数值计算方法与算法

1 绪论

1.对任一向量$X \in \boldsymbol{R}^n$，按照一个规则确定一个非负实数与它对应，记该实数为$\|X\|$。若$\|X\|$满足下面三个性质：

（1）任取$X \in \boldsymbol{R}^n$，有$\|X\| \geq 0$，当且仅当$X = 0$时取等（非负性）；

（2）任取$X \in \boldsymbol{R}^n, \alpha \in \boldsymbol{R}$，有$\|\alpha X\| = |\alpha|\|X\|$（齐次性）；

（3）任取$X, Y \in \boldsymbol{R}^n$，有$\|X + Y\| \leq \|X\| + \|Y\|$（三角不等式）；

则称实数$\|X\|$为向量X的范数。

2.向量$X = (x_1, \cdots, x_n)^T$的L_p范数定义为：$\|X\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{1/p}, 1 \leq p \leq +\infty$。经常使用的三种$L_p$范数是$p = 1,2,\infty$，即

- 1 范数（曼哈顿范数）：$\|X\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$；
- 2 范数（欧几里得范数）：$\|X\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$；
- ∞范数：$\|X\|_\infty = \max\limits_{1 \leq i \leq n} \{|x_i|\}$。

3.若$R_1(X), R_2(X)$是$\boldsymbol{R}^n$上两种不同的范数定义，则必存在$0 < m < M < \infty$，使$\forall X \in \boldsymbol{R}^n$，均有$m < \frac{R_1(X)}{R_2(X)} < M$。

4.设$A \in \boldsymbol{R}^{n \times n}$，记方阵$A$的范数为$\|A\|$，矩阵范数满足下列性质：

（1）$\|A\| \geq 0$，当且仅当$A = 0$时取等（非负性）；

（2）任取$\lambda \in \boldsymbol{R}$，有$\|\lambda A\| = |\lambda|\|A\|$（齐次性）；

（3）任取$A, B \in \boldsymbol{R}^{n \times n}$，有$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$（三角不等式）；

设$\|\cdot\|$是$\boldsymbol{R}^n$上的一个向量范数，则由$\|A\| = \sup\limits_{\|X\|=1} \|AX\|, A \in \boldsymbol{R}^{n \times n}$定义的是实值函数$\|A\|$是一个诱导矩阵范数，它满足：

（4）任取$A, B \in \boldsymbol{R}^{n \times n}$，则$\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$（相乘性）；

（5）$\forall X \in \boldsymbol{R}^n$，恒有$\|AX\| \le \|A\| \cdot \|X\|$（相容性）；

5.常用矩阵范数

$$\|A\|_1 = \max_{1\le j\le n}\left\{\sum_{i=1}^{n}\left|a_{ij}\right|\right\}\text{（列和范数）}$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1\le i\le n}\left\{\sum_{j=1}^{n}\left|a_{ij}\right|\right\}\text{（行和范数）}$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^TA)},\text{谱半径}\rho(A) = \max_{1\le i\le n}|\lambda_i|$$

$$\|A\|_F = (\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\left|a_{ij}\right|^2)^{\frac{1}{2}}\text{（非诱导范数，但与}\|X\|_2\text{相容，}\|I\|_F = n^{\frac{1}{2}}\text{）}$$

对任一种从属范数有$\|I\| = 1$，即单位矩阵的范数是 1。

6.对任一相容的矩阵范数，$|\lambda| \le \|A\|$，$\rho(A) \le \|A\|$，对任意$\varepsilon > 0$，存在一个矩阵相容范数使得$\|A\| < \rho(A) + \varepsilon$。

7.当$\lim\limits_{k\to\infty} A^k = 0$ 时，称A为收敛矩阵。$\lim\limits_{k\to\infty} A^k = 0$ 的充分必要条件是$\rho(A) < 1$或存在相容范数$\|\cdot\|$，使得$\|A\| < 1$。

8.若A非奇异，称$Cond_p(A) = \|A\|_p\left\|A^{-1}\right\|_p$为$A$的条件数，其中$\|\cdot\|_p$表示矩阵的某种范数。$Cond(A) \ge 1$，当$A$为正交矩阵时，$Cond(A) = 1$。

9.设$A \in \boldsymbol{R}^{n\times n}, b \in \boldsymbol{R}^n, Ax = b$，$A$非奇异，$\delta A$和$\delta b$是$A$和$b$的扰动，$\left\|A^{-1}\right\|\|\delta A\| < 1$，则$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{Cond(A)}{1-Cond(A)\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\delta b\|}{\|b\|})$。

10.若存在范数$\|\cdot\|$，使得$\|A\| < 1$，则$I - A$可逆，且$(I-A)^{-1} = \sum A^k$，$||(I-A)^{-1}|| \le \frac{1}{1-||A||}$。

11.设A非奇异，则$min\{\frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2}: A + \delta A\text{奇异}\} = \frac{1}{Cond_2(A)}$。

2 非线性方程求根

非线性方程求根，需要给定初始值或求解范围，迭代求解。

1.对分法

2.迭代法

$f(x)=0 \Rightarrow x=\varphi(x)$，若$\lim_{k\to\infty} x_{k+1}=\lim_{k\to\infty}\varphi(x_k)=x^*$，则$f(x^*)=0$。

