数值分析 整理：常微分方程数值解，数值积分，插值法和函数逼近，非线性方程

常微分方程数值解

差分方法

- Euler单步法 $y_{n+1}=y_n+hf_n$（Taylor展开，或者用左矩公式计算数值积分$y_{n+1}=y_n+\int_{t_n}^{t_n+h}f(s,y(s))\mathrm{d}s$）
- 隐式Euler法 $y_{n+1}=y_n+hf_{n+1}$. 由于f_{n+1}的计算实际上要用到y_{n+1}，所以需要用Picard迭代法求解
- 梯形法 $y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}(f_n+f_{n+1})$
- Runge-Kutta法 用数值积分公式推导

  $y_{n+1}=y_n+h\sum_{j=1}^m c_jK_j$

  其中$K_j=f(s_j,y(s_j))$，$y(s_j)$同样用数值积分$y(s_j)=y_n+h\sum_{l=1}^{j-1}b_{jl}K_l$来代替

  最终得到**显式Runge-Kutta形式**：

  $$y_{n+1}=y_n+h\sum_{j=1}^m c_jK_j,\quad K_j=f\left(x_n+a_jh,y_n+h\sum_{l=1}^{j-1}b_{jl}K_l\right)$$

  这里a,b,c系数的确定可以通过Taylor展开待定系数法.

  在$y(s_j)$的数值积分中也可以考虑率所有$s_1,\cdots,s_m$上的插值：$y(s_j)=y_n+h\sum_{l=1}^m b_{jl}K_l$

  此时得到**隐式Runge-Kutta形式**：

  $$y_{n+1}=y_n+h\sum_{j=1}^m c_jK_j,\quad K_j=f\left(x_n+a_jh,y_n+h\sum_{l=1}^{m}b_{jl}K_l\right).$$

  这时K_j需要通过求解方程来确定.

- **差分法的局部截断误差**

  我们考虑单步、显式的差分格式：

  $$y_{n+1}=y_n+h\phi(t_n,y_n;h).$$

  定义**局部截断误差**为：

  $$L(t_n,y(t_n);h):=y(t_{n+1})-[y(t_n)+h\phi(t_n,y(t_n);h)]$$

  它的含义是：如果认为第n步计算出来的函数值是准确的，那么再向后计算一步（得到y_{n+1}）与真实值的误差

  整体截断误差：

  $$\varepsilon_n:=y(t_n)-y_n.$$

  一般来说，整体截断误差很难分析（只能对一些简单的方法，例如Euler法来分析，而且通常需要对f提一些额外要求，例如满足Lipschitz条件等），但是局部截断误差的阶数往往都是可以分析的（Taylor展开即可）

- 适定性：“真解存在唯一”

Picard-Lindelof定理 对于初值问题$y'(t)=f(t,y)$，$y(t_0)=y_0$，如果f关于y满足Lipschitz条件，则初值问题存在唯一解，也成为该问题是适定的

- 相容性：对于一个适定问题，如果$\frac{1}{h}L(t,y(t);h)\to 0$对所有$t$都成立，i.e.：

$$\lim_{h\to 0}\left[\frac{y(t+h)-y(t)}{h}-\phi(t,y(t);h)\right]=0.$$

  则称该差分格式和原问题是相容的.

  例如，如果$L(t,y(t);h)=O(h^2)$（局部截断误差为2阶），则该差分问题是所谓一阶相容的

  单步法是相容的当且仅当$\lim_{h\to 0}\phi(t,y,h)=f(t,y)$对所有$t$成立

- 收敛性：令$E(h)=\max_{0\le n\le N}|\varepsilon_n|=\max|y(t_n)-y_n|$，若$E(h)\to 0$，则称该单步、显式差分格式是收敛的

  若$\phi(t,y,h)$是连续函数且关于y是Lipschitz的，则该格式是收敛的当且仅当其是相容的（从而把收敛性的分析转化成了对ϕ本身性质的分析）（证明思路：利用$L(t_n,y(t_n);h)=o(h)$计算化简）

线性多步法

- 单步法

$$y_{n+1}=y_n+h\phi(t_n,y_n;h).$$

  线性k步法

$$\sum_{j=0}^{k}\alpha_j y_{n+j}=h\sum_{j=0}^{k-1}\beta_j f_{n+j}+h\beta_k f_{n+k}$$

  $\beta_k=0$为显式多步法，$\beta_k\neq 0$为隐式多步法

- 线性多步法的局部截断误差：

$$L(t_n,y(t_n);h)=\sum_{j=0}^{k}[\alpha_j y(t_{n+j})-h\beta_j f(t_{n+j},y(t_{n+j}))]$$

- 相容性：

  如果$\frac{1}{h}L(t,y(t);h)\to 0$，则称多步法和原问题相容.

