

0x00 前言

0x01 参考资料

重庆大学 周尚波老师 2022春 PPT

0x10 误差分析

0x11 算法性能

算法性能评价：简单以实现，收敛与稳定，计算效率高，行之有效

0x12 误差来源

误差来源：模型误差（设计模型时的近似化），观测误差（测量），截断误差（方法产生的误差），舍入误差（保留小数）

0x13 绝对误差，相对误差和有效数字

绝对误差： $e = x^* - x$ ，其中 x^* 为真值

绝对误差限： $|e| \leq \epsilon$ ，则 ϵ 为绝对误差限

相对误差： $e_r = \frac{x^* - x}{x^*} = \frac{x^* - x}{x}$

相对误差限： $|e_r| \leq \epsilon_r$

精确值经过四舍五入后得到的近似值，绝对误差限为近似值末位的**半个单位**

有效数字：根据**绝对**误差限定义，绝对误差限若是某数位的半个单位，则到该数位为止，第一个非零数开始，非零数的个数

- 例：已知下列近似值的绝对误差限都是0.005,问它们具有几位有效数字？

$a=12.175, b=-0.10, c=0.1, d=0.0032$

由于0.005是小数点后第2数位的半个单位,所以 a 有4位有效数字1、2、1、7, b 有2位有效数字1、0, c 有1位有效数字1, d 没有有效数字。

$$x = \pm 0.a_1 a_2 \dots a_k \times 10^m$$
$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

要求 x 有 n 位($n \leq k$)有效数字，精确值的有效数字认为是无限多位

0x14 数值计算中的若干原则

- 避免相近的数相减（相对误差放大）

$$\text{当 } x_1 \approx x_2 \text{ 时, 有 } \log x_1 - \log x_2 = \log \frac{x_1}{x_2}$$

$$\text{当 } x \approx 0 \text{ 时, 有 } 1 - \cos x = 2 \sin^2 \frac{x}{2}$$

$$\text{当 } x \gg 1 \text{ 时, 有 } \sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}$$

- 大数吃小数：加减运算避免相对差值大的数加减运算，应采取从小到大的运算过程
- 绝对值太小的数不宜做除数：溢出，绝对误差放大
- 减少计算次数：一是计算量防止太大；二是误差积累
- 选用数值稳定性好的算法：数值稳定性好，指计算舍入误差可控制的

0x20 线性代数方程组的解法

	定义	存储量	工作量	程序复杂度	适用矩阵阶数	例
直接法	有限次四则运算，无舍入误差则得到精确解	小	小	高	低	高斯消元，LU分解
迭代法	极限过程，迭代	高	大	低	高	雅可比迭代，高斯赛德尔迭代，最速下降法，共轭梯度法

0x21 高斯消元法

严格对角占优：对角线上的绝对值大于对应行其他元素绝对值之和，严格对角占优的矩阵在消元过程中，主元不会等于0

列主元消去法：第k步选择k行以下的绝对值最大值为主元，经矩阵初等行变换

全主元消去法：第k步选择k行以下k列以右的绝对值最大值为主元，经矩阵初等变换

目的：防止大数吃小数和舍入误差传播

追赶法：

[例2] 如果方程组 $Ax=b$ 的系数矩阵 A 是 n 阶三对角阵，
即当 $|i-j|>1$ 时， $a_{ij}=0$, 或写成

$$\begin{bmatrix} d_1 & c_1 & & & \\ a_1 & d_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-2} & d_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_{n-1} & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{bmatrix}$$

```

•input  $(a_i), (b_i), (c_i), (d_i)$ 
•for  $i=2,3,\dots,n$  do
     $a_{i-1} / d_{i-1} \Rightarrow l$ 
     $d_i - lc_{i-1} \Rightarrow d_i$ 
     $b_i - lb_{i-1} \Rightarrow b_i$ 
•end
•  $b_n / d_n \Rightarrow x_n$ 
•for  $i=n-1,n-2,\dots,1$  do
     $(b_i - c_i x_{i+1}) / d_i \Rightarrow x_i$ 
•end
•output  $(x_i)$ 

```

0x22 LU分解

- **LU分解**: L为下三角矩阵, 对角线上元素为1, U为上三角矩阵
- **定理**: 非奇异方阵的LU分解唯一
- 迭代公式见书上及ppt

0x23 雅可比迭代

$$\begin{aligned}
 Ax &= b \\
 (L + D + U)x &= b \\
 Dx &= -(L + U)x + b \\
 &\downarrow \\
 x &= Bx + g \\
 &\downarrow \\
 x^{(k+1)} &= Bx^{(k)} + g
 \end{aligned}$$