若$\varphi(x)$在区间$[a,b]$上连续且可导，$a<\varphi(x)<b$，存在$L<1$，$|\varphi'(x)|\le L$，那么存在唯一的点x^*使得$x^*=\varphi(x^*)$成立，且$x_{k+1}=\varphi(x_k)$对任意初值均收敛于x^*，$|x^*-x_k|\le\frac{L^k}{1-L}|x_1-x_0|$。

构造迭代格式的要素为：（1）等价形式$x=\varphi(x)$满足$|\varphi'(x^*)|<1$；（2）初始值在x^*的充分小邻域。

3.收敛阶

对于迭代格式$x_{k+1}=\varphi(x_k)$，若$\lim_{k\to\infty}\frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p}=C>0$，则称该迭代格式为 p 阶收敛的，C 称为渐进误差常数。

4.Newton 迭代法

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

若x^*为$f(x)$单根，则迭代格式在x^*附近 2 阶收敛。若x^*为$f(x)$的 m 重根，则迭代格式在x^*附近 1 阶收敛。修正为下述格式可 2 阶收敛：

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

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

5.弦截法

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

6.非线性方程组的 Newton 方法

$$J(X^{(k)})\Delta X^{(k)}=-F(X^{(k)})$$

$$X^{(k+1)}=X^{(k)}+\Delta X^{(k)}$$

在 X 邻域若$\rho(X)<1$或$||J(X)||_\infty<1$，初始值接近解，则迭代收敛。

3 解线性方程组的迭代法

1.$AX=b\Rightarrow X=MX+b$，若$\lim\limits_{k\to\infty}X^{(k+1)}=\lim\limits_{k\to\infty}MX^{(k)}+b=X^*$，则 $\mathrm{A}X^*=b$。迭代格式收敛的充要条件是$\rho(M)<1$，一个充分条件是$\|A\|_p<1$，与初值选取无关。

3.Jacobi 迭代

$$X^{(k+1)}=RX^{(k)}+g,R=I-D^{-1}A,g=D^{-1}b$$

若A严格对角优，Jacobi 迭代收敛。

4.Guass-Seidel 迭代

$$X^{(k+1)}=SX^{(k)}+f,S=-(D+L)^{-1}U,f=(D+L)^{-1}b$$

若A严格对角优或严格正定，Guass-Seidel 迭代收敛。

5.松弛迭代（SOR）

SOR 收敛的必要条件是 $0<\omega<2$。若A对称正定，则当 $0<\omega<2$ 时，SOR 迭代收敛。

4 解线性方程组的直接法

1.Guass 消元法、Guass-Jordan 消元法。Guass 消元过程顺利进行$\Leftrightarrow A$的各阶主子式不为零

2.Guass 列主元消元法

3.Doolittle 分解：$A=LU$，L为单位下三角阵，U为上三角阵。

4.Crout 分解：$A=LU$，L为下三角阵，U为单位上三角阵。

5.三对角方程组的追赶法

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & \\ c_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & c_n & a_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} u_1 & & & \\ w_2 & \ddots & & \\ & \ddots & u_{n-1} & \\ & & w_n & u_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & v_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & v_{n-1} \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

6.对称正定矩阵的 $\mathrm{LDL^T}$分解和 cholesky 分解：$A=LDL^T$，L单位下三角阵，D为对角阵。$A=PP^T$，P为对角元大于零的下三角阵。

5 计算矩阵的特征值与特征向量

1.幂法

幂法是计算按模最大特征值及相应特征向量的数值方法，要求矩阵A具有完备的特征向量系。

设A有特征值$|\lambda_1|\geq\cdots\geq|\lambda_n|$，做迭代$x^{(k+1)}=A^kx^{(0)}$。

（1）若$|\lambda_1|>|\lambda_2|\geq\cdots\geq|\lambda_n|$，有$\lambda_1\approx x^{(k+1)}/x^{(k)},v_1\approx x^{(k+1)}$，收敛速度取决于$|\lambda_2|/|\lambda_1|$。

（2）若$|\lambda_1|=|\lambda_2|>|\lambda_3|\geq\cdots\geq|\lambda_n|$，有$\lambda_1^2\approx x^{(2k+2)}/x^{(2k)},\lambda_2^2\approx x^{(2k+1)}/x^{(2k-1)},v_1\approx x^{(k+1)}+\lambda_1x^{(k)},v_2\approx x^{(k+1)}+\lambda_2x^{(k)}$。

采用规范运算

$$\begin{cases}y^{(k)}=x^{(k)}/||x^{(k)}||_\infty\\ \quad x^{(k+1)}=Ay^{(k)}\end{cases}$$

（1）若$\{y^{(k)}\}$收敛，则$\lambda_1\approx||x^{(k+1)}||_\infty,v_1\approx y^{(k)}$。

（2）若$\{y^{(2k)}\},\{y^{(2k+1)}\}$收敛于符号相反的向量，则$\lambda_1\approx-||x^{(k+1)}||_\infty,v_1\approx y^{(k)}$