  特别地，设局部截断误差$L(t,y(t);h)=O(h^{p+1})$，则该多步法和原IVP是p阶相容的

  线性多步法是相容的当且仅当$\rho(1)=0$且$\rho'(1)=\sigma(1)$，其中ρ和σ分别是第一和第二特征多项式：

$$\rho(\lambda)=\sum_{j=0}^{k}\alpha_j\lambda^j,\quad \sigma(\lambda)=\sum_{j=0}^{k}\beta_j\lambda^j.$$

  例如在多步法$y_{n+2}-(1+a)y_{n+1}+ay_n=\frac{h}{4}[(3-b)f_{n+2}+(1-3b)f_n]$取$a=0$，$b=1$，则：

$$\rho(\lambda)=\lambda^2-\lambda,\quad \sigma(\lambda)=\frac{1}{2}(\lambda^2-1).$$

  于是$\rho(1)=0$，$\rho'(1)=1$，但$\sigma(1)=0$，所以该格式不是相容的. 而如果取$a=b=1$，则为：

$$\rho(\lambda)=\lambda^2-2\lambda+1,\quad \sigma(\lambda)=\frac{1}{2}(\lambda^2-1),$$

  此时$\rho(1)=0$，$\rho'(1)=0$，$\sigma(1)=0$，此时相容.

- 多步法对**初值的稳定性**：

  定义：称多步法对初值是稳定的，如果存在常数C、h_0，对任何$\varepsilon>0$，只要$h<h_0$，如果两组初值$\{u_j\}_{j=0}^{k-1}$和$\{v_j\}_{j=0}^{k-1}$满足$\max_{0\le j\le k-1}|u_j-v_j|<\varepsilon$，则对于这两组初值算出来的解$\{u_n\}_{n=0}^{N}$和$\{v_n\}_{n=0}^{N}$满足必然有：

$$\max_{nh\le T}|u_n-v_n|\le C\max_{0\le j\le k-1}|u_j-v_j|.$$

  对于单步法$y_{n+1}=y_n+h\phi(t_n,y_n;h)$，如果$\phi$关于$y$满足Lipschitz条件，则单步法一定是稳定的（从前面证明ϕ满足Lipschitz条件⇒相容性蕴含收敛性的证明即可看出这一点，特别地，在那个证明过程中我们并没有考虑舍入误差，因此初值的误差$|\varepsilon_0|=0$，由此证明出$E(h)\to 0$也就是单步法收敛）

  多步法对初值稳定当且仅当$\rho(\lambda)$的所有根都在闭单位圆盘中，而且单位圆周上的所有根都是单根

  仍然举上面的例子，取$a=b=1$，则$\rho(\lambda)$有二重根1，所以对初值不稳定.

绝对稳定性和相对稳定性

- Setting：要估计舍入误差的影响. 对于多步法取一个模型问题$f=\mu y$（即线性增长），则要想保证误差有界，必须满足：

$$\rho(\lambda)-\overline{h}\sigma(\lambda)=0$$

的根模都小于1（这里的$\overline{h}=\mu h$）

- 绝对稳定：$\rho(\lambda)-\overline{h}\sigma(\lambda)=0$**的根都在单位（开）圆盘内**，则多步法对于$\overline{h}$绝对稳定（必要条件：本身指数衰减，即$\mathrm{Re}\mu<0$）

仍然举上面的例子：

$$\rho(\lambda)=\lambda^2-\lambda,\quad \sigma(\lambda)=\frac{1}{2}(\lambda^2-1)$$

为了简单起见，我们只考虑$\mu\in\mathbb{R}$的情形，此时：

$$\rho(\lambda)-\overline{h}\sigma(\lambda)=(1-\overline{h}/2)\lambda^2-\lambda+\overline{h}/2=0$$

可见两个根分别是1和$\frac{\overline{h}}{2-\overline{h}}$，注意恒有一个根不在单位开圆盘内，所以对于所有$\mu\in\mathbb{R}$，该方法对$\overline{h}$都不是绝对稳定的！

- 相对稳定：$\rho(\lambda)-\overline{h}\sigma(\lambda)=0$**的模最大根**$\lambda_1$**满足**$\lambda_1=e^{\overline{h}}+O(h^{p+1})$**，且其他根**$\lambda_j$**满足**$|\lambda_j|<|\lambda_1|$，则是相对稳定的.