- **雅可比迭代**: 要求系数矩阵非奇异
- 构造方法: 原线性方程组移项到右边, 解出x
- **迭代格式**:

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

0x24 高斯-塞德尔迭代 (Gauss-Seidel)

- 雅可比迭代基础上, 利用现求的结果
- 优点: 节省存储, 简化计算
- 缺点: 收敛性差
- 迭代格式: $x^{(k+1)} = D^{-1}[b - (Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)})]$

0x25 逐次超松弛迭代法

- 来源: 由高斯-塞德尔迭代格式变化而来
-

将高斯-塞德尔迭代格式

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)}) \quad i=1,2,\dots,n$$

改写为:

$$x_i^{(k+1)} = \mathbf{x}_i^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^n a_{ij}x_j^{(k)}) \quad i=1,2,\dots,n$$

并记

$$r_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^n a_{ij}x_j^{(k)} \quad i=1,2,\dots,n$$

- 残量为 r_i^{k+1}
- 迭代格式:

将残量乘以一个修正量加到 $x_i^{(k)}$ 上, 作为新的结果

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^n a_{ij}x_j^{(k)}) \quad i=1,2,\dots,n$$

这就是**逐次超松弛迭代法 (SOR方法)**, ω 称为**松弛因子**。

SOR方法的计算公式也常写为:

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

- 注意后面那个公式是从i+1开始的

0x26 收敛性定理

向量的范数

- 定义:

设定义在 n 维向量空间 R^n 上的非负实值函数 $\|\cdot\|$ 满足: 正定性 (大于等于0, 且等于的位置在向量为零向量时取得), 齐次性 (数乘), 三角不等式, 则称实值函数为向量空间 R^n 向量范数

- 范数是一种函数
- 常见范数:

对任意向量 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in R^n$, 定义:

$$(1) \quad \|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i| = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n|$$

$$(2) \quad \|x\|_2 = \sqrt{x^T x} = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$$

$$(3) \quad \|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$$

矩阵的范数

- **定义:** 设定义在 n 阶实矩阵空间 $R^{n \times n}$ 上的非负实值函数 $\|\cdot\|$ 满足: 正定性, 齐次性, 三角不等式, 自相容性 $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$, 则为矩阵范数

- 常见范数:

$$(1) \quad \|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad \text{列范数}$$

$$(2) \quad \|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad \text{行范数}$$

-

$$(3) \quad \|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)} \quad \text{谱范数}$$

$$(4) \quad \|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2} \quad \text{F范数}$$

- **谱半径:** 方阵的特征值的模 (绝对值) 取max (注意是复数范围)

收敛性判别

- **定理3:** 简单迭代法对任意初始向量收敛的**充要条件**是迭代矩阵B的谱半径小于1
 - 注意: 若谱半径大于1, 可能存在初始向量使得简单迭代法收敛
- **定理4:** 若迭代矩阵B的1范数 (列范数) 或无穷范数 (行范数) **小于1**, 则对任意初始向量收敛
 - 证明: 核心是证残差在极限意义下为0, 然后利用公式迭代
- **雅可比方法的收敛性**
 - 迭代矩阵谱半径小于1 (充要条件)
 - 迭代矩阵范数小于1, 则关于任意初始向量收敛
 - 系数矩阵若严格行对角占优或严格列对角占优, 则关于任意初始向量收敛
- **高斯-塞德尔收敛性**
 - $B_{GS} = -(D + L)^{-1}U, g_{GS} = (D + L)^{-1}b$
- **SOR方法的收敛性**
 - 低松弛方法: $\omega < 1$; 超松弛方法: $\omega > 1$
 - SOR方法收敛, 则 $0 < \omega < 2$
 - 若系数矩阵A正定且w对, 则方法收敛
 - 若系数矩阵严格对角占优且 $0 < \omega \leq 1$, 则SOR方法收敛
 - **最佳松弛因子:** 使SOR收敛最快的w取值, $\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - (\rho(J))^2}}$, J为雅可比迭代法迭代矩阵的谱半径