（3）若$\{y^{(2k)}\},\{y^{(2k+1)}\}$收敛于两个不同的向量，且不是符号相反，则$\lambda_1\approx\sqrt{x^{(k+1)}/y^{(k-1)}},\lambda_2=-\lambda_1,v_1\approx x^{(k+1)}+\lambda_1x^{(k)},v_2\approx x^{(k+1)}+\lambda_2x^{(k)}$。需要注意，$x^{(k+1)}=Ax^{(k)}$，即最后一次迭代是非规范的。

2.反幂法

$$\begin{cases}y^{(k)}=x^{(k)}/||x^{(k)}||_\infty\\ \quad Ax^{(k+1)}=y^{(k)}\end{cases}$$

若A有特征值$|\lambda_1|\geq\cdots|\lambda_{n-1}|>|\lambda_n|$，则得到值$\frac{1}{\lambda_n}$和$v_n$，$A$的按模最小特征值越

小，收敛越快。

带原点位移的反幂法：

$$\begin{cases} y^{(k)} = x^{(k)}/||x^{(k)}||_\infty \\ (A-pI)x^{(k+1)} = y^{(k)} \end{cases}$$

得到特征值μ，于是A的按模最小特征值$\lambda_i = p + \frac{1}{\mu}$。它可以用来求矩阵$A$最接近于$p$的特征值和特征向量。

3.实对称矩阵的 Jacobi 方法

$$\begin{cases} A \leftarrow Q^T A Q \\ V \leftarrow VQ \end{cases}$$

4.若$\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n, ||\boldsymbol{v}|| = 1$，则矩阵$H = I - 2vv^T$称为 Householder 矩阵，且满足性质：（1）$det(H) =- 1$;（2）H为对称正交矩阵；（3）若$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$，且$||\boldsymbol{x}|| = ||\boldsymbol{y}||$，记$\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}}{||\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}||}$，则$H\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$。

4.QR 分解定理：设A列满秩，则能被分解为$A = QR$形式，其中Q为酉矩阵，R为非奇异的上三角阵。

推论：设A列满秩，则能被唯一分解为$A = QR$形式，其中Q为正交矩阵，R为非奇异的上三角阵。

取A第一列$\boldsymbol{\alpha_1}$，令$\boldsymbol{v_1} = \frac{\boldsymbol{\alpha_1} - ||\boldsymbol{\alpha_1}||\boldsymbol{e_1}}{||\boldsymbol{\alpha_1} - ||\boldsymbol{\alpha_1}||\boldsymbol{e_1}||}$，构造$H_1$，于是$H_1 A = \begin{pmatrix} ||\boldsymbol{\alpha_1}|| & * \\ 0 & A_1 \end{pmatrix}$，继续进行，得到系列$H$，于是$R = HA, Q = H^T$。

5.QR 方法

设A有特征值$|\lambda_1| > \cdots > |\lambda_n|$，分解$A_k$，并迭代得$A_{k+1}$：

$$\begin{cases} A_k = Q_k R_k \\ A_{k+1} = R_k Q_k \end{cases}$$

当$k \to \infty$时，$\{A_k\}$收敛于上三角矩阵，对角线元素为特征值。

6 插值

1.设$\{x_i\}_{i=0}^n$为$n+1$ 个互不相等的节点，$\Phi = span\{\varphi_0, \cdots, \varphi_n\}$是$n+1$ 维线性

空间，则插值函数$\varphi(x)$存在且唯一。

2.多项式插值的 Lagrange 形式

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} l_i(x)f(x_i)\,,l_i(x)=\prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne i}}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}$$

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

$$|R_n(x)|\le\frac{M}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,,\left|f^{(n+1)}(x)\right|\le M,x\in[a,b]$$

性质：$\sum_{0\le i\le n} l_i(x)\equiv 1$

后验误差估计，设$f^{(n+1)}(x)$在插值区间内连续且变化不大，L_n为去下x_i的插值函数，$\tilde{L}_n$为去下x_j的插值函数，则

$$R_n(x)\approx\frac{x-x_i}{x_i-x_j}(L_n(x)-\tilde{L}_n(x))$$

4.差商

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

k阶差商$f[x_0,\cdots,x_k]$由函数值$f(x_0),\cdots,f(x_k)$的线性组合而成，$f[x_0,\cdots,x_k]=\sum_{i=0}^{k}[f(x_i)\prod_{0\le j\ne i\le k}\frac{1}{x_i-x_j}]$。

若$\{i_0,\cdots,i_k\}$是$\{1,\cdots,k\}$的任一排列，则$f[x_0,\cdots,x_k]=f[x_{i_0},\cdots,x_{i_k}]$，即差商的值只与节点有关而与节点顺序无关。