对于上面的例子：

$$\rho(\lambda)=(\lambda-1)^2,\quad \sigma(\lambda)=\frac{1}{2}(\lambda-1)(\lambda+1)$$

此时：

$$\rho(\lambda)-\overline{h}\sigma(\lambda)=(\lambda-1)\left(\lambda-1-\frac{\overline{h}}{2}\lambda-\frac{\overline{h}}{2}\right)=0$$

的两个根分别是1和$\frac{1+\overline{h}/2}{1-\overline{h}/2}$. 其中$\frac{1+\overline{h}/2}{1-\overline{h}/2}=1+\overline{h}+O(\overline{h}^2)=e^{\overline{h}}+O(\overline{h}^2)$.

另一方面，

$$\left|\frac{1+\overline{h}/2}{1-\overline{h}/2}\right|=\sqrt{1+\frac{\mathrm{Re}\overline{h}}{|1-\overline{h}/2|^2}},$$

如果$\mathrm{Re}\overline{h}>0$，则$\lambda_1$满足$\lambda_1=e^{\overline{h}}+O(\overline{h}^2)$且$|\lambda_1|>|\lambda_2|=1$，为相对稳定的；

如果$\mathrm{Re}\overline{h}<0$，则$\lambda_1=1=e^{\overline{h}}+O(\overline{h})$，且$|\lambda_2|=\sqrt{1+\frac{\mathrm{Re}\overline{h}}{|1-\overline{h}/2|^2}}<1=|\lambda_1|=1$，也是相对稳定的，因此相对稳定域就是整个复平面（无条件相对稳定）.

- 【例题】考虑线性单步法$y_{n+1}=y_n+h[\alpha f(x_n,y_n)+\beta f(x_n+\gamma h,y_n+\theta hf(x_n,y_n))]$来求解以下常微分方程初值问题：

$$\begin{cases}y'=f,\\ y(x_0)=y_0.\end{cases}$$

请给出一组可行的$\alpha,\beta,\gamma,\theta$的值，使得该方法至少是2阶精度，并对于你给出的这一组参数计算稳定区间.

【解】为了计算局部阶段误差，我们分别计算：

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2}y''(x_n)+O(h^3),$$

$$\begin{aligned}&y(x_n)+h[\alpha f(x_n,y(x_n))+\beta f(x_n+\gamma h,y_n+\theta hf(x_n,y(x_n)))]\\ =&y(x_n)+h[\alpha y'(x_n)+\beta[f(x_n,y(x_n))+\gamma h\frac{\partial f}{\partial x}(x_n,y(t_n))+\theta hy'(x_n)\frac{\partial f}{\partial y}(x_n,y(t_n))]]+O(h^3)\end{aligned}$$

注意到：

$$y''(x)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x,y(x))=\frac{\partial f}{\partial x}(x,y(x))+\frac{\partial f}{\partial x}y'(x)$$

所以不妨设$\theta=\gamma$，则此时变为：

$$y(x_n)+h\alpha y'(x_n)+h\beta y'(x_n)+h^2\beta\gamma y''(x_n)+O(h^3),$$

对比可得$\alpha+\beta=1$，$\beta\gamma=1/2$，所以如果取$\alpha=\beta=1/2$，$\gamma=\theta=1$就可得到至少2阶精度的单步格式：

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

为了计算绝对稳定区间，考虑一个模型问题$f=\mu y$，其中μ是实数，此时上式变为：

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[\mu y_n+\mu y_n+h\mu^2 y_n]=y_n(1+\overline{h}+\frac{1}{2}\overline{h}^2)$$

（这里$\overline{h}=\mu h$），其特征多项式为：

$$\lambda=1+\overline{h}+\frac{1}{2}\overline{h}^2.$$

绝对稳定的要求为特征多项式的根都落在单位圆盘内，也就是：

$$|\lambda|=\left|1+\overline{h}+\frac{1}{2}\overline{h}^2\right|<1$$

由此可解得$\overline{h}\in(-2,0)$.

