非线性方程数值解法

- **基本概念**
  - 单根
  - r 重根：$f(\alpha)=\cdots=f^{(r-1)}(\alpha)=0,\ f^{(r)}(\alpha)\neq 0$
- **二分法**
  - 思想：不断二分区间
  - 收敛性：保证收敛，一阶
  - 误差限：n 次二分后，$|\alpha-x_n|\leqslant \dfrac{b-a}{2^{n+1}}$
- **迭代法**
  - **基本概念**
    - 单点迭代，多点迭代
    - 定常迭代，非定常迭代
    - 全局收敛，局部收敛
    - p 阶收敛：$\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p}=C\neq 0$
    - 效率指数：$\mathrm{EI}=p^{\frac{1}{\theta}}$
  - **不动点迭代法**
    - 迭代格式：$x=\Phi(x) \quad\Longrightarrow\quad x_{k+1}=\Phi(x_k)$
    - 收敛性
      - 全局收敛 $\Leftarrow \begin{cases} 1.\ \Phi(x)\in[a,b],\ x\in[a,b] \\ 2.\ \forall x_1,x_2\in[a,b],\ |\Phi(x_1)-\Phi(x_2)|\leqslant L|x_1-x_2|,\ L<1 \end{cases}$
      - 误差估计：$\begin{cases} |\alpha-x_k|\leqslant \dfrac{L}{1-L}|x_k-x_{k-1}| \\ |\alpha-x_k|\leqslant \dfrac{L^k}{1-L}|x_1-x_0| \end{cases}$
      - 局部收敛 $\Leftarrow U(\alpha)$ 内有连续导数且 $|\Phi'(\alpha)|<1$
      - p 阶收敛 $\iff \begin{cases} \Phi'(\alpha)=\cdots=\Phi^{(p-1)}(\alpha)=0 \\ \Phi^{p}(\alpha)\neq 0 \end{cases}$ （假设 $U(\alpha)$ 内充分阶可导）
  - **Newton 迭代法**
    - 迭代格式：$x_{k+1}=x_k-\dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)}$
    - 收敛性
      - 保证局部收敛
      - 当 α 是单根时，至少二阶收敛
      - 当 α 是重根时，一阶收敛
    - 简化 Newton 法
      - 迭代格式：$x_{k+1}=x_k-\dfrac{f(x_k)}{C}$，常取 $C=f'(x_0)$
      - 收敛性：一阶收敛
      - 优点：不用每一次迭代中都计算导数
    - Newton 下山法
      - 迭代格式：$x_{k+1}=x_k-\lambda\dfrac{f'(x_k)}{f(x_k)}$，且需保证：$|f(x_{k+1})|<|f(x_k)|$
      - 收敛性：一阶收敛
      - 优点：保证全局收敛
  - **弦截法（割线法）**
    - 迭代格式：$x_{k+1}=x_k-\dfrac{x_k-x_{k-1}}{f(x_k)-f(x_{k-1})}f(x_k)$，即用割线代替 Newton 法的切线
    - 收敛性：设 $f(x),f'(x),f''(x)$ 在 $U(\alpha)$ 上连续，且 $f'(\alpha)=0$，则局部收敛且收敛阶为：$p=\dfrac{1+\sqrt{5}}{2}\approx 1.618$
  - **Newton 法修正**
    - 若已知根的重数为 r，则修正为：$x_{k+1}=x_k-r\dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)}$
    - 若不知道根的重数，则修正为：$x_{k+1}=x_k-\dfrac{u(x_k)}{u'(x_k)}$，其中 $u(x)=\dfrac{f(x)}{f'(x)}$
      也即将求 $f(x)$ 的根转变成求 $u(x)$ 的根，可以证明，α 是 $u(x)$ 的单根。

线性方程组数值解法

范数与谱半径

向量范数

定义

设 $x \in \mathbb{R}^n$ or $\mathbb{C}^n$，$x \mapsto ||x||$ 若满足：

1. $||x|| > 0$ 且 $||x|| = 0 \iff x = 0$
2. $||\lambda x|| = |\lambda| ||x||, \forall \lambda \in \mathbb{R}$ or $\mathbb{C}$
3. $||x + y|| \leqslant ||x|| + ||y||$ (三角不等式)