0x27 最速下降法

- 推导看书
- 矩阵A对称正定
- 迭代格式

$$\begin{cases} x^{(k+1)} = x^{(k)} + \tau_k r^{(k)} \\ \tau_k = \frac{r^{(k)^T} r^{(k)}}{r^{(k)^T} A r^{(k)}} \\ r^{(k)} = b - A x^{(k)} \end{cases} \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

(1) 任取 $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ ，计算 $r^{(0)} = b - A x^{(0)}$

(2) 对 $k = 0, 1, 2, \dots$ ，计算

$$\alpha_k = (r^{(k)}, r^{(k)}) / (A r^{(k)}, r^{(k)})$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k r^{(k)}$$

$$r^{(k+1)} = b - A x^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A r^{(k)}$$

停机准则

若 $\frac{\|r^{(k+1)}\|}{\|r^{(0)}\|} < \varepsilon$ ，则输出 $x^* = x^{(k+1)}$ ，停止计算

- 收敛格式

定理： 设 A 对称正定，其特征值为 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n > 0$
则由最速下降法产生的序列满足

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^* = A^{-1}b$$

且有

$$\|x^{(k)} - x^*\|_A \leq \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_n}{\lambda_1 + \lambda_n} \right)^k \|x^{(0)} - x^*\|_A$$

• 当 $\lambda_1 \gg \lambda_n$ 时，收敛会很慢，并可能出现不稳定现象 (舍入误差引起)

0x28 共轭梯度法

- 推导看书
- **A-正交 (A-共轭)：** 设 A 对称正定，若 $(x, Ay) = 0$ ，则称 x, y 关于 A 正交 (A -正交) 或 A -共轭
- **A-正交向量组 (A-共轭向量组)：** 若 z_1, z_2, \dots, z_n 两两 A -共轭

定理： 设 A 对称正定，则由 CG 算法产生的序列满足

(1) 当 $i \neq j$ 时， $(r^{(i)}, r^{(j)}) = 0$ ，即 $r^{(0)}, r^{(1)}, r^{(2)}, \dots$ 相互正交

(2) 当 $i \neq j$ 时， $(p^{(i)}, A p^{(j)}) = 0$ ，即 $p^{(0)}, p^{(1)}, p^{(2)}, \dots$ 相互 A -共轭

(1) 任取 $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, 计算 $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, 令 $p^{(0)} = r^{(0)}$

(2) 对 $k = 0, 1, 2, \dots$, 计算

$$\alpha_k = (r^{(k)}, r^{(k)}) / (Ap^{(k)}, p^{(k)})$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$$

$$r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}$$

若 $\|r^{(k+1)}\| / \|r^{(0)}\| < \varepsilon$, 则输出 $x^* = x^{(k+1)}$, 停止计算

$$\beta_k = (r^{(k+1)}, r^{(k+1)}) / (r^{(k)}, r^{(k)})$$

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

定理: 设 A 对称正定, 则共轭梯度法至多 n 步就能找到精确解。

● $r^{(0)}, r^{(1)}, \dots, r^{(n)}$ 相互正交, 则至少有一个为 0

定理: 设 A 对称正定, x^* 为精确解, $x^{(k)}$ 为共轭梯度法的数值解, 则有

$$\|x^{(k)} - x^*\|_A \leq 2 \left(\frac{\sqrt{K} - 1}{\sqrt{K} + 1} \right)^k \|x^{(0)} - x^*\|_A$$

其中 $K = \text{cond}(A)_2 = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$

0x29 条件数与病态方程组

- **条件数** $\text{Cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$, 条件数交大则称为病态方程组 ($A^{-1} = \frac{A^*}{|A|}$)
- 若 A 对称非奇异, 则条件数为 $\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$
- 判断是否病态, 一般凭经验得出
 - 行列式很大或很小
 - 元素间数量级相差大
 - 主元消去过程中有小主元
 - 特征值相差大数量级