数值积分

代数精度、插值型求积公式

- 求积公式：$\int_a^b\rho(x)f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{i=0}^n A_if(x_i)$，$\{x_i\}\subset[a,b]$是求积节点

  定义误差$E_n(f)=\int_a^b\rho(x)f(x)\mathrm{d}x-\sum_{i=0}^n A_if(x_i)$
- 代数精度：如果$E_n(x^m)=0$对$m=0,\cdots,M$都成立，则称求积公式至少具有M阶代数精度。如果$E_n(x^{M+1})\neq 0$，则代数精度为M
- 插值型求积公式：对于f以及求积节点$\{x_i\}_{i=0}^n$，考虑Lagrange插值多项式：

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

  （注意$l_i(x_j)=\delta_{ij}$）

  则求积公式为：

$$\int_a^b\rho(x)f(x)\mathrm{d}x\approx\int_a^b\rho(x)L_n(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^n A_if(x_i),\quad 其中A_i=\int_a^b\rho(x)l_i(x)\mathrm{d}x$$

  误差公式为：

$$E_n(f)=\int_a^b\rho(x)R_n(x)\mathrm{d}x,\quad 其中R_n(x)=f(x)-L_n(x)=f[x,x_0,\cdots,x_n]\omega_{n+1}(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

  很显然，当f是次数不超过n的多项式，那么$R_n(x)\equiv 0$，此时$E_n(f)=0$，插值积分准确，因此插值型的求积公式至少具有n阶代数精度
- **【命题】如果求积公式$\int_a^b\rho(x)f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{i=0}^n A_if(x_i)$至少具有$n$阶代数精度，则它必然是插值型的**

  【证明】分别计算$E_n(l_i)$即可
- 收敛性：记步长$h=\max_{1\le k\le n}(x_k-x_{k-1})$，如果有$\lim_{h\to 0}\sum_{k=0}^n A_kf(x_k)=\int_a^b\rho(x)f(x)\mathrm{d}x$
- 稳定性：如果$\forall\varepsilon>0$，$\exists\delta>0$，使得$\max_k|f(x_k)-\widehat{f_k}|\le\delta$时（节点处的函数值误差），有$\left|I_n(f)-\widehat{I_n}(f)\right|\le\varepsilon$，则称该求积公式是稳定的
- 相容性：如果公式对$f\equiv 1$是准确成立的，则称其是相容的（可以认为具有0阶代数精度），也就是：

$$\int_a^b\rho(x)\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^n A_k.$$

- **【命题】如果公式是相容的，而且每个$A_k>0$，则它必是稳定的**

  【证明】直接计算，然后利用$A_k>0$去掉绝对值

Newton-Cotes型公式、复合公式、Romberg算法、Gauss型公式、数值微分和奇异积分

- Newton-Cotes型公式：用等距节点构造的插值积分公式

  $n=1$：梯形公式：

$$I_1(f)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

$n=2$：Simpson公式：

$$I_2(f)=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

- 【命题】n阶Newton-Cotes型公式至少具有n阶代数精度，如果n是偶数，则代数精度为$n+1$

  【证明】对Simpson（$n=2$）进行推导，更高阶的格式完全类似：

  令：

$$q(x)=\int_a^x \omega_3(x)\mathrm{d}x=\frac{(x-a)^2(x-b)^2}{4},$$

$$\begin{aligned}
E_2(f)&=\int_a^b f[x,x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\mathrm{d}x\\
&=\int_a^b f[x,x_0,x_1,x_2]q'(x)\mathrm{d}x\\
&=f[x,x_0,x_1,x_2]q(x)|_a^b-\int_a^b q(x)f[x,x,x_0,x_1,x_2]\mathrm{d}x\\
&=-\int_a^b q(x)f[x,x,x_0,x_1,x_2]\mathrm{d}x\\
&=(\text{积分中值定理})f[\eta,\eta,x_0,x_1,x_2]\int_a^b q(x)\mathrm{d}x\\
&=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi).
\end{aligned}$$

- 复合公式：采用分段低次插值来近似计算积分
  - 复合梯形公式

$$\begin{aligned}
I(f)&=\sum_{j=1}^n\int_{x_j-1}^{x_j}f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{j=1}^n\frac{h}{2}[f(x_{j-1})+f(x_j)]\\
&=\frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{j=1}^{n-1}f(x_j)\right]\equiv T_n
\end{aligned}$$

    【命题】复合梯形公式是稳定的. 求积系数>0

    【命题】复合梯形公式是二阶收敛的

    FACT：对于梯形公式，有误差估计式：

$$\begin{aligned}
E_1(f)&=\int_a^b f[x,a,b](x-a)(x-b)\mathrm{d}x=f[\eta,a,b]\int_a^b(x-a)(x-b)\mathrm{d}x\\
&=\frac{f^{(2)}(\xi)}{2!}(-(b-a)^3/6)=-\frac{(b-a)^3}{12}f^{(2)}(\xi).
\end{aligned}$$