则称 $||x||$ 为 x 的一种范数 (norm)

常用范数

$$\begin{cases} ||x||_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i| & 1-\text{范数} \\ ||x||_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2} & 2-\text{范数} \\ ||x||_\infty = \max_{i=1}^{n} |x_i| & \text{无穷范数} \\ ||x||_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} & p-\text{范数} \end{cases}$$

范数连续性定理

$f(x) = ||x||$ 为 x 的连续函数

范数等价性定理

设 $||x||_s, ||x||_t$ 为 $\mathbb{R}^n$ 上任两种范数，则 $\exists c_1, c_2 > 0$, s. t. $c_1 ||x||_s \leqslant ||x||_t \leqslant c_2 ||x||_s, \forall x \in \mathbb{R}^n$

定理

向量序列 $\{x^k\}$ 收敛于 x^* $\iff ||x^k - x^*|| \to 0, k \to \infty$

矩阵范数与谱半径

矩阵范数

设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ or $\mathbb{C}^{n\times n}$, $Z \mapsto ||A||$ 若满足：

1. $||A|| > 0$ 且 $||A|| = 0 \iff A = 0$
2. $||\lambda A|| = |\lambda| ||A||, \forall \lambda \in \mathbb{R}$ or $\mathbb{C}$
3. $||A + B|| \leqslant ||A|| + ||B||$ (三角不等式)
4. $||AB|| \leqslant ||A|| \cdot ||B||$

则称 $||A||$ 为 A 的一种范数 (norm)

相容性

若 $||Ax|| \leqslant ||A|| ||x||$，称矩阵范数和向量范数满足相容性。

算子范数/从属范数

设 $x \in \mathbb{R}^n(\mathbb{C}^n)$, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}(\mathbb{C}^{n\times n})$，称：

$||A||_\nu = \max_{x \neq 0} \frac{||Ax||_\nu}{||x||_\nu}$ 或 $||A||_\nu = \max_{||x||_\nu = 1} ||Ax||_\nu$

为矩阵 A 由向量范数 $||x||_\nu$ 产生的从属范数或算子算数。

由定义易知从属范数满足相容性。

常用范数 (对应向量范数的从属范数)

$$\begin{cases} ||A||_1 = \max_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| & 1-\text{范数，列范数} \\ ||A||_2 = \sqrt{\rho(A^H A)} & 2-\text{范数} \\ ||A||_\infty = \max_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| & \text{无穷范数，行范数} \end{cases}$$

谱半径

设 n 阶方阵 A 的特征值为 $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$，称 $\rho(A) = \max_{i=1}^{n} |\lambda_i|$ 为 A 的谱半径

性质：对任意从属范数，$\rho(A) \leqslant ||A||$

条件数与稳定性

条件数

$\mathrm{cond}(A) = ||A|| \cdot ||A^{-1}||$ (A 非奇异)

性质：$\mathrm{cond}(A) = ||A|| \cdot ||A^{-1}|| \geqslant ||AA^{-1}|| = 1$

稳定性

扰动 b 对解的影响

$$\frac{||\delta x||}{||x||} \leqslant \mathrm{cond}(A) \frac{||\delta b||}{||b||}$$

扰动 A 对解的影响

$$\frac{||\delta x||}{||x||} \leqslant \frac{\mathrm{cond}(A) \frac{||\delta A||}{||A||}}{1 - \mathrm{cond}(A) \frac{||\delta A||}{||A||}}$$

Gauss 消元法

思想

化上三角矩形 + 回代求解

列选主元

选择 $A[k:, k]$ 中最大者作为主元

全选主元

选择 $A[k:, k:]$ 中最大者作为主元，需要进行列交换

矩阵三角分解法

思想

对矩阵做 LU 分解，得到 $LU = b$，则只需解 $\begin{cases} Ux = y \\ Ly = b \end{cases}$ 即可。

Doolittle 分解

限定 L 为单位下三角矩阵

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Crout 分解

限定 U 为单位上三角矩阵

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

Cholesky 分解

当 A 对称正定时，可分解为 LL^T

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{12} & \cdots & l_{1n} \\ 0 & l_{22} & \cdots & l_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