0x30 非线性方程求根

0x31 增值寻根法与二分法

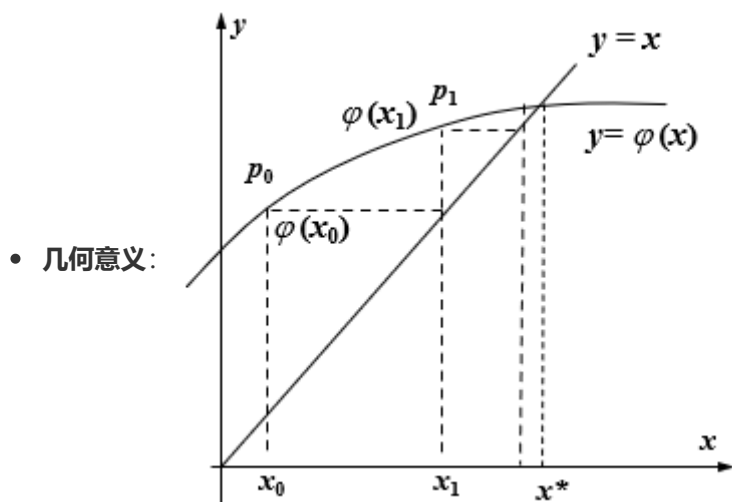
- **增值寻根法:** 按照某一步长线性扫描, 由零点定理推知
- **二分法停机准则:**

$$|x_n - x^*| \leq \frac{b-a}{2^n} < \epsilon$$
$$n > \frac{\ln(b-a) - \ln \epsilon}{\ln 2}$$

•

0x32 迭代法

- **基本原理**：由函数零点的等式 $F(x) = 0$ 构造不动点等式 $x = \phi(x)$ ，构造迭代公式 $x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)})$
- **收敛性判断**：若由迭代公式产生的点序列收敛，则收敛处为原方程的根



- **收敛条件**： **压缩映像原理** (不要只判断李普希茨条件!)

设迭代函数 $\phi(x)$ 在闭区间 $[a, b]$ 上满足

$$(1) \quad x \in [a, b] \Rightarrow \phi(x) \in [a, b], \text{ 即 } a \leq \phi(x) \leq b$$

$$(2) \quad \phi(x) \text{ 满足 Lipschitz (李普希兹常数) 条件}$$

$$\text{即: } \forall x_1, x_2 \in [a, b] \text{ 有 } |\phi(x_1) - \phi(x_2)| \leq L|x_1 - x_2|$$

$$\text{且 } 0 < L < 1 \text{ 。}$$

则 $x = \phi(x)$ 在 $[a, b]$ 上存在唯一解 x^* (亦称为 $\phi(x)$ 的不动点)。

且对 $\forall x_0 \in [a, b]$ ，由 $x_{k+1} = \phi(x_k)$ 产生的序列 $\{x_k\}$ 收敛于 x^* 。

证明：1.根的存在性 2.根的唯一性 3.收敛

若迭代函数的导函数绝对值小于1，则满足李普希茨条件

- **误差估计**

$$|x_n - x^*| \leq \frac{1}{1-L} |x_{n+1} - x_n|$$

$$|x_n - x^*| \leq \frac{L^n}{1-L} |x_1 - x_0|$$

注意使用范围，前者是终止条件，后者用于预先估计迭代次数

- **发散判别**

设方程 $x = \phi(x)$ 在区间 $[a, b]$ 内有根 x^* ，且存在 $L \geq 1$

有 $|\phi'(x)| \geq L$ ，则对任意初值 $\forall x_0 \in [a, b]$ ，且 $x_0 \neq x^*$ ，

迭代过程 $x_{k+1} = \phi(x_k)$ 发散。

注意大于L是对于任意x

- **比较迭代函数**

看初始点，如果这里的导数大于1则发散，否则**局部**收敛

- **收敛速度**

- 设序列收敛, 令 $\epsilon_n = x^* - x_n$, 若有 $p \geq 1$ 和正常数 C , 使 $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|\epsilon_{n+1}|}{|\epsilon_n|^p} = C$, 则称该序列 **p阶收敛**, 若序列由某迭代过程产生, 则称该迭代过程 **p阶收敛**, C 称为渐近误差常数
 - 线性收敛, 超线性收敛, 平方收敛 (二次收敛)
 - 收敛阶判别**
 - 当 $\phi'(x^*) = \dots = \phi^{(p-1)}(x^*) = 0$, 且 $\phi^{(p)}(x^*) \neq 0$ 时, 称该迭代过程 **p阶收敛**
- 证明思路:** 泰勒展开到 $p-1$ 阶, 拉格朗日余项在 p 阶, 然后根据定义算