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j}f(x)\mathrm{d}x=\frac{h}{2}[f(x_{j-1})+f(x_j)]-\frac{h^3}{12}f''(\xi_j),\quad \xi_j\in(x_{j-1},x_j)$$

$$\Rightarrow I(f)=\sum_{j=1}^n\int_{x_j-1}^{x_j}f(x)\mathrm{d}x=T_n-\frac{h^3}{12}\sum_{j=1}^n f''(\xi_j),$$

    其中

$$\left|\frac{h^3}{12}\sum_{j=1}^n f''(\xi_j)\right|\le\frac{1}{12}h^3n\|f''\|_\infty=\frac{b-a}{12}h^2\|f''\|_\infty.$$

    缩小步长的复合梯形公式：

$$T_{2n}=\frac{1}{2}(T_n+H_n),\quad H_n=\frac{h}{2}\sum_{i=1}^n f(x_{i-\frac{1}{2}}),\quad x_{i-\frac{1}{2}}=x_i-\frac{1}{2}h=a+(i-1/2)h.$$

  - 复合Simpson公式：

$$S_n=\frac{1}{3}T_n+\frac{2}{3}H_n.$$

【命题】复合Simpson公式是四阶收敛的

FACT：对于Simpson公式，$E_2(f)=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi)$，$\xi\in(a,b)$

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j}f(x)\mathrm{d}x=\frac{h}{6}[f(x_{j-1})+4f(x_{j-1/2})+f(x_j)]-\frac{h^5}{2880}f^{(4)}(\xi_j),$$
$$\Rightarrow I(f)=\sum_{j=1}^{n}\int_{x_{j-1}}^{x_j}f(x)\mathrm{d}x=S_n-\frac{h^5}{2880}\sum_{j=1}^{n}f^{(4)}(\xi_j),$$
$$\Rightarrow\left|\frac{h^5}{2880}\sum_{j=1}^{n}f^{(4)}(\xi_j)\right|\le\frac{h^4}{2880}\left\|f^{(4)}\right\|_\infty.$$

- 复合Hermite公式：

  Hermite插值积分：

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]+\frac{(b-a)^2}{12}[f'(a)-f'(b)]+E(f)$$

  这里：

$$E(f)=\int_a^b R(x)\mathrm{d}x=\int_a^b f[x,a,a,b,b](x-a)^2(x-b)^2\mathrm{d}x=\frac{(b-a)^5}{720}f^{(4)}(\eta).$$

  所以，如果用复合公式：

$$U_n=\frac{h}{2}[f(a)+f(b)+\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)]+\frac{h^2}{12}[f'(a)-f'(b)]$$

  则

$$|E_n(f)|=\left|\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-U_n(f)\right|\le\frac{(b-a)\left\|f^{(4)}\right\|_\infty}{720}h^4.$$

  Rmk：复合Hermite公式只比复合梯形公式T_n多了两端点的导数项，精度却直接提高到了四阶

- Romberg算法：原理为Euler-Maclaurin公式+Richardson外推
  - Euler-Maclaurin公式
    - Bernoulli多项式

      递推定义：$B_0(x)=1$，$B_k(x)=A_k+k\int_0^x B_{k-1}(t)\mathrm{d}t$，其中$x\in[0,1]$

      这里

$$A_k=-k\int_0^1\int_0^x B_{k-1}(t)\mathrm{d}t\mathrm{d}x.$$

      Bernoulli数：$B_k:=B_k(0)$
    - Euler-Maclaurin公式：

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-T_n(f)=-\sum_{l=1}^{m}\frac{B_{2l}}{(2l)!}[f^{(2l-1)}(b)-f^{(2l-1)}(a)]h^{2l}+r_{m+1},$$

      这里$T_n(f)=\frac{h}{2}[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)]$

      $r_{m+1}=\frac{h^{2m+2}}{(2m+2)!}\int_a^b[\overline{B}_{2m+2}(x-a/h)-B_{m+2}]f^{(2m+2)}(x)\mathrm{d}x$

      这里$\overline{B}$指的是Bernoulli多项式从$[0,1]$周期延拓后得到的$\mathbb{R}$上的函数
  - Richardson外推
    - 我们把Euler-Maclaurin公式重写，看看能不能将T_{2n}和T_n做某种线性组合来获得更高精度：