改进 Cholesky 分解

当 A 对称时，可分解为 LDL^T

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{12} & \cdots & l_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & l_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

各分解之间的关系

将 A 做 Doolittle 分解后得到 $A = LU$，把 U 对角元素拿出来得到 $A = LD\hat{U}$，此时 $L, \hat{U}$ 都是单位的三角矩阵。

- 设 $\hat{L} = LD$，则得到 Crout 分解：$A = \hat{L}\hat{U}$
- 若 A 对称，则 $L = \hat{U}^T$，即得到改进 Cholesky 分解：$A = LDL^T$
- 若 A 对称正定，则 D 的元素均正，可得到 Cholesky 分解：$A = LD^{1/2}D^{1/2}L^T = \bar{L}\bar{L}^T$

迭代法

概述

基本思想

将 $Ax = b$ 改写为 $x = Bx + g$，并建立迭代格式：

$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g$

定理

迭代法收敛当且仅当 $\rho(B) < 1$，且 $\rho(B)$ 越小，收敛越快

$||B|| < 1 \implies$ 迭代法收敛，且有误差估计 $\begin{cases} ||x^{(k)} - x^*|| \leqslant \frac{||B||}{1 - ||B||} ||x^{(k)} - x^{(k-1)}|| \\ ||x^{(k)} - x^*|| \leqslant \frac{||B||^k}{1 - ||B||} ||x^{(1)} - x^{(0)}|| \end{cases}$

基本迭代公式

将 A 分解为 $A = L + D + U$：

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

Jacobi 迭代

矩阵形式

$Ax = b \implies Dx = -(L + U)x + b$，故构建迭代格式：

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

分量形式

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

Gauss-Seidel 迭代

矩阵形式

$Ax = b \implies (D + L)x = -Ux + b$，故构建迭代格式：

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

分量形式

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

即在 Jacobi 中，把计算 $x_i^{(k+1)}$ 时用的 $x_j^{(k)}$ 换成 $x_j^{(k+1)} (j < i)$

SOR 方法

矩阵形式

$Ax = b \implies (D + \omega L)x = [(1 - \omega)D - \omega U]x + \omega b$，故构建迭代格式：

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

分量形式

在 Gauss-Seidel 中，计算得到 $x_i^{(k+1)}$ 后，作类似于指数平滑的加速处理：

$x_i^{(k+1)} := \omega x_i^{(k+1)} + (1 - \omega)x_i^{(k)}$

收敛定理

SOR 收敛 $\implies 0 < \omega < 2$

收敛性

- A 对称正定 $\implies$ Gauss-Seidel 收敛
- A 对称正定且 $0 < \omega < 2$ $\implies$ SOR 收敛
- 若 A 对称且对角线元素皆正，则 A 对称正定且 $2D - A$ 也对称正定 $\iff$ Jacobi 收敛
- A 严格对角占优 $\implies$ Jacobi 收敛
- A 严格对角占优 $\implies$ Gauss-Seidel 收敛
- A 严格对角占优且 $0 < \omega \leqslant 1$ $\implies$ SOR 收敛

插值与逼近

插值条件

$P_n(x_i) = f(x_i),\ i = 0, 1, \ldots, n$

Lagrange 插值

基函数

$$l_i(x) = \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \begin{cases} 1 & x = x_i \\ 0 & x = x_j,\ j \neq i \end{cases}$$

基函数满足：$\sum_{i=0}^{n} l_i(x) = 1$

其他类似等式均可通过构造 $f(x)$ 并计算余项证明

Lagrange 插值多项式

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

误差(余项)

$$E(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$$

Newton 插值

差商

k 阶差商：$f[x_0, \ldots, x_k] = \dfrac{f[x_0, \ldots, x_{k-2}, x_k] - f[x_0, \ldots, x_{k-2}, x_{k-1}]}{x_k - x_{k-1}}$

差商表

x_i	$f(x_i)$	一阶差商	二阶差商	…	n阶差商
x_0	$f(x_0)$				
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0,x_1]$			
x_2	$f(x_2)$	$f[x_0,x_2]$	$f[x_0,x_1,x_2]$		
x_3	$f(x_3)$	$f[x_0,x_3]$	$f[x_0,x_1,x_3]$		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		
x_n	$f(x_n)$	$f[x_0,x_n]$	$f[x_0,x_1,x_n]$		$f[x_0,x_1,x_2,\ldots,x_n]$

Newton 插值多项式

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

误差(余项)

$$E(x) = f(x) - P_n(x) = f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x](x - x_0)\cdots(x - x_n)$$

插值多项式的收敛性和稳定性

Runge 现象

高次插值多项式在节点增多时不一定能很好地逼近 $f(x)$

为解决该问题，提出分段插值、Hermite 插值(限制导数相等)等方法

稳定性

线性插值是稳定的，$n \geqslant 2$ 次插值不一定稳定

最佳平方逼近

前置知识

权函数

若 $\rho(x)$ 为有限或无限区间 $[a, b]$ 上的函数，且：

1. $\rho(x) \geqslant 0, x \in [a, b]$
2. $\int_a^b \rho(x) x^k \mathrm{d}x$ 存在 $(k = 0, 1, \ldots)$
3. 对非负 $f(x) \in C[a, b]$，$\int_a^b \rho(x) f(x) \mathrm{d}x = 0 \implies f(x) = 0$

则称 $\rho(x)$ 为 $[a, b]$ 上的权函数。

内积、正交

设 $f(x), g(x) \in C[a, b]$，$\rho(x)$ 为 $[a, b]$ 上的权函数，若带权内积：

$$(f, g) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) \mathrm{d}x = 0$$

则称 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交。

正交函数系

若函数序列 $\{\phi_i\}_{i=0}^{\infty}$ 在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 两两正交，则称之为 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交函数系。

正交多项式系的生成

正交多项式系生成方法 $\begin{cases} \varphi_0(x) = 1 \\ \varphi_n(x) = x^n - \displaystyle\sum_{k=0}^{n-1} \frac{(x^n, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)} \varphi_k(x) \end{cases}$

写作二阶递推式形式 $\begin{cases} \varphi_0(x) = 1 \\ \varphi_1(x) = x - \alpha_0 \\ \varphi_{n+1}(x) = (x - \alpha_n)\varphi_n(x) - \beta_n \varphi_{n-1}(x),\ n = 1, 2, \ldots \end{cases}$

其中，$\alpha_n = \dfrac{(x\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_n, \varphi_n)}$，$n = 0, 1, \ldots$；$\beta_n = \dfrac{(\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})}$，$n = 1, 2, \ldots$

常用正交多项式系

正交多项式 $g_n(x)$的名称	区间	权函数	记号与表示式	首次系数	$A_n=(g_n,g_n)$	三项递推公式
Chebyshev (切比雪夫)正交多项式	$[-1,1]$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	$T_n(x) = \cos(n \arccos x)$	2^{n-1}	$\frac{\pi}{2}$ 或 π	$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$
Legendre (勒让德)正交多项式	$[-1,1]$	1	$P_0(x) = 1$ $P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$	$\frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}$	$\frac{2}{2n+1}$	$p_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x p_n(x) - \frac{n}{n+1} p_{n-1}(x)$
第二类 Chebyshev (切比雪夫)正交多项式	$[-1,1]$	$\sqrt{1-x^2}$	$s_n(x) = \frac{\sin[(n+1)\arccos x]}{\sqrt{1-x^2}}$		$\frac{\pi}{2}$	$s_{n+1}(x) = 2xs_n(x) - s_{n-1}(x)$
Laguerre (拉盖尔)正交多项式	$[0,\infty]$	e^{-x}	$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x})$	$(-1)^n$	$(n!)^2$	$L_{n+1}(x) = (1+2n-x)L_n(x) - n^2 L_{n-1}(x)$
Hermite (埃尔米特)正交多项式	$(-\infty,+\infty)$	e^{-x^2}	$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$	2^n	$2^n (n!)\sqrt{\pi}$	$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$

连续情形的最佳平方逼近

定义

设 $f(x) \in C[a, b]$，$\varphi_0(x), \ldots, \varphi_n(x)$ 是 $[a, b]$ 上一组线性无关的函数，$\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0(x), \ldots, \varphi_n(x)\}$.

若存在 $\varphi^*(x) \in \Phi$, s.t. $||f - \varphi^*||_2^2 = \min\limits_{\varphi \in \Phi} ||f - \varphi||_2^2 = \min\limits_{\varphi \in \Phi} \int_a^b \rho(x)[f(x) - \varphi(x)]^2 \mathrm{d}x$

则称 $\varphi^*(x)$ 是 $f(x)$ 在 Φ 中的最佳平方逼近函数。

求解

求解 $\varphi^*(x)$，即求解其在 Φ 中的系数，只需求解法方程：

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_0) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_0) \\ (\varphi_0, \varphi_1) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_0, \varphi_n) & (\varphi_1, \varphi_n) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f, \varphi_0) \\ (f, \varphi_1) \\ \vdots \\ (f, \varphi_n) \end{bmatrix}$$

平方逼近误差

记 $\delta(x) = f(x) - \varphi^*(x)$，则：

$$||\delta||_2^2 = (f, f) - (\varphi^*, f) = ||f||_2^2 - \sum_{i=0}^{n} a_i^*(\varphi_i, f)$$

离散情形的最小二乘法

与连续情形并没有什么区别，仅仅将内积中的积分改为求和即可。

数值积分

概述

- **机械求积公式**：$I(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i)$
- **余项**：$E(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i)$
- **代数精度**：若求积公式对 $f(x)=1,x,x^2,\ldots,x^m$ 都精确成立，而对 $f(x)=x^{m+1}$ 不精确成立，则称此求积公式具有 m 次代数精度。

插值型求积公式

- **概述**：用 Lagrange 插值多项式的积分去近似 $f(x)$ 的积分：$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n}\left(\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x\right)f(x_i)$

  即满足 $H_i=\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x$
- **余项**：$E(f)=\int_a^b \left(f(x)-L_n(x)\right)\mathrm{d}x=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_n)\mathrm{d}x$
- **代数精度**：根据余项容易知道，插值型求积公式至少有 n 次代数精度
- **定理**：机械求积公式至少 n 阶 $\iff$ 机械求积公式是插值型 $H_i=\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x$

Romberg 求积公式

- **概述**：构建 T 数表：设 $T_m^{(k)}$ 表示将区间进行 k 次二分 (即分为 2^k 个小区间)、m 次外推的积分值，则：

  $T_m^{(k)}=\frac{4^m T_{m-1}^{(k+1)}-T_{m-1}^{(k)}}{4^m-1}$
- **误差**：$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-T_m^{(k)}=-\frac{B_{2n+2}}{2^{(m+1)(m+2k)}(2m)!}(b-a)^{2m+3}f^{(2m+2)}(\eta)$
- **代数精度**：由误差表达式可知，$T_m^{(k)}$ 具有 $2m+1$ 次代数精度

Newton-Cotes 公式

- **概述**：在插值形求积公式中取等距点 $x_0,\ldots,x_n$，则 $H_i=(b-a)C_i^{(n)}$

  其中 $C_i^{(n)}=\frac{(-1)^{n-i}}{n\cdot i!\cdot(n-i)!}\int_0^n \prod_{j\neq i}(t-j)\mathrm{d}t$ 称为 Cotes 系数
- **梯形求积公式**：当 $n=1$ 时，$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=T$
  - **余项**：$E_T(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$
- **Simpson 公式**：当 $n=2$ 时，$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]=S$
  - **余项**：$E_S(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)$
- **Cotes 公式**：当 $n=4$ 时，$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]$
- **收敛性**：$\exists f(x)\in C[a,b]$ s.t. $\sum_{k=0}^{n} H_k f(x_k)$ 不收敛于 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$
- **稳定性**：若每个 H_i 都为正，则稳定；否则不稳定。因此，实践中不使用高阶的 Newton-Cotes 公式。
- **代数精度**：对 n 阶 Newton-Cotes 公式，当 n 为奇数时具有 n 次代数精度；当 n 为偶数时至少具有 $n+1$ 次代数精度。

复化 Newton-Cotes 公式

- **概述**：将区间 $[a,b]$ n 等分，在每个小区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上做梯形/Simpson 积分
- **复化梯形公式**：$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(a+kh)\right]=T_n$
  - **递推式**：$T_{2n}=\frac{1}{2}(T_n+U_n)$，其中 $U_n=h\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+1/2})$

    注意这里 h 是分成 n 份时的小区间大小，即 $h=\frac{b-a}{n}$
  - **误差**：$E(f;T_n)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-T_n=-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)$

    保证收敛且数值稳定
- **复化Simpson公式**：$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{6}\left[f(a)+f(b)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+1/2})+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)\right]=S_n$
  - **递推式**：$S_n=\frac{4T_{2n}-T_n}{4-1}$
  - **误差**：$E(f;S_n)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-S_n=-\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta)$
- **复化Cotes公式**：
  - **递推式**：$C_n=\frac{4^2 S_{2n}-S_n}{4^2-1}$

常微分方程数值解法

概述

研究的问题

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x,y) \quad a \leqslant x \leqslant b \\ y(a) = \eta \end{cases}$$

求解上述方程的数值解是指求解满足微分方程的函数在一系列离散点 $x_0 = a, x_1, \ldots, x_n = b$ 处的值，本章中这些点的步长取为定值。

局部截断误差与阶

设 $y_n = y(x_n)$，则称 $T_n = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$ 为 x_n 到 x_{n+1} 这一步的局部截断误差。

若局部截断误差为 $O(h^{r+1})$，则称该方法为 r 阶方法

Euler折线法

公式

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

推导

- Taylor展开法：$y(x_{n+1}) = y(x_n + h) = y(x_n) + hy'(x_n) + o(h) \approx y(x_n) + hf(x_n, y(x_n)) \implies y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$
- 差商法：$\dfrac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} \approx y'(x_n) = f(x_n, y(x_n)) \implies y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$
- 数值积分：在 $[x_n, x_{n+1}]$ 上对微分方程积分得：$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))\mathrm{d}x \approx y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))$
  这里用左矩形近似积分。于是，$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$

收敛性

1 阶 (Taylor 展开证明)

梯形法

公式

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

用 Euler 法得到一个 y_{n+1} 的初值后按上述公式反复迭代
特别的，当 f 是线性的时候，可以将该隐式方程显式化，则不需要迭代

推导

在用数值积分推导 Euler 法的过程中，用梯形求积公式近似积分，即：

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))\mathrm{d}x \approx y(x_n) + \frac{h}{2}[f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))]$$

收敛性

2 阶 (Taylor 展开证明)

改进Euler法

公式

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}\left[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)})\right] \end{cases}$$

推导

在梯形法中，只迭代一次就得到改进 Euler 法

收敛性

2 阶 (Taylor 展开证明)

Runge-Kutta方法

思想

理论上，只要 $y(x)$ 充分光滑，我们可以保留 Taylor 展开中充分多项得到任意阶的近似函数。
但这么做的问题在于求各阶导数很困难，R-K 方法间接利用了这种思想。

公式

s 阶 R-K 方法的公式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{s} R_i K_i \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_i = f\left(x_n + a_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} K_j\right) \quad i = 2, 3, \ldots, s \end{cases}$$

其中，R_i, a_i, b_{ij} 均为参数，以使得 $y(x_{n+1}) - y_{n+1}$ 中 h^i 的系数为 0.

常用 4 阶 R-K 方法

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f\left(x_n + \dfrac{h}{2}, y_n + \dfrac{hK_1}{2}\right) \\ K_3 = f\left(x_n + \dfrac{h}{2}, y_n + \dfrac{hK_2}{2}\right) \\ K_4 = f(x_n + h, y_n + hK_3) \end{cases}$$