0x33 迭代收敛的加速

- 松弛法**

$$\omega_n = \frac{1}{1 - \phi'(x_n)}$$

$$x_{n+1} = (1 - \omega_n)x_n + \omega_n \phi(x_n)$$

其中 w 为松弛因子, 公式推导用微分中值定理

- 埃特金方法**

$$x_{n+1}^{(1)} = \phi(x_n)$$

$$x_{n+1}^{(2)} = \phi(x_{n+1}^{(1)}) \quad n = 0, 1, 2 \dots$$

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

- 应试题型:** 构造迭代过程证明极限: 首先对迭代过程求根, 然后证明迭代过程收敛

0x34 牛顿迭代法

一阶导数Newton法

- 迭代格式**

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

- 收敛性**

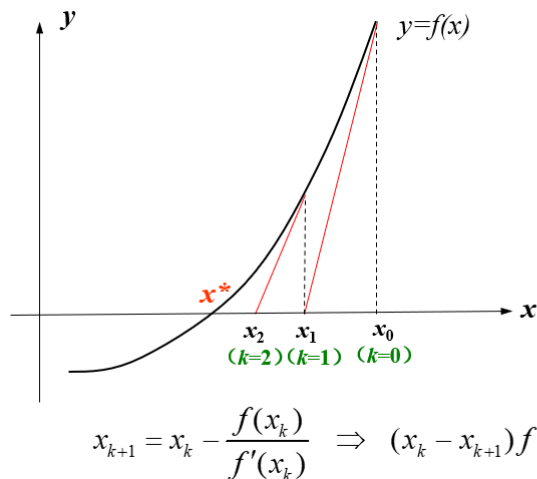
Newton法的迭代函数是 $\phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$

从而 $\phi'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$

由此知: 若 x^* 是 $f(x) = 0$ 的一个**单根**, 则 $\phi'(x^*) = 0$, 说明Newton法是**局部收敛**的, 并且收敛速度至少是平方收敛的。

但如果 x^* 是 $f(x) = 0$ 的 $m(>1)$ **重根**, 则 $\phi'(x^*) = 1 - \frac{1}{m}$, 从而 $0 < \phi'(x^*) < 1$ 此时Newton法仅有线性收敛速度。

- 几何意义



- 判根

定理 设 $f(x) \in C^2[a, b]$ 满足

- (1) $f(a)f(b) < 0$; ($f(x)$ 在 $[a, b]$ 内有根)
- (2) $f'(x)f''(x) \neq 0, \forall x \in [a, b]$ ($f(x)$ 的根唯一, 凹向不变)
- (3) $f(x_0)f''(x_0) > 0, \exists x_0 \in [a, b]$ ($\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \in [a, b]$)

则 $f(x)=0$ 在 $[a, b]$ 上有且仅有一个实根;

迭代公式 $x_{n+1} = \varphi(x_n)$ 收敛于 $f(x)=0$ 的根 x^* .

$$\text{且 } \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\varepsilon_{n+1}}{\varepsilon_n^2} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_{n+1} - x^*}{[x_n - x^*]^2} = \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}.$$

理解: 一阶导数法, 单根二阶收敛

证明思路: 保号性, 单调有界数列有极限

二阶导数Newton法

- 迭代格式

$$x_{n+1} = x_n - \frac{2f(x_n)f'(x_n)}{2[f'(x_n)]^2 - f''(x_n)f(x_n)}$$

0x35 割线法

单点割线法

- 又名定端点弦截法
- 思路: 固定一个点, 每次参照这个点作弦
- 迭代公式

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_0}{f(x_n) - f(x_0)} f(x_n)$$

-
- 收敛速度: 线性收敛

双点割线法

- 又名变端点弦截法，快速弦截法
- 迭代公式

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n)$$

- 收敛速度：超线性收敛， $p=1.618$

0x36 抛物线法

- 迭代格式

设 x_k, x_{k-1}, x_{k-2} 是 $f(x)=0$ 三个近似根，利用 $f(x_k), f(x_{k-1}), f(x_{k-2})$ 构造二次插值多项式 $P_2(x)$ ，并适当选取 $P_2(x)$ 的一个零点 x_k 作为新的近似根，这样确定的迭代过程称为抛物线法，也称 Müller 法，即

$$x_{k+1} = x_k - \frac{2f(x_k)}{\omega + \text{sign}(\omega)\sqrt{\omega^2 - 4f(x_k)f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}]}}$$

其中， $\omega = f[x_k, x_{k-1}] + f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}](x_k - x_{k-1})$

根号前的符号取与 ω 相同的符号。

抛物线法也是超线性收敛，其收敛阶 $p=1.840$

注： $f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}]$ 为差商

0x40 函数插值与函数逼近

- 记住n+1个点对应n次插值多项式

0x41 拉格朗日插值公式

二次插值或抛物插值 通过三点的插值

插值基函数 $l_k(x)$

拉格朗日插值公式

$$P(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1 \quad \text{两点插值}$$

Misplaced &

0x42 牛顿插值公式

- 思想：迭代，方便新增点时在原有基础上调整，无需重新计算

差商定义

差商具有对称性（点排序无关） 归纳法证明

$$p_0(x) = y_0$$

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + a_n \prod_{i=0}^{n-1} (x - x_i)$$

其中 $a_n = f(x_0, x_1, \dots, x_n)$ ，为差商公式，可归纳法证明

差商表绘画

差商表

x	$f(x)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商
x_0	$f(x_0)$			
x_1	$f(x_1)$	$f(x_0, x_1)$		
x_2	$f(x_2)$	$f(x_1, x_2)$	$f(x_0, x_1, x_2)$	
x_3	$f(x_3)$	$f(x_2, x_3)$	$f(x_1, x_2, x_3)$	$f(x_0, x_1, x_2, x_3)$

$$f(x_0, x_1, \dots, x_k) = \frac{f(x_0, x_1, \dots, x_{k-1}) - f(x_1, x_2, \dots, x_k)}{x_0 - x_k}$$

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

0x43 埃特金插值公式

- 思想：线性函数视为形式点

Aitken插值表

Aitken 插值表

x	$f(x)$			
x_0	$f(x_0)$			
x_1	$f(x_1)$	$p_{0,1}(x)$		
x_2	$f(x_2)$	$p_{0,2}(x)$	$p_{0,1,2}(x)$	
x_3	$f(x_3)$	$p_{0,3}(x)$	$p_{0,1,3}(x)$	$p_{0,1,2,3}(x)$

$$p_{0,1,2,\dots,n-1,n}(x) = p_{0,1,2,\dots,n-2,n}(x) \frac{x - x_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} + p_{0,1,2,\dots,n-2,n-1}(x) \frac{x - x_n}{x_{n-1} - x_n}$$

$p_{0,1,2,\dots,n}$ 的性质：

带入下标有的点的横坐标可以得到对应纵坐标，否则为0

对于整块表，所用的插值点为 $x_0, x_1, \dots, x_n, x_i, x_j$ ，其中 x_0, \dots, x_n 已经构造成为形式点，对 i 和 j 插值

0x44 存在唯一性定理

定理1 对于 $n+1$ 个点用 n 次多项式插值，有且仅有一个这样的多项式

（注意证明用到定理次数不超过 n 的多项式最多有 n 个根，证明思路是反证作差）

0x45 插值余项

定理2 多项式在区间 $[a,b]$ 可微分 $n+1$ 次（说明多项式次数至少为 n ）有误差估计（有 $n+2$ 个样本点）：

$$E(f; x) = f(x) - p_n(x) = \frac{\prod_{i=0}^n (x - x_i)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)$$

证明：分两种情况：一种情况是采样点位置，直接算；另外一种首先构造辅助函数

$g(z) = f(z) - h(z) - \frac{w(z)}{w(x)}(f(x) - h(x))$ ，注意产生了新的零点 $z = x$ ，之后利用罗尔定理（微分中值定理取两个零点）判零点个数，按辅助函数导数阶数递推到只有一个零点，利用该零点证明

计算 $f^{(n+1)}(\xi)$

下面讨论定理2误差估计中 $f^{(n+1)}(\xi)$ 项的计算。

设 $x \in [a, b]$ ($x \neq x_i, i = 0, 1, \dots, n$)，由差商定义，有

$$f(x) = f(x_0) + f(x, x_0)(x - x_0)$$

$$f(x, x_0) = f(x_0, x_1) + f(x, x_0, x_1)(x - x_1)$$

$$f(x, x_0, x_1) = f(x_0, x_1, x_2) + f(x, x_0, x_1, x_2)(x - x_2)$$

\vdots

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

于是

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f(x, x_0)(x - x_0) \\ &= f(x_0) + [f(x_0, x_1) + f(x, x_0, x_1)(x - x_1)](x - x_0) \\ &= f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x, x_0, x_1)(x - x_0)(x - x_1) \end{aligned}$$