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-T_n(f)=\alpha_2h^2+\alpha_4h^4+\cdots+\alpha_{2m}h^{2m}+O(h^{2m+2})$$

      加细节点：

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-T_{2n}(f)=\alpha_2\left(\frac{h}{2}\right)^2+\alpha_4\left(\frac{h}{2}\right)^4+\cdots+\alpha_{2m}\left(\frac{h}{2}\right)^{2m}+O(h^{2m+2}).$$

      观察到：

$$\widetilde{T}_{2n} := \frac{4T_{2n}(f) - T_n(f)}{3},$$

则

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \widetilde{T}_{2n}(f) = \widetilde{\alpha}_4 h^4 + \cdots + \widetilde{\alpha}_{2m} h^{2m} + P(h^{2m+2}).$$

显然，如果将减半加密节点之后所得的求积格式T_{2n}和加密之前的格式T_n做某种线性组合，这样收敛得就更快了（类似于迭代法中的Aitken加速法）

进一步地，如果再外推一步：

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - T_{4n}(x) = \widetilde{\alpha}_4 (h/2)^4 + \cdots + \widetilde{\alpha}_{2m} (h/2)^{2m} + O(h^{2m+2})$$

可以进一步用$\widetilde{T}_{4n} = \frac{4^2 T_{4n}(f) - \widetilde{T}_{2n}(f)}{4^2 - 1}$进行加速.

- 一般表述：Richardson外推。写$T_n(f) = F(h)$（步长的函数），如果：

  $$F(h) - F^* = \sum_{k=1}^{\infty} a_k h^{p_k},$$

  则可以通过“加细+组合”的方法构造快速收敛序列：

  $$F_{m+1}(h) = \frac{F_m(qh) - q^{p_m} F_m(h)}{1 - q^{p_m}}$$

  我们看到上面的减半加密节点就是Richardson外推的一个很好的例子，这实际上就是Romberg求积算法

- Romberg求积算法

  - 首先利用梯形公式（减半加密节点）计算：

    $$T_1^{(0)} = T_{2^0}, \quad T_1^{(1)} = T_{2^1}, \quad \cdots, \quad T_1^{(k)} = T_{2^k},$$

  - 然后进行Richardson外推：

    $$T_2^{(0)} = \frac{4T_1^{(1)} - T_1^{(0)}}{3}, \quad T_2^{(1)} = \frac{4T_1^{(2)} - T_1^{(1)}}{3}, \quad T_2^{(2)} = \cdots,$$
    $$T_3^{(1)} = \frac{4^2 T_2^{(2)} - T_2^{(1)}}{4^2 - 1}, \quad T_3^{(2)} = \cdots,$$

    一般通式为：

    $$T_{j+1}^{(k-1)} = \frac{4^j T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}}{4^j - 1}.$$

- Gauss型公式：不采用等距节点，而是采用最优化的节点选择，使得代数精度尽可能高
  - 误差项：

    $$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = (f[x, x_0, \cdots, x_n], \omega_{n+1})_\rho$$

    其中$\omega_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$。

    假设f是M次多项式，则$f[x, x_0, \cdots, x_n]$是次数为$M - (n+1)$的多项式，即$f[x, x_0, \cdots, x_n] \in \mathcal{P}^{M-n-1}$.

    如果选择x_i是$n+1$次正交多项式（相对于ρ）的零点，则$\omega_{n+1}(x)$是$n+1$次正交多项式，满足：

    $$\omega_{n+1} \perp_\rho \mathcal{P}^n$$

    令$M - n - 1 = n$解得$M = 2n+1$，所以这时候对于$f \in \mathcal{P}^{2n+1}$，我们都有$E_n(f) = 0$!

    Slogan：选择节点为$n+1$次正交多项式的零点，可得至少$2n+1$阶代数精度

  - **固定节点Gauss型公式**：变更权函数

    如果$n+1$个节点中共有m个固定节点，则有$n-m+1$个可调整节点，选择其为次数$n-m+1$正交多项式的零点，则可得$n+1+n-m = 2n+1-m$阶代数精度，例如下面的例题，3个节点中固定1个节点，可得$2 \times 2 + 1 - 1 = 4$阶代数精度

    【例题】

    请确定以下求积公式：

$$\int_0^1 x^2 f(x)\mathrm{d}x \approx A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + A_3 f(1),$$

中的参数A_1, A_2, A_3, x_1, x_2，使得其具有尽可能高的代数精度，并给出代数精度和求积余项公式.