若$f(x)$为m次多项式，则$f[x_0,\cdots,x_k]$为$m-k$次多项式。

若多项式$p(x)$插值于$\{x_i,f(x_i)\}_{i=0}^{n}$，则$f[x_0,\cdots,x_n]$等于$p(x)$最高次项的系数。

设$f\in C^n[a,b]$，存在$\xi\in(a,b)$，使得$f[x_0,\cdots,x_n]=\frac{1}{n!}f^{(n)}(\xi)$。

5.多项式插值的 Newton 形式

（1）构造差商表

（2）构造插值多项式

$$N_n(x)=\sum_{i=0}^{n}f[x_0,\cdots,x_i]t_i(x)\,,t_0(x)\equiv 1,t_i(x)=\prod_{k=0}^{i-1}(x-x_k)\,,i=1,\cdots$$

$$N_k(x)=N_{k-1}(x)+f[x_0,\cdots,x_k]t_k(x)$$

$$R_n(x)=f[x_0,\cdots,x_n,x]\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$$

6.Hermite 插值

如果不仅要求在插值多项式节点的函数值与被插函数的函数值相等，还要求在节点处插值函数与被插函数的一阶或高阶导数的值也相等，这类插值称为 Hermite 插值。

设$H_{2n+1}(x)=\sum_{i=0}^{n}h_i(x)f(x_i)+\sum_{i=0}^{n}g_i(x)f'(x_i)$，其中$h_i(x_j)=\delta_{ij},h_i{}'(x_j)=0,g_i(x_j)=0,g_i{}'(x_j)=\delta_{ij}$，可解出$h_i,g_i$。

$$R_n(x)=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)^2\,,\xi\in(a,b),f\in C^{2n+2}[a,b]$$

定义序列$z_{2i}=z_{2i+1}=x_i$，计算差商表时以$f'(x_i)$代替$f[z_{2i},z_{2i+1}]$，得到差商型 Hermite 插值多项式：

$$H_{2n+1}(x)=f(z_0)+\sum_{k=1}^{2n+1}\left[f[z_0,\cdots,z_k]\prod_{i=0}^{k-1}(x-z_i)\right]$$

7.Runge 现象：插值多项式在插值区间内发生剧烈震荡。

8.分段线性插值

9.三次样条插值

三次样条函数：分段三次多项式，整体二阶连续导数。具有局部性，且光滑。

给定$\{x_i,f(x_i)\}_{i=0}^{n}$，若分段函数$S(x)$满足插值条件、分段表示、二阶导数连续，则称$S(x)$为三次样条插值函数，x_i为样条结点。

确定$S(x)$需要 4n 个条件，插值条件提供 n+1，二阶连续提供 3n-3，边界给出 2 个。

7 最小二乘拟合

给定数据序列$\{x_i, y_i\}_{i=0}^m$和函数空间$\Phi = span\{\varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$，求解$\min\limits_{\varphi \in \Phi} \sum_{i=1}^m (\varphi(x_i) - y_i)^2$。

记$Q(a_1, \cdots, a_n) = \sum_{i=1}^m (\sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x_i) - y_i)^2$，问题写作$\min\limits_{a_1,\cdots,a_n} Q(a_1, \cdots, a_n)$。

$Q(\boldsymbol{x}) = ||\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b}||_2^2$，其中$A_{ij} = \varphi_j(x_i), x_j = a_j, b_j = y_j$，则$\min\limits_{\boldsymbol{x}} Q(\boldsymbol{x})$的条件是$\boldsymbol{A^T A x} = \boldsymbol{A^T b}$。

对于非线性函数空间，通过变换线性化，利用线性拟合求解。需要注意，变换后的拟合函数不再是平方误差极小意义下的拟合函数。

8 函数逼近

一、最佳平方逼近

1.在$L_\rho^2[a,b]$中，定义内积$(f,g) = \int_a^b f(x)g(x)\rho(x)dx$。

2.内积空间中，有限维子空间M中有且只有一个最佳逼近元。

3. 若$M = span\{\varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$，$m^* = \sum_{i=1}^n c_i^* \varphi_i$，于是有法方程组$\sum_{i=1}^n c_i^* (\varphi_i, \varphi_j) = (x, \varphi_j)$，记$G_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j), b_j = (x, \varphi_j)$，于是写作$G\boldsymbol{c}^* = \boldsymbol{b}$。若$\varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$构成正交基，则$G$对角，$m^* = \sum_{i=1}^n \frac{(x,\varphi_i)}{(\varphi_i,\varphi_i)} \varphi_i$，称为$x$的广义 Fourier 展开。

4.记$\mathbb{P}_n[x]$为次数不超过n的多项式构成的空间。对于任意$f \in L_\rho^2[a,b]$，存在唯一的n次多项式$p(x) = \sum_{i=0}^n c_i x^i$使得$||f-p||$取到最小值，即最佳平方逼近多项式。法方程$\sum_{i=1}^n c_i^* (x^i, x^j) = (f, x^j)$。

5.设$\rho(x) \equiv 1$，区间$[-1,1]$上$\mathbb{P}_n[x]$的正交基$\{P_k(x)\}_{k=0}^n$，称$P_k(x)$为勒让德多

项式，$P_k(x)=\frac{1}{2^k k!}\frac{d^k}{dx^k}[(x^2-1)^k]$。

6.对于任意周期函数$f\in L^2[0,T)$，存在唯一的最佳逼近元$f_n(x)=a_0+\sum_{k=1}^{n}(a_k cosk\omega x+b_k sink\omega x)$。

7.离散傅里叶正变换写作$\mathbf{g}=\mathrm{F_n}\mathbf{f},(F_n)_{ij}=\frac{1}{n}\rho^{(i-1)(j-1)},\rho=e^{-i2\pi/n}$，逆变换写作$\mathbf{f}=\mathrm{F_n^{-1}}\mathbf{g},(\mathrm{F_n^{-1}})_{ij}=\rho^{-(i-1)(j-1)}$。

二、最佳一致逼近多项式

1.在函数空间$C[a,b]$，定义一致范数$||f||_\infty=\max_{x\in[a,b]}|f(x)|$，逼近集合$M$取$n+1$维多项式空间$\mathbb{P}_n[x]$。对于任意的$f\in C[a,b]$，若存在$p^*\in\mathbb{P}_n[x]$使得$||f-p^*||_\infty=\inf_{p\in\mathbb{P}_n[x]}||f-p||_\infty\triangleq d(f,\mathbb{P}_n[x])$，则称$p^*$为$f$的最佳一致逼近多项式。

2.考虑误差函数$e^*(x)=f(x)-p^*(x)$，定义$e^*(x)$的极值点集，即$\mathcal{L}_M=\{|e^*(x)|=||e^*||_\infty\}$，$p^*$是$f$的最佳一致逼近多项式的充要条件是不存在多项式$p$使得$[f(x)-p^*(x)]p(x)>0,x\in\mathcal{L}_M$。

设$g\in C[a,b]$，则称点集$\{x_i\}_{i=0}^k$为g的交错点组，如果$g(x_i)=(-1)^i\sigma||g||_\infty$。

设函数$f\in C[a,b]$且$f\notin\mathbb{P}_n[x]$，则p^*是f的n次最佳一致逼近多项式的充分必要条件是$f-p^*$在$[a,b]$存在$n+2$个点组成的交错点组。即，误差函数在交错点取极值，全区间极值相等且正负交错。

设p^*是f的n次最佳一致逼近多项式，如果f在区间$[a,b]$上有$n+1$阶导数，且$f^{(n+1)}$在$[a,b]$不变号，则$f-p^*$的交错点组有且仅有$n+2$个交错点，且区间$[a,b]$的端点属于交错点组。

3.切比雪夫多项式$T_k(x)$是区间$[-1,1]$的多项式空间$\mathbb{P}_n[x]$关于权函数$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$的一组正交基，即$T_k(x)=cos(karccosx),\int_{-1}^{1}\frac{T_m(x)T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx=\begin{cases}0,m\neq n\\ \pi/2,m=n\neq 0\\ \pi,m=n=0\end{cases}$，递

推公式$\begin{cases} T_{k+1} = 2xT_k - T_{k-1} \\ T_0 = 1, T_1 = x \end{cases}$，$T_k$有$k$个根，且有$k+1$个极值点。

4.求$||x^n - p_{n-1}^*|| = \min_{p_{n-1} \in \mathbb{P}_{n-1}[x]} ||x^n - p_{n-1}||$，记$\mathbb{P}_n^1[x]$为首系数为 1 的$n$次多项式全体，前述问题等价于$||p_n^* - 0|| = \min_{p_n \in \mathbb{P}_n^1[x]} ||p_n - 0||$，称为最小零偏差问题。

对于任意的$p_n \in \mathbb{P}_n^1[x]$，有$||p_n|| \geq ||\frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)|| = \frac{1}{2^{n-1}}$，当且仅当$p_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$时等号成立。

设函数$f(x) \in C^{n+1}[-1,1]$，若取$n+1$个互不相同的节点构造n次插值多项式q_n，则有$||f - q_n|| \leq \frac{||f^{(n+1)}||}{(n+1)!} \max_x |(x - x_0) \cdots (x - x_n)|$，寻找节点使插值余项尽可能小的问题等价于寻找$p_{n+1} \in \mathbb{P}_{n+1}^1[x]$使之零偏差最小。当节点取$T_{n+1}$的零点时，余项最小。其他插值区间可以利用仿射变换。

对于任意$f(x) \in C[-1,1]$，取权函数$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，按照$L_\rho^2[-1,1]$内积构造n次最佳平方逼近多项式$S_n(x) = \frac{c_0}{2} T_0 + \sum_{i=1}^n c_i T_i, c_i = \frac{2}{\pi}(f, T_i)$。如果$f(x) \in C^1[-1,1]$，那么$S_n(x)$一致收敛于$f(x)$。如果$f(x) \in C^r[-1,1]$，那么$|c_i| \leq \frac{c(f,r)}{i^r}$，对于足够光滑的函数$f$，$c_i$迅速趋于零，$f(x) - S_n(x) \approx c_{n+1} T_{n+1}$，$S_n(x)$相似于最佳一致逼近多项式。

多项式低次逼近问题，将多项式写成切比雪夫多项式级数的形式，取前m项，将之写成幂级数形式。

9 数值微分和数值积分

一、数值微分

1.导数逼近

• 向前差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

$$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = -\frac{h}{2} f''(\xi)$$

• 向后差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$$
$$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} = \frac{h}{2} f''(\xi)$$

• 中心差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}$$
$$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} = -\frac{h^2}{3!} f^{(3)}(\xi)$$

• 理论估计：$h = \sqrt[3]{\frac{3e}{M_3}}$

• 事后估计：当$|D(h,x) - D(h/2,x)| < \epsilon$时，$h$即为适当的步长。

2.数值微分：对于给定$f(x)$的函数表，建立插值函数，用插值函数的导数近似函数$f(x)$的导数。

$$R(x_j) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{0 \le i \ne j \le n} (x_j - x_i)$$

二、数值积分

1.代数精度

设[a, b]上以x_i为积分节点的数值积分公式为$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i)$，若$I_n(f)$满足$I_n(x^i) = I(x^i), i = 0, \cdots, k, I_n(x^{k+1}) \ne I(x^{k+1})$，则称$I_n(f)$具有$k$阶代数精度。

2.插值型数值积分

利用插值函数代替被积函数进行积分。

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

$$E_n(f) = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_n(x) dx$$

n 次插值多项式形式的数值积分公式至少有 n 阶代数精度。

3.Newton-Cotes 积分

取步长$h=\frac{b-a}{n},x_i=a+ih$，有$\alpha_i=(b-a)C_i^{(n)}$，$\sum_{i=0}^{n}C_i^{(n)}=1$。

取$n=1$，梯形积分，具有一阶代数精度：

$$T(f)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$
$$E_1(f)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)$$

取$n=2$，Simpson 积分，具有三阶代数精度：

$$S(f)=(b-a)[\frac{1}{6}f(a)+\frac{4}{6}f(\frac{a+b}{2})+\frac{1}{6}f(b)]$$
$$E_1(f)=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi)$$

n 为奇数时，$f\in C^{n+1}[a,b]$，$E_n(f)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_a^b(x-x_0)\cdots(x-x_n)dx$，有 n 阶代数精度；n 为偶数时，$f\in C^{n+2}[a,b],E_n(f)=\frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_a^b x(x-x_0)\cdots(x-x_n)dx$，有 n+1 阶代数精度。

若数值积分公式满足$\lim_{h\to 0}\frac{R[f]}{h^p}=C<\infty,C\neq 0$，则称该公式 p 阶收敛。

外推算法，Romberg 积分计算公式：$R_{k,j}=R_{k,j-1}+\frac{R_{k,j-1}-R_{k-1,j-1}}{4^{j-1}-1}+O(h^{2j})$，它是$2^{k-1}n$个小区间，每区间插值次数为$j$的公式。

4.Gauss 积分

设$I(f)$关于积分节点$x_1,\cdots,x_n$的数值积分公式为$I_n(f)=\sum_{i=1}^{n}a_if(x_i)$，则$I_n(f)$的代数精度不超过 $2n-1$ 阶。

取 n 次正交多项式的 n 个零点为积分节点的数值积分公式具有 2n-1 阶代数精度。

$$G_n(f)=\sum_{i=1}^{n}a_if(x_i)\,,a_i=\int_a^b l_i(x)W(x)dx$$

$$E_n(f)=\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\int_a^b\omega^2(x)W(x)dx$$

10 常微分方程数值解

1.常微分方程初值问题

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

若$f(x,y)$在条带连续，且$|f(x,y_1)-f(x,y_2)| \le L|y_1-y_2|$，则初值问题解在$[a,b]$上存在且唯一。

2.Euler 公式

对定义域$[a,b]$作等距剖分，即$x_i = a + ih, h = \frac{b-a}{n}$。

在假设第 i 步计算精确前提下，考虑截断误差$T_{i+1} = y(x_{i+1}) - y_{i+1}$，称为局部截断误差，如果$T_{i+1} = O(h^{p+1})$，则称方法 p 阶相容。整体截断误差需要累计计算。

• 向前差商公式：$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$，$T_{i+1} = \frac{h^2}{2}y''(\xi) = O(h^2)$，整体截断误差$O(h)$，是 1 阶方法。

• 向后差商公式：$y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1})$，需要迭代求解。Picard 迭代格式：

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(0)} = y_i + hf(x_i, y_i) \\ y_{i+1}^{(k+1)} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k)}) \end{cases}$$

• 中心差商公式：$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i)$，二阶格式，数值不稳定。

• 基于数值积分的近似公式，单边近似对应向前、向后差商，若取梯形积分近似，则有$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})]$，预估-校正公式：$\begin{cases} \overline{y_{i+1}} = y_i + hf(x_i, y_i) \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \overline{y_{i+1}})] \end{cases}$。

3.Runge-Kutta 方法

$$y_{i+1} = y_i + hy'(x_i) + \cdots + \frac{h^k}{k!}y^{(k)}(x_i) + \frac{h^{k+1}}{(k+1)!}y^{(k+1)}(\xi)$$

以 $\sum_{j=1}^{k} c_j k_j$ 逼近 $y'(x_i)+\cdots+\frac{h^{k-1}}{k!}y^{(k)}(x_i)$，其中 $k_1=f(x_i,y_i), k_j=f(x_i+a_j h, y_i+h\sum_{l=1}^{j-1} b_{jl}k_l), a_j=\sum_{l=1}^{j-1} b_{jl}$，它是 k 阶方法。

4.线性多步法

$$y(x_{i+1})=y(x_{i-p})+\int_{x_{i-p}}^{x_{i+1}} y'(x)dx$$

显式格式：以$x_i,\cdots,x_{i-q}$构造插值多项式近似$y'(x)$；隐式格式：以$x_{i+1},\cdots,x_{i+1-q}$构造插值多项式近似$y'(x)$。p控制积分区间，q控制插值节点。

$p=0$ 称为 Adams 格式。(p,q)的隐式格式使用$(p-1,q)$显示预估后进行校正。

5.常微分方程组的数值解法

一阶常微分方程组写成向量形式：

$$\begin{cases}\dfrac{dY}{dx}=F(x,Y(x)), x\in[a,b]\\ Y(a)=Y_0\end{cases}$$

高阶微分方程：

$$\begin{cases}\dfrac{d^m y}{dx^m}=f(x,y,y',\cdots,y^{(m-1)}), x\in[a,b]\\ y^{(m-1)}(a)=\eta_m\end{cases}$$

引入辅助变量$\begin{cases}y_1=y\\ \vdots\\ y_m=y^{(m-1)}\end{cases}$，问题转化为一阶常微分方程组问题。

6.若一个离散变量的 k 步方法，在 Lipschitz 条件下，存在常数C和$h_0>0$，使得以$(0,h_0]$中任意值h为步长，通过任意两组初值得到的离散值的差（差为各分量差的最大值），与初值差可比较，则该方法稳定。

取经典微分方程$\begin{cases}y'=\lambda y, Re(\lambda)<0\\ y(a)=y_0\end{cases}$，将一般数值格式代入，对于给定的初始误差，误差方程具有同样的格式。

若对任意的初值，总存在左半复平面上的一个区域，当在这个区域时，差分方程的解趋于 0（$x\to\infty$），这个区域称为稳定区域，差分方程称为绝对稳定的。

当绝对稳定区域时左半平面时，称该方法是无条件绝对稳定的。一般隐式比显示好。

11 最优化方法

一、线性规划问题

$$max\, z = \sum_{i=1}^{n} c_i x_i$$

$$s.t.\begin{cases} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \ge 0 \\ x_j \ge 0 \end{cases}$$

设$A=(a_{ij})_{m\times n}$为等式约束的系数矩阵，其中$m<n, rank(A)=m$。若$B=(\boldsymbol{p_1},\cdots,\boldsymbol{p_m})$是$A$的一个满秩子矩阵，则称$B$是线性规划问题的一组基，每个列向量$\boldsymbol{p_j}$称为基向量，与之对应的变量$x_j$称为基变量，除基变量外的变量称为非基变量。

若令所有非基变量置零，则m个基变量有唯一解$\boldsymbol{x_B}$，加上取零的非基变量，即$\boldsymbol{x}$，称为线性规划问题的基解。基解总数不超过$\binom{n}{m}$。

满足非负约束的基解为基可行解，与之对应的基称为可行基。

$c_j \to$			c_1	$\cdots$	c_m	$\cdots$	c_j	$\cdots$	c_n
$\boldsymbol{c_B}$	$\boldsymbol{x_B}$	$\boldsymbol{b}$	x_1	$\cdots$	x_m	$\cdots$	x_j	$\cdots$	x_n
c_1	x_1	b_1	1	$\cdots$	0	$\cdots$	a_{1j}	$\cdots$	a_{1n}
c_2	x_2	b_2	0	$\cdots$	0	$\cdots$	a_{2j}	$\cdots$	a_{2n}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$
c_m	x_m	b_m	0	$\cdots$	1	$\cdots$	a_{mj}	$\cdots$	a_{mn}
$\sigma_j \to$			0	$\cdots$	0	$\cdots$	$c_j - \sum_{i=1}^{m} c_i a_{ij}$	$\cdots$	$c_n - \sum_{i=1}^{m} c_i a_{in}$

（1）确定初始可行基和初始基可行解，建立单纯形表

（2）计算各非基变量x_k的检验指标$\sigma_k = c_k - \sum_{i=1}^{m} c_i a_{ik}, k = m+1, \cdots, n$。若$\sigma_k \le 0$ 对所有$k = m+1, \cdots, n$成立，则得到了最优解。

（3）在$\sigma_k > 0$ 中，若有某个σ_j对应的x_j的系数向量$\boldsymbol{p_j} \le 0$，则有无界解。

（4）根据$max\{\sigma_k\} = \sigma_j$，确定$x_j$为换入变量，按公式$\lambda = \min_i \{\frac{x_i^0}{a_{ij}} | a_{ij} > 0\} = \frac{x_l^0}{a_{lj}}$确定$x_l$为换出变量。

（5）以a_{lj}为主变量，对等式约束的增广矩阵进行初等行变换，将变量x_j对应的列向量变换为$a_{lj} = 1$，其余为 0。将$\boldsymbol{x_B}$列中的x_l换为x_j，建立新的单纯形表。

添加人工变量，总能得到一个子单位矩阵。为使得最优解中人工变量为零，在目标函数中令人工变量的系数为任意大的负值$-M$，称为罚因子，称为大M法。或者在第一阶段令目标函数中其他变量系数为零，人工变量系数为 1，保持约束求极小化时的解，若极小值为 0，作为原线性规划问题的初始可行解，将第一阶段最终形式删除人工列，更新目标函数系数，若不为 0，无解。

确定换入换出变量时，均以下标小者优先。

若求解结果出现所有$\sigma_k \le 0$，但基变量中仍有非零人工变量，则无解。

二、非线性优化问题

$$min\, f(\boldsymbol{x})$$

1.下降迭代算法

选定初始点$\boldsymbol{x_0}$，令$k \leftarrow 0$;确定搜索方向$\boldsymbol{p_k}$，要求$\boldsymbol{p_k^T} \nabla f(\boldsymbol{x_k}) < 0$;求步长$\lambda_k$，产生$\boldsymbol{x_{k+1}} = \boldsymbol{x_k} + \lambda_k \boldsymbol{p_k}$;检查是否为极小点或近似极小点。

确定λ_k可以取常数（不能保证下降）、取可接受点（任意下降点），或者使下降最多，即解决子优化问题$\min_\lambda f(\boldsymbol{x_k} + \lambda \boldsymbol{p_k})$，称为最优一维搜索或精确一维搜索，称$\lambda_k$为最佳步长。

若$\begin{cases}\lambda_k = arg\min\limits_{\lambda} f(\boldsymbol{x_k} + \lambda \boldsymbol{p_k}) \\ \boldsymbol{x_{k+1}} = \boldsymbol{x_k} + \lambda_k \boldsymbol{p_k}\end{cases}$，则有$\nabla f^T(\boldsymbol{x_{k+1}})\boldsymbol{p_k} = 0$

设序列$\{\boldsymbol{x_k}\}_{k=0}^{\infty}$收敛于$\boldsymbol{x}^*$，若存在常数 $\mathrm{c} > 0, \alpha \geq 1$ 及整数$k_0 > 0$，使得当$k > k_0$时，有$||\boldsymbol{x_{k+1}} - \boldsymbol{x}^*|| \leq \mathrm{c}||\boldsymbol{x_k} - \boldsymbol{x}^*||^{\alpha}$成立，则称$\{\boldsymbol{x_k}\}_{k=0}^{\infty}$收敛阶为$\alpha$。当$\alpha = 2$，称为二阶收敛，$1 < \alpha < 2$，称为超线性收敛，$\alpha = 1$，称为线性收敛。

2.最速下降法（至少线性）

$$f(\boldsymbol{x_k} - \lambda_k \nabla f(\boldsymbol{x_k})) = \min_{\lambda \geq 0} f(\boldsymbol{x_k} - \lambda \nabla f(\boldsymbol{x_k}))$$

3.牛顿迭代法（二阶）

$$\boldsymbol{x_{k+1}} = \boldsymbol{x_k} - [\nabla^2 f(\boldsymbol{x_k})]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x_k})$$

4.带步长因子的牛顿法：

$$f(\boldsymbol{x_k} - \lambda_k \nabla f(\boldsymbol{x_k})) = \min_{\lambda \geq 0} f(\boldsymbol{x_k} - \lambda [\nabla^2 f(\boldsymbol{x_k})]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x_k}))$$

5.拟牛顿法：

$$f(\boldsymbol{x_k} + \lambda_k \boldsymbol{p_k}) = \min_{\lambda \geq 0} f(\boldsymbol{x_k} - \lambda H_k \nabla f(\boldsymbol{x_k}))$$

DFP 矫正矩阵：$H_{k+1} = H_k + \frac{\boldsymbol{s_k s_k^T}}{\boldsymbol{s_k^T y_k}} - \frac{H_k \boldsymbol{y_k y_k^T} H_k}{\boldsymbol{y_k^T} H_k \boldsymbol{y_k}}$。

BFGS 校正公式：$H_{k+1} = H_k + (1 + \frac{\boldsymbol{y_k^T} H_k \boldsymbol{y_k}}{\boldsymbol{s_k^T y_k}}) \frac{\boldsymbol{s_k s_k^T}}{\boldsymbol{s_k^T y_k}} - \frac{\boldsymbol{s_k y_k^T} - H_k \boldsymbol{y_k s_k^T}}{\boldsymbol{s_k^T y_k}}$。

6.共轭梯度法

$$f(\boldsymbol{x_k} + \lambda_k \boldsymbol{p_k}) = \min_{\lambda \geq 0} f(\boldsymbol{x_k} + \lambda \boldsymbol{p_k})$$

$$\boldsymbol{p_k} =- \boldsymbol{g_k} + \beta_{k-1} \boldsymbol{p_{k-1}}, \beta_{k-1} = \frac{\boldsymbol{g_k^T} G \boldsymbol{p_{k-1}}}{\boldsymbol{p_{k-1}^T} G \boldsymbol{p_{k-1}}}$$