$= \dots$

$$\begin{aligned} &= f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1) + \dots \\ &\quad + f(x_0, x_1, \dots, x_n)(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) \\ &\quad + f(x, x_0, x_1, \dots, x_n)(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) \end{aligned}$$

另一方面，由Newton公式

$$\begin{aligned} p_n(x) &= f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1) + \dots \\ &\quad + f(x_0, x_1, \dots, x_n)(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) \end{aligned}$$

故 $R_n(x) = f(x) - p_n(x)$

$$= f(x, x_0, x_1, \dots, x_n)(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$$

$$\text{而由定理2知 } R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$$

$$\text{比较两式，得 } f(x, x_0, x_1, \dots, x_n) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

龙格现象：插值次数越高，在端点附件的逼近效果越差

0x46 分段三次埃尔米特插值

- 思想：要求更严，在一阶导也符合
- 两个样本点——一阶导符合——2*2个点——三次
 - 如何构造插值基函数？实际上是两个两重根，所以对于原函数样本点的插值基函数形式为 $h(x) = (x - x_i)^2(a + bx)$ ；一阶导则为 $h(x) = (x - x_i)^2(x - x_{i+1})k$ ，思考原因，因为对于一阶导样本点的插值基函数的三个根都已知，但原函数未知（插值基的导函数才为0），实际上，后者是前者的特殊形式。再深入思考，为何选取一个点，另外一个点是 $(x - x_i)^2$ 而不是 $(x - x_i)(a_i + b_i x_i)$ ？因为求导后有两种情况：该项求导然后乘以一个函数；或不求导然后乘以一个求过导的函数，无论如何，都是为0

- 也可以从插值基函数角度思考：见书上

$$H(x) = f(x_i)h_1(x) + f(x_{i+1})h_2(x) + f'(x_i)h_3(x) + f'(x_{i+1})h_4(x)$$

$$h_1(x) = (1 + 2 \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}) (\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i})^2$$

$$h_3(x) = (x - x_i) (\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i})^2$$

- 分段三次埃尔米特插值误差估计：若 $f(x) \in C^4[x_i, x_{i+1}]$, $H(x)$ 是分段三次埃尔米特插值函数，则插值余项为

$$f(x) - H(x) = \frac{(x - x_i)^2 (x - x_{i+1})^2}{4} f^{(4)}(\xi_i)$$

- **证明思路**：首先构造辅助函数 $g(z) = f(z) - h(z) - \frac{w(z)}{w(x)}(f(x) - h(x))$ ，注意产生了新的零点 $z = x$ ，之后利用罗尔定理（微分中值定理取两个零点）判零点个数，按辅助函数导数阶数递推到只有一个零点，利用该零点证明

0x47 三次样条插值

- 思路：样本点的切线和斜率连续

定义 给定 $[a, b]$ 的分划： $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ ，如果函

数 $s(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上满足以下条件：

- (1) 在每一个子区间 (x_i, x_{i+1}) ($i=0, 1, \dots, n-1$) 上， $s(x)$ 是三次多项式
- (2) $s(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上具有二阶连续导数；
- (3) $s(x_i) = y_i$ ($i=0, 1, \dots, n$), $s'(x_0) = y'_0$, $s'(x_n) = y'_n$ 。我们就称 **$s(x)$ 为三次样条函数**。

- 与三次埃尔米特插值的区别：三次样条函数导数未知
- 条件：
 - 子区间上是三次多项式
 - 整个闭区间二阶导**连续**
 - 原函数，一阶导为样本点
- 三转角算法
 - 推导方法：二阶导连续，边界条件（自然条件），利用三次埃尔米特插值可以将四个待定参数降低为一个待定参数
 - **计算过程**

利用分段三次埃尔米特插值的结果（**三转角算法**）

$$H(x) = f(x_i)h_1(x) + f(x_{i+1})h_2(x) + f'(x_i)h_3(x) + f'(x_{i+1})h_4(x)$$

设

$$s(x) = f(x_i)s_1(x) + f(x_{i+1})s_2(x) + m_i s_3(x) + m_{i+1} s_4(x)$$

其中, m_i, m_{i+1} 为待定参数。

$$s_1(x) = h_1(x) = \left(1 + 2 \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right) \left(\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}\right)^2$$

$$s_2(x) = h_2(x) = \left(1 + 2 \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}\right) \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right)^2$$

$$s_3(x) = (x - x_i) \left(\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}\right)^2 \quad s_4(x) = (x - x_{i+1}) \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right)^2$$

$$h_i = x_{i+1} - x_i$$

$$\begin{pmatrix} 2 & \alpha_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1-\alpha_2 & 2 & \alpha_2 & 0 & \cdots & 0 \\ & 1-\alpha_3 & 2 & \alpha_3 & \cdots & 0 \\ & & \vdots & & & \\ & & & 1-\alpha_{n-2} & 2 & \alpha_{n-2} \\ & & & & 1-\alpha_{n-1} & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ \vdots \\ m_{n-2} \\ m_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 - (1-\alpha_1)y'_0 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \vdots \\ \beta_{n-2} \\ \beta_{n-1} - \alpha_{n-1}y'_n \end{pmatrix}$$

其中: $\alpha_i = \frac{h_{i-1}}{h_{i-1} + h_i}$

$$\beta_i = 3 \left[(1-\alpha_i) \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}} + \alpha_i \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} \right]$$

一般情况下, y'_0, y'_n 未知, 此时可设

$$\lim_{x \rightarrow x_0^+} s''(x) = \lim_{x \rightarrow x_n^-} s''(x) = 0$$

$$\text{可得到: } 2m_0 + m_1 = \frac{3}{h_0}(y_1 - y_0), m_{n-1} + 2m_n = \frac{3}{h_{n-1}}(y_n - y_{n-1})$$

于是有

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1-\alpha_1 & 2 & \alpha_1 & 0 & \cdots & 0 \\ & 1-\alpha_2 & 2 & \alpha_2 & \cdots & 0 \\ & & \vdots & & & \\ & & & 1-\alpha_{n-1} & 2 & \alpha_{n-1} \\ & & & & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ m_{n-1} \\ m_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{h_0}(y_1 - y_0) \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_{n-1} \\ \frac{3}{h_{n-1}}(y_n - y_{n-1}) \end{pmatrix}$$

- 注意结果是n个分段函数!

0x50 B样条曲线与最小二乘拟合

0x51 贝齐尔 (Bezier) 曲线

- 定义: 由一组多边折线各顶点唯一确定, 折线只有第一点和最后一点在曲线上
- $f(t)$ 的Bernstein多项式

$$\sum_{k=0}^n f\left(\frac{k}{n}\right) C_n^k t^k (1-t)^{n-k} = \sum_{k=0}^n f\left(\frac{k}{n}\right) B_{k,n}(t), 0 \leq t \leq 1$$

其中B为n次Bernstein多项式的基函数

- Bezier曲线

$$B_n(P_0, P_1, \dots, P_n, t) = \sum_{k=0}^n P_k B_{k,n}(t)$$

其中 P_i 为形式点, 规定 $0! = 0^0 = 1$

- Bernstein的求导PPT6
- Bezier曲线在两端点处的切矢方向与Bezier控制多边形的第一条边和最后一条边一致。(对Bezier曲线求导可证)

0x52 B样条函数

- **n次截幂函数**: 通俗说只取幂函数大于0的部分, 表示为 x_+^n
- **n阶B样条函数**: $M_n(x) = \frac{1}{(n-1)!} \sum_{k=0}^n (-1)^k C_n^k (x + \frac{n}{2} - k)_+^{n-1}$
- **重要性质**:
 - 是分段n-1次多项式, 节点为 $x_k = -\frac{n}{2} + k$. n为偶数时节点为整数, 奇数时节点为整数偏移0.5 (半整数)
 - \mathbb{R} 上 (不是值为大于0的部分) 有n-2次连续导数 (引起连续性变化的地方在 $x = -n/2$ 节点处)
 - 偶函数
 - 值域为 $[0, 1]$, 当x绝对值超过n/2时为0, 否则大于0

- 在大于0的地方，节点数量为n+1个，其中包含两个临界值端点（注意跳跃点，即原函数某点左右极限不等时取加权平均，类似于傅里叶级数的做法）
- 大胆猜测：R上积分为1

0x53 B样条曲线

$$S_m(t) = \sum_{k=0}^n P_k M_{m+1}(nt - k) \quad (0 \leq t \leq 1)$$

其中有n个型值点

0x54 自由曲线设计

0x55 最小二乘拟合

0xa0 应试题型归纳