【解答】

因为要求求积公式有尽可能高的代数精度，因此是插值型的求积公式. 计算积分余项可得:

$$E(f) = \int_0^1 x^2[f(x) - L(x)]\mathrm{d}x = \int_0^1 x^2 f[x, x_1, x_2, 1](x-1)(x-x_1)(x-x_2)\rho(x)\mathrm{d}x.$$

定义$\rho(x) = x^2(x-1)$，则:

$$E(f) = \int_0^1 f[x, x_1, x_2, 1](x-x_1)(x-x_2)\rho(x)\mathrm{d}x = (f[x, x_1, x_2, 1], (x-x_1)(x-x_2))_\rho.$$

若f是次数为M的多项式，则均差$f[x, x_1, x_2, 1]$为次数是$M-3$的多项式. 如果我们选择x_1, x_2为$[0,1]$上关于带权内积$(\cdot,\cdot)_\rho$的正交多项式的零点，则根据正交多项式的性质可知，当$M-3 \le 1$，即$M \le 4$时，$(x-x_1)(x-x_2) \perp f[x, x_1, x_2, 1]$，即$E(f) = 0$. 也即此时该求积公式有4阶代数精度.

下面计算$[0,1]$上的二次正交多项式，也就是让$p_2(x) = x^2 + ax + b$在带权内积下与1和x都正交，也就是:

$$(p_2, 1)_\rho = 0 \Leftrightarrow \int_0^1 (x^2+ax+b)x^2(x-1)\mathrm{d}x = 0 \Leftrightarrow -\frac{1}{20}a - \frac{1}{12}b = \frac{1}{30},$$
$$(p_2, x)_\rho = 0 \Leftrightarrow \int_0^1 (x^2+ax+b)x^3(x-1)\mathrm{d}x = 0 \Leftrightarrow -\frac{1}{30} - \frac{1}{20}b = \frac{1}{42},$$

解得$a = -\frac{8}{7}$，$b = \frac{2}{7}$，由此可知p_2的表达式为:

$$p_2(x) = x^2 - \frac{8}{7}x + \frac{2}{7}.$$

解方程$p_2(x) = 0$可得$x_1 = \frac{4-\sqrt{2}}{7}$，$x_2 = \frac{4+\sqrt{2}}{7}$.

根据代数精度的概念可得:

$$A_1 + A_2 + A_3 = \int_0^1 x^2\mathrm{d}x = \frac{1}{3},$$
$$A_1x_1 + A_2x_2 + A_3x_3 = \int_0^1 x^3\mathrm{d}x = \frac{1}{4},$$
$$A_2x_1^2 + A_2x_2^2 + A_3x_3^2 = \int_0^1 x^4\mathrm{d}x = \frac{1}{5},$$

解方程可得:

$$A_1 = \frac{1}{240}[32 - 13\sqrt{2}], \quad A_2 = \frac{1}{240}[32 + 13\sqrt{2}], \quad A_3 = \frac{1}{15}.$$

余项公式即为

$$E(f) = \int_0^1 f[x, x_1, x_2, 1](x-x_1)(x-x_2)\rho(x)\mathrm{d}x$$

- **Gauss 求积公式的求积系数 A_k 总是大于零.**

  【证明】因为Gauss求积公式至少有$2n+1$次代数精度，所以计算$E_n(l_j(x)^2) = 0$可得$0 < I(l_j(x)^2) = A_j$.（注意到$l_j(x_k)^2 = \delta_{jk}$）

  【推论】Gauss 求积公式总是稳定的（相容+系数$>$ 0推出稳定）

- **Gauss 求积公式满足**$\lim_{n\to\infty} I_n(f) = I(f)$

  【证明】设$\int_a^b \rho(x)\mathrm{d}x = \sum_{j=1}^n A_j = C > 0$. $\forall\varepsilon > 0$，根据Weierstrass定理可知，存在某个多项式q（不妨$\deg q = m$），使得:

$$\|f - q\|_\infty < \frac{\varepsilon}{2c},$$

  于是:

$$|I_n(f) - I(f)| \le |I_n(f) - I_n(q)| + |I_n(q) - I(q)| + |I(q) - I(f)|,$$

  对于第二项，取n使得$2n+1 > m$，则根据I_n的代数精度为$2n+1$可知$I_n(q) - I(q) = 0$;

  对于第一项，$|I_n(f) - I_n(q)| = \sum_{j=1}^n A_j|f(x_i) - q(x_i)| \le \|f - q\|_\infty \cdot \int_a^b \rho(x)\mathrm{d}x < \varepsilon/2$

对于最后一项，$|I(q)-I(f)| \le \|f-q\|_\infty \int_a^b \rho(x)\mathrm{d}x < \varepsilon/2$

由此可知$|I_n(f)-I_n(q)| < \varepsilon/2$，对$n$足够大，从而收敛.

- **Gauss求积公式的余项可估计为:**

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b \rho(x)[\omega_{n+1}(x)]^2\mathrm{d}x.$$

【证明】只需要用到$I_n(f)$代数精度为$2n+1$. 我们写$f(x)$的Newton型Hermite插值:

$$f(x) = H_{2n+1}(x) + f[x, x_0, x_0, x_1, x_1, \cdots, x_n, x_n]\omega_{n+1}^2(x).$$

做带权积分，并根据I_n是$2n+1$阶代数精度，可得

$$\int_a^b \rho(x)H_{2n+1}(x)\mathrm{d}x = I_n(H_{2n+1}) = \sum_{k=0}^n A_k H_{2n+1}(x_k) = \sum_{k=0}^n A_n f(x_k).$$

所以:

$$E_n(f) = \int_a^b \rho(x)f(x)\mathrm{d}x - \int_a^b \rho(x)H_{2n+1}(x)\mathrm{d}x$$

$$= \int_a^b \rho f[x, x_0, x_0, \cdots, x_n, x_n]\omega_{n+1}^2\mathrm{d}x = f[\eta, x_0, x_0, \cdots, x_n, x_n]\int_a^b \rho\omega_{n+1}^2\mathrm{d}x$$

$$= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b \rho\omega_{n+1}^2\mathrm{d}x.$$

- 数值微分

$$f(x_{k+1}) = f(x_{k-1}) + \int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} f'(x)\mathrm{d}x$$

用数值积分公式:

$$f_{k+1} = f_{k-1} + \frac{h}{3}(\varphi_{k-1} + 4\varphi_k + \varphi_{k+1}) \Rightarrow \varphi_{k-1} + 4\varphi_k + \varphi_{k+1} = 6f[x_{k-1}, x_{k+1}].$$

φ_0和φ_n可以用两点或三点格式计算，然后求解三对角方程组

- 奇异积分
  - 区间截断、变量替换
  - 奇点分离

$$\int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\mathrm{d}x = \int_0^1 \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{x}} + \int_0^1 \frac{\cos x - 1}{\sqrt{x}}\mathrm{d}x = 2 + \int_0^1 \frac{\cos x - 1}{\sqrt{x}}\mathrm{d}x.$$

  - Gauss型求积公式（将奇异部分放在权函数中考虑）

插值法与函数逼近

多项式插值、Runge现象与分段低次插值

- Lagrange插值基函数$l_k(x) = \prod_{i=0, i\ne k}^n \frac{x-x_i}{x_k-x_i}$，满足$l_k(x_m) = \delta_{km}$

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

- 均差

$f[x_j] = f(x_j)$，$f[x_j, x_{j+1}, \cdots, x_{j+k}] := \frac{f[x_{j+1},\cdots,x_{j+k}]-f[x_j,\cdots,x_{j+k-1}]}{x_{j+k}-x_j}$. （递推定义式）

性质:

  - $f[x_j, \cdots, x_{j+k}] = \sum_{\ell=j}^{j+k}\frac{f(x_\ell)}{\omega_{jk}'(x_\ell)}$

    其中$\omega_{jk}(x) = \prod_{m=j}^{j+k}(x-x_m)$
  - $f[x_{\sigma(j)}, \cdots, x_{\sigma(j+k)}] = f[x_j, \cdots, x_k]$ （对称性）
  - $f[x, x_0, \cdots, x_k]$是x的m次多项式$\Rightarrow f[x, x_0, \cdots, x_{k+1}]$是$x$的$m-1$次多项式
  - 如果$f \in C^n[a,b]$，而且x_0，$\cdots$，x_n为$[a,b]$上互异的$n+1$个点，则存在$\xi \in (\min x_i, \max x_i)$，使得: $f[x_0, \cdots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$

【几个例题】

- 【例1】

题目 1. 设 $x_j,\ j=0,1,\cdots,n$ 为互异节点, 求证

1. $\sum_{j=0}^{n} x_j^k l_j(x) \equiv x^k,\ k=0,1,\cdots,n;$
2. $\sