n}\max_{a \leq x \leq b}|f(x) - p_n(x)|$$

称为 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的最小偏差。也就是要在所有次数不超过 n 的多项式中，找到与 $f(x)$ 偏差最小的那个值。

2. 若存在 $p_n^*(x) \in H_n$，使得 $\Delta(f, p_n^*) = E_n$，则称 $p_n^*(x)$ 是 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的 n 次最佳一致逼近多项式，也称为最小偏差逼近多项式或最佳逼近多项式。它是在次数不超过 n 的多项式中最接近函数 $f(x)$ 的那个多项式。

5. 最佳平方逼近

最佳平方逼近是一种重要的函数逼近方法。

一、基本概念

1. 对于函数 $f(x) \in C[a,b]$，如果存在一个 n 次多项式 $s^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j$（其中 φ_j 是一组基函数），使得
$$\int_a^b [f(x) - s^*(x)]^2 dx = \min_{s(x) \in H_n} \int_a^b [f(x) - s(x)]^2 dx$$
那么称 $s^*(x)$ 为 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的 n 次最佳平方逼近多项式。
   - 这里的目标是找到一个多项式，使得它与原函数 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的 **平方误差积分** 最小。
2. 若 $f(x) \in C[a,b]$，$\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \cdots, \varphi_n\} \subset C[a,b]$，存在 $s^*(x) \in \Phi$ 满足
$$\int_a^b \rho(x)[f(x) - s^*(x)]^2 dx = \min_{s(x) \in \Phi} \int_a^b \rho(x)[f(x) - s(x)]^2 dx$$
则称 $s^*(x)$ 为函数 $f(x)$ 在集合 Φ 上的最佳平方逼近函数。
   - 这里引入了权函数 $\rho(x)$，可以根据不同的需求对不同点的误差进行加权。

二、求解方法

1. 问题归结为 **求系数** a_j 使得
$$I(a_0, \cdots, a_n) = \int_a^b \rho(x)[f(x) - \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j]^2 dx$$
取得极小值。
   - 对 I 关于 a_k 求偏导，并令偏导数为 0，得到：
$$\frac{\partial I}{\partial a_k}(a_0, \cdots, a_n) = 2\int_a^b \rho(x)[f(x) - \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j]\varphi_k dx = 0.$$

> 将积分转为内积的形式得到
> $$\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j \varphi_k$$

2. 由此得到法方程：
$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f, \varphi_0) \\ (f, \varphi_1) \\ \vdots \\ (f, \varphi_n) \end{bmatrix}$$

- 其中 $(\varphi_k, \varphi_j) = \int_a^b \rho(x)\varphi_k(x)\varphi_j(x)dx$，$(f, \varphi_j) = \int_a^b \rho(x)f(x)\varphi_j(x)dx$。

三、性质与意义

1. 由于 $\varphi_0, \cdots, \varphi_n$ 线性无关，所以法方程系数行列式 $G_n \neq 0$，法方程有唯一解。这意味着可以确定唯一的最佳平方逼近函数。
2. 平方误差为：
$$\|\delta(x)\|_2^2 = (f - s^*, f - s^*) = (f, f) - (f, s^*) = \|f(x)\|_2^2 - \sum_{k=0}^{n} a_k^*(f, \varphi_k).$$

曲线拟合

1. 最小二乘法

最小二乘法是一种曲线拟合方法，用于在给定的数据点集上找到一个最佳的拟合函数。

一、误差度量

1. 首先定义误差的不同度量方式，包括
   - 无穷范数误差

     $\|\delta\|_\infty = \max_i |\delta_i| = \max_i |S(x_i) - f(x_i)|$
   - 1-范数误差

     $\|\delta\|_1 = \sum_{i=0}^n |\delta_i| = \sum_{i=0}^n |S(x_i) - f(x_i)|.$
   - 2-范数误差 $\|\delta\|_2 = \left(\sum_{i=0}^n \delta_i^2\right)^{\frac{1}{2}} = \left\{\sum_{i=0}^n [S(x_i) - f(x_i)]^2\right\}^{\frac{1}{2}}$
   - 其中 $\delta_i = S(x_i) - f(x_i)$ 表示在点 x_i 处拟合函数 $S(x)$ 与实际函数 $f(x)$ 的偏差。最小二乘法要求 2-范数误差平方最小，即 $\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^n \delta_i^2 = \sum_{i=0}^n [S(x_i) - f(x_i)]^2$ 最小。

二、一般提法

对于给定的数据 $(x_i, y_i)(i = 0, 1, \cdots, m)$，要求在给定函数类 $\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \cdots, \varphi_n\}$ 中找一函数 $s^*(x) = \sum_{j=0}^n a_j^* \varphi_j$，其中 $n < m$，使得 $s^*(x)$ 满足

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^m \delta_i^2 = \sum_{i=0}^m [s^*(x_i) - f(x_i)]^2 = \min_{s(x)\in\Phi} \sum_{i=0}^m [s(x_i) - f(x_i)]^2$$

三、更一般提法

更一般地，要求 $\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^m \omega(x_i)\delta_i^2 = \sum_{i=0}^m \omega(x_i)[s^*(x_i) - f(x_i)]^2 = \min_{s(x)\in\Phi} \sum_{i=0}^m \omega(x_i)[s(x_i) - f(x_i)]^2$，其中引入了权重函数 $\omega(x_i)$，可以根据不同的数据点重要性进行调整。

四、问题归结

将最小二乘法问题归结为求 $s(x) = \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x)$ 的系数 a_k，使得

$$I(a_0, \cdots, a_n) = \sum_{i=0}^m \omega(x_i)[\sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x_i) - f(x_i)]^2$$

取得极小值。

引入内积记号

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{i=0}^m \omega(x_i)\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i)$$

和

$$(f, \varphi_j) = \sum_{j=0}^m \omega(x_i) f(x_i)\varphi_j(x_i)$$

五、多项式拟合及法方程

常用多项式拟合，即 $\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \cdots, \varphi_n\} = \mathrm{span}\{1, x, \cdots, x^n\}$，$s^*(x) = \sum_{k=0}^n a_k^* x^k$。此时可以得到法方程为：

$$\begin{bmatrix} \sum\omega_i & \sum\omega_i x_i & \cdots & \sum\omega_i x_i^n \\ \sum\omega_i x_i & \sum\omega_i x_i^2 & \cdots & \sum\omega_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \sum\omega_i x_i^n & \sum\omega_i x_i^{n+1} & \cdots & \sum\omega_i x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum\omega_i y_i \\ \sum\omega_i x_i y_i \\ \vdots \\ \sum\omega_i x_i^n y_i \end{bmatrix}$$

通过求解这个法方程，可以得到多项式拟合的系数 a_k，从而确定最小二乘解 $s^*(x)$。

可以通过线性变换将非线性拟合转化为线性拟合

数值积分

+++info imphasis

插值型求积公式的概念，求积系数及相关性质

掌握基本的数值求积公式，中矩形求积公式，梯形求积公式，辛普森公式及对应的复化求积公式

自适应求积的基本思想

掌握龙贝格求积的思想及龙贝格求积公式

针对具体的问题会计算代数精度，会用具体的求积公式进行计算求解

---

1. 插值求积与代数精度

一、插值求积

1. 基本概念
   - 插值求积是基于插值多项式来近似计算定积分的方法。其核心思想是先利用已知节点上的函数值构造一个插值多项式，然后**对这个插值多项式进行积分来近似原函数的定积分。**
2. 具体方法
   - 设给定区间$[a,b]$上的$n+1$个节点$x_0,x_1,\cdots,x_n$及对应的函数值$f(x_0),f(x_1),\cdots,f(x_n)$。
   - 通过这些节点构造一个插值多项式$L_n(x)$，使得$L_n(x_i)=f(x_i)$，$i=0,1,\cdots,n$。
   - 然后计算插值多项式的积分$\int_a^b L_n(x)dx$作为原函数定积分$\int_a^b f(x)dx$的近似值。

二、代数精度

1. 定义
   - 若一个数值求积公式对于所有次数不超过m的多项式都能准确成立，而对于某个$m+1$次多项式不成立，则称该求积公式具有m次代数精度。
2. 意义
   - 代数精度是衡量数值求积公式准确性的一个重要指标。代数精度越高，说明该求积公式在对多项式函数进行积分时的准确性越高。
   - 通过确定求积公式的代数精度，可以评估不同求积公式的优劣，为选择合适的求积方法提供依据。
3. 与插值求积的关系
   - 对于插值求积法，其代数精度与所使用的插值多项式的次数有关。一般来说，插值多项式的次数越高，插值求积公式的代数精度也越高。
   - 例如，梯形公式是基于一次插值多项式的求积公式，其代数精度为 1；辛普森公式是基于二次插值多项式的求积公式，其代数精度为 3。

一、插值求积公式的表达式与性质

1. 插值基函数：

- $l_k(x)=\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\ \ (k=0,1,\cdots,n)$
  - **插值求积公式定义：**

    求积公式

$$\int_a^b f(x)dx\approx\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$$

    其系数$A_k=\int_a^b l_k(x)dx$时，则称求积公式为插值求积公式。

2. 求积公式推导：
   - 对于积分$\int_a^b l_k(x)dx=\sum_{j=0}^{n}A_jl_k(x_j)$，其中$l_k(x_j)=\delta_{kj}=\begin{cases}1 & k=j\\0 & k\neq j\end{cases}$。
   - 取$f(x)=l_k(x)$时，$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b l_k(x)dx=\sum_{j=0}^{n}A_jl_k(x_j)$，所以有$A_k=\int_a^b l_k(x)dx$，此时求积公式为插值型求积公式。

插值求积公式的余项

1. 余项表达式：
    - 设插值求积公式的余项为$R(f)$，由插值余项定理得
    $$R(f)=\int_a^b[f(x)-P(x)]dx=\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)dx$$
    其中$\xi\in[a,b]$。
2. 当$f(x)$是次数不高于n的多项式时，$f^{(n+1)}(x)=0$，$R(f)=0$，求积公式能成为准确的等式。

插值型求积公式的充要条件与代数精度

1. 定理：

- $n+1$个节点的求积公式$\int_a^b f(x)dx\approx\sum_{k=0}^n A_kf(x_k)$为插值型求积公式的充要条件是公式至少具有$n$次代数精度。

2. 证明：
    - 必要性：若求积公式为插值型求积公式，求积系数为$A_k=\int_a^b l_k(x)dx$。又$f(x)=P(x)+R(x)$，当$f(x)$为不高于n次的多项式时，$f(x)=P(x)$，其余项$R(f)=0$，因而这时求积公式至少具有n次代数精度。
    - 充分性：若求积公式至少具有n次代数精度，则对n次多项式
    $l_k(x_j)=\delta_{kj}=\begin{cases}1 & k=j\\0 & k\neq j\end{cases}$
    精确成立.$f(x)=l_k(x)$时，$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b l_k(x)dx=\sum_{j=0}^n A_jl_k(x_j)$，所以有$A_k=\int_a^b l_k(x)dx$，此时求积公式为插值型求积公式。

代数精度：若求积公式至少具有n次代数精度，则对n次多项式，可得方程组

$$\begin{cases}A_0+A_1+\cdots+A_n=b-a\\A_0x_0+A_1x_1+\cdots+A_nx_n=\frac{b^2-a^2}{2}\\\cdots\cdots\\A_0x_0^n+A_1x_1^n+\cdots+A_nx_n^n=\frac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1}\end{cases}$$

这是关于A_k的线性方程组，其系数矩阵是范得蒙矩阵，当$x_k(k=0,1,\cdots,n)$互异时非奇异，故A_k有唯一解。

四、求积系数与定义

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}dx$$

称为求积系数。

2. 求积公式

> 梯形和中矩形只有1次代数精度，辛普森有3次代数精度

一、牛顿-柯特斯公式

1. **梯形公式**：
    - 对于区间 $[a,b]$ 上的定积分 $\int_a^b f(x)dx$，将区间分为两部分，用连接两点 $(a,f(a))$ 和 $(b,f(b))$ 的直线（即梯形的上下底）来近似代替曲线 $f(x)$，得到梯形公式：
    $$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$
2. **中矩形公式**：
$$\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)f(\frac{a+b}{2})$$
3. **辛普森公式**：
    - 将区间 $[a,b]$ 分为三部分，用二次抛物线来近似代替曲线 $f(x)$。辛普森公式为：
    $$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$$

4. 牛顿-柯特斯公式一般形式：
   - 对于 $n+1$ 个节点的牛顿-柯特斯公式为，$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k)$其中 $C_k^{(n)}$ 是柯特斯系数，$x_k = a + k\frac{b-a}{n}$。

二、高斯型求积公式

1. 基本思想：

- 高斯型求积公式是在积分区间上选取适当的节点和权系数，使得求积公式具有尽可能高的代数精度。

2. 公式形式：

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

   其中 x_k 是求积节点，A_k 是求积系数。

代数精度：**插值积分至少有n次精度**

3. 复化求积公式

1. 复化梯形公式：

- 将区间 $[a,b]$ 分成 n 个子区间，在每个子区间上应用梯形公式，然后将结果相加。复化梯形公式为：

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)]$$

   其中 $h = \frac{b-a}{n}$，$x_i = a + ih$。

2. 复化辛普森公式：
   - 类似地，将区间分成 n 个子区间，在每个子区间上应用辛普森公式，然后相加。复化辛普森公式为：

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

4. 低阶求积公式余项

具有n阶代数精度的求积公式都可认为是n阶的插值求积公式

$$R = I - I^* = \int_a^b S - S^* dx = \int_a^b R_s dx = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx$$

4.1 梯形公式的余项

1. 梯形公式（4.1.1）的余项为

$$R_T = I - T = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx$$

   取的左右端点，做的一阶插值

2. 由于积分的核函数$(x-a)(x-b)$ 在区间$[a,b]$上保号（非正），应用积分中值定理，在(a,b)内存在一点η，使得

$$R_T = \frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3, \quad \eta \in (a,b)$$

4.2 Simpson 公式的余项

1. Simpson 公式（4.2.3）的余项$R_S = I - S = \int_a^b [f(x) - H(x)]dx$，其中$H(x)$是构造的次数不大于三的多项式，满足 $H(a) = f(a)$，$H(b) = f(b)$，$H(c) = f(c)$，$H'(c) = f'(c)$，$c = \frac{a+b}{2}$ 。
2. 由于 Simpson 公式具有**三次代数精度**，对于这样构造出的三次式$H(x)$是准确的，即 $\int_a^b H(x)dx = \frac{b-a}{6}[H(a) + 4H(c) + H(b)]$，上式右端实际上等于按 Simpson 公式（4.2.3）求得的积分值S。
3. 对于满足条件（4.2.6）的多项式$H(x)$，其插值余项

   $f(x) - H(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)$，

   所以

$$R_S = \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)dx$$

4. 积分核$(x-a)(x-c)^2(x-b)$在$[a,b]$上保号（非正），用积分中值定理有

$$R_S = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)dx = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)$$

4.3 Cotes 公式的余项

1. Cotes 公式（4.2.4）的积分余项仅列出结果为$R_C = I - C = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta)$。

4.4 复化梯形余项

$$R_n = I - T_n = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 f''(\xi)$$

4.5 复化辛普森余项

$$R_n = -\frac{b-a}{180}(h)^4 f^{(4)}(\xi),\quad h = \frac{b-a}{n}$$

5. 自适应求积

一、基本思想

1. 从一个较粗的积分步长开始，计算积分的近似值。
2. 然后将**积分步长减半**，**再次计算积分近似值**。
3. 比较两次计算结果的差异，如果差异较大，则继续减小步长进行计算，直到满足一定的精度要求。

二、变步长梯形公式

1. 首先用梯形公式计算积分的近似值：

- 对于区间$[a,b]$上的定积分$\int_a^b f(x)dx$，梯形公式为$T(h) = \frac{h}{2}[f(a)+f(b)] + \sum_{i=1}^{n-1} hf(x_i)$，其中$h = \frac{b-a}{n}$，$x_i = a + ih$。

2. 将步长减半，得到新的近似值：

- 令$h' = \frac{h}{2}$，新的梯形公式为$T(h') = \frac{h'}{2}[f(a)+f(b)] + \sum_{i=1}^{2n-1} h' f(x_i')$。

3. 计算两次近似值的差异：
    - 可以得到

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

三、变步长辛普森公式

1. 类似地，可以从辛普森公式出发，逐步减小步长进行计算。

   辛普森公式为

$$S(h) = \frac{h}{6}[f(a)+f(b)+4\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i})]$$

2. 递推公式为

$$S_{2n} = \frac{S_n}{2} + \frac{h}{4}\sum_{i=0}^{n-1}\left[f(x_{2i+\frac{1}{2}}) + f(x_{2i+\frac{3}{2}})\right]$$

6. Romberg 算法

> 龙贝格

龙贝格算法是一种用于数值积分的高效方法，以下是对图片内容的整理：

一、龙贝格算法计算步骤

1. 按变步长梯形公式计算积分近似值：
    - 对于区间$[a,b]$，先进行区间划分，区间长度$h = \frac{b-a}{n}$ （$n = 2^k$）。

   - 变步长梯形公式为$T_{2n}=\frac{T_n}{2}+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})$，其中$x_{k+\frac{1}{2}}=a+(k+\frac{1}{2})h$。
2. 按加速公式求加速值：
   - 梯形公式加速：$S_n=T_{2n}+\frac{T_{2n}-T_n}{3}$（此处以整理后的正确公式为准，图片中可能有误）。
   - Simpson 加速公式：$C_n=S_{2n}+\frac{S_{2n}-S_n}{15}$。
   - 龙贝格求积公式：$R_n=C_{2n}+\frac{C_{2n}-C_n}{63}$。

二、公式推导过程

1. 从柯特斯公式的误差公式进一步导出龙贝格公式：$R_n=\frac{64}{63}C_{2n}-\frac{1}{63}C_n$。
2. 考察 Simpson 法，其截断误差与h^4成正比，若将步长折半，则误差减至$\frac{1}{16}$，即$\frac{I-S_{2n}}{I-S_n}\approx\frac{1}{16}$，由此可得$I=\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n$，可以验证上式右端的值等于$C_n$，即$C_n=\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n$。
3. 用梯形法二分前后两个积分值T_n和T_{2n}作线性组合，可得到复化 Simpson 公式计算得到的积分值S_n，即$S_n=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n$。

三、精度控制

直到相邻两次积分值$|R_{2n}-R_n|<\varepsilon$（其中ε为允许的误差限），则终止计算并取R_n作为积分的近似值。

龙贝格算法通过变步长将粗糙的梯形值逐步加工成精度较高的 Simpson 值、柯特斯值和龙贝格值，将收敛缓慢的梯形值序列加工成收敛迅速的龙贝格值序列。

#

1. 计算向量 $x=(1,-2,3)^T$ 的各种范数 []{.gap}{.quiz .fill}

   > $\|x\|_1=6,\|x\|_\infty=3,\|x\|_2=\sqrt{14}$

2. **题目**：设 $f(x)=\sqrt{1+x^2}$，求在区间 $[0,1]$ 上的一次最佳平方逼近多项式。

   解析：

   1. 首先计算内积：
      - $(f,\varphi_0)=\int_0^1\sqrt{1+x^2}dx=\frac{1}{2}\ln(1+\sqrt{2})+\frac{\sqrt{2}}{2}\approx1.147$。
      - $(f,\varphi_1)=\int_0^1x\sqrt{1+x^2}dx=\frac{1}{3}(1+x^2)^{\frac{3}{2}}\Big|_0^1=\frac{2\sqrt{2}-1}{3}\approx0.609$。
   2. 得到方程组：
      - $\begin{bmatrix}1&1/2\\1/2&1/3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\a_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.147\\0.609\end{bmatrix}$。
   3. 解方程组得：$a_0=0.934$，$a_1=0.426$。
      - 故一次最佳平方逼近多项式为 $S_1^*(x)=0.934+0.426x$。
   4. 计算平方误差：
      - $\|\delta(x)\|_2^2=(f(x),f(x))-(S_1^*(x),f(x))=\int_0^1(1+x^2)dx-0.426d_1-0.934d_0=0.0026$，其中$d_0=(S_1^*(x),\varphi_0)$，$d_1=(S_1^*(x),\varphi_1)$。
   5. 计算最大误差：
      - $\|\delta(x)\|_\infty=\max_{0\le x\le1}|\sqrt{1+x^2}-S_1^*(x)|\approx0.066$。

3. 试确定一个至少具有 2 次代数精度的公式$\int_0^4f(x)dx\approx Af(0)+Bf(1)+Cf(3)$。
   - 解：要使公式具有 2 次代数精度，则对$f(x)=1,x,x^2$求积公式准确成立，即得方程组$\begin{cases}A+B+C=4\\B+3C=8\\B+9C=\frac{64}{3}\end{cases}$，解得$A=\frac{14}{3},B=\frac{4}{3},C=\frac{8}{3}$。因此，所求公式为$\int_0^4f(x)dx\approx\frac{14}{3}f(0)+\frac{4}{3}f(1)+\frac{8}{3}f(3)$。

4. 试确定求积系数 A、B、C 使$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx Af(-1)+Bf(0)+Cf(1)$具有最高的代数精度。
    - 解：分别取$f(x)=1,x,x^2$使求积公式准确成立，即得$\begin{cases} A+B+C=2 \\ -A+C=0 \\ A+C=\frac{2}{3} \end{cases}$，所得求积公式为$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{3}f(-1)+\frac{4}{3}f(0)+\frac{1}{3}f(1)$。可验证该求积公式对于$f(x)=1,x,x^2,x^3$都准确成立，对于$f(x)=x^4$不能准确成立，所以求积公式具有 3 次代数精度。

5. 考察求积公式$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{2}[f(-1)+2f(0)+f(1)]$的代数精度。
    - 解：可以验证，对于$f(x)=1,x$时，公式两端相等；再将$f(x)=x^2$代入公式，左端为$\int_{-1}^{1} x^2dx=\frac{2}{3}$，右端为$\frac{1}{2}[f(-1)+2f(0)+f(1)]=\frac{1}{2}[1+1]=1$，左端不等于右端，所以求积公式具有 1 次代数精度。且三个节点不一定具有 2 次代数精度，因为不是插值型的。

6. 给定求积式$\int_{0}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{3}[2f(\frac{1}{4})-f(\frac{1}{2})+2f(\frac{3}{4})]$，求证此求积公式是插值型求积公式。

   解：
    - 首先计算插值基函数：
        - $l_0(x)=\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)/\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{4}-\frac{3}{4}\right)=8\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)$。
        - $l_1(x)=\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)/\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{3}{4}\right)=-16\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)$。
        - $l_2(x)=\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)/\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{2}\right)=8\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)$。
    - 然后计算积分：
        - $\int_0^1 l_0(x)dx=8\int_0^1\left(x^2-\frac{5}{4}x+\frac{3}{8}\right)dx=8\left(\frac{1}{3}-\frac{5}{4}\times\frac{1}{2}+\frac{3}{8}\right)=\frac{8}{3}-2=\frac{2}{3}$。
        - $\int_0^1 l_1(x)dx=(-16)\int_0^1\left(x^2-x+\frac{3}{16}\right)dx=(-16)\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{2}+\frac{3}{16}\right)=\frac{16}{6}-3=-\frac{1}{3}$。
        - $\int_0^1 l_2(x)dx=8\int_0^1\left(x^2-\frac{3}{4}x+\frac{1}{8}\right)dx=8\left(\frac{1}{3}-\frac{3}{4}\times\frac{1}{2}+\frac{1}{8}\right)=\frac{8}{3}-2=\frac{2}{3}$。
    - 由插值型求积公式的定义知，所给的求积公式是插值型求积公式。

7. **题目**：
   计算定积分$I=\int_0^1 \ln x dx$，依次用$n=8$的复化梯形公式和$n=4$的复化 Simpson 公式进行计算。

   解：
    1. 当$n=8$时：
        - $h=\frac{1}{8}=0.125$。
        - 由复化梯形公式可得计算公式：
          $T_8=\frac{1}{16}[f(0)+2f(0.125)+2f(0.25)+2f(0.375)+2f(0.5)+2f(0.625)+2f(0.75)+2f(0.875)+f(1)]=0.9456909$
          。
    2. 当$n=4$时：
        - 由复化 Simpson 公式可得计算公式：
          $S_4=\frac{1}{24}[f(0)+f(1)+2(f(0.25)+f(0.5)+f(0.75))+4(f(0.125)+f(0.375)+f(0.625)+f(0.875))]=0.9460832$
          。
    3. 积分准确值$I=0.9460831$。
    4. 两种方法都需要提供 9 个点上的函数值，计算量基本相同，但精度差别较大。与积分准确值比较，复化梯形公式只有两位有效数字，而复化 Simpson 公式却有六位有效数字。

8. **题目**：
   用变步长梯形求积公式计算定积分$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$。

   解：
    1. 先对整个区间$[0,1]$用梯形公式：
        - 已知$f(x)=\frac{\sin x}{x}$，$f(0)=1$，$f(1)=0.8410709$。
        - 所以$T_1=\frac{1}{2}[f(0)+f(1)]=0.9207355$。
    2. 然后将区间二等分：
        - 由于$f(\frac{1}{2})=0.958851$，故有$T_2=\frac{1}{2}T_1+\frac{1}{2}f(\frac{1}{2})=0.9397933$。
    3. 进一步二分求积区间，并计算新分点上的函数值：
        - $f(\frac{1}{4})=0.9896158$，$f(\frac{3}{4})=0.9088516$。
        - 有$T_4=\frac{1}{2}T_2+\frac{1}{4}[f(\frac{1}{4})+f(\frac{3}{4})]=0.9445135$。
    4. 这样不断二分下去，积分准确值为0.9460831，从计算结果表中可看出用变步长二分 10 次可得此结果。

9. **题目**：用龙贝格算法计算定积分$I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$，要求相邻两次龙贝格值的偏差不超过$10^{-5}$。

   解：
    1. 已知$a=0$，$b=1$，$f(x)=\frac{4}{1+x^2}$。

2. 首先计算梯形值：

 - $T_1 = \frac{1}{2}[f(0) + f(1)] = \frac{1}{2}(4 + 2) = 3$。
 - $T_2 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{1}{2}f(\frac{1}{2}) = \frac{1}{2} \times 3 + \frac{1}{2} \times \frac{16}{5} = 3.1$。
 - $T_4 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{1}{4}[f(\frac{1}{4}) + f(\frac{3}{4})] = \frac{1}{2} \times 3.1 + \frac{1}{4}(3.764 + 2.56) = 3.13118$。
 - $T_8 = \frac{1}{2}T_4 + \frac{1}{8}[f(\frac{1}{8}) + f(\frac{3}{8}) + f(\frac{5}{8}) + f(\frac{7}{8})] = 3.13899$。
 - $T_{16} = \frac{1}{2}T_8 + \frac{1}{16}[f(\frac{1}{16}) + f(\frac{3}{16}) + f(\frac{5}{16}) + f(\frac{7}{16}) + f(\frac{9}{16}) + f(\frac{11}{16}) + f(\frac{13}{16}) + f(\frac{13}{16}) + f(\frac{15}{16})] = 3.1409$。

3. 然后计算 Simpson 值：

 - $S_1 = \frac{4}{3}T_2 - \frac{1}{3}T_1 = 3.1333$。
 - $S_2 = \frac{4}{3}T_4 - \frac{1}{3}T_2 = 3.14157$。
 - $S_4 = \frac{4}{3}T_8 - \frac{1}{3}T_4 = 3.14159$。
 - $S_8 = \frac{4}{3}T_{16} - \frac{1}{3}T_8 = 3.14159$。

4. 接着计算柯特斯值：

 - $C_1 = \frac{16}{15}S_2 - \frac{1}{15}S_1 = 3.14212$。
 - $C_2 = \frac{16}{15}S_4 - \frac{1}{15}S_2 = 3.14159$。
 - $C_4 = \frac{16}{15}S_8 - \frac{1}{15}S_4 = 3.14159$。

5. 最后计算龙贝格值：

 - $R_1 = \frac{64}{63}C_2 - \frac{1}{63}C_1 = 3.14158$。
 - $R_2 = \frac{64}{63}C_4 - \frac{1}{63}C_2 = 3.14159$。

6. 由于$|R_2 - R_1| \leq 0.00001$，于是有$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx \approx 3.14159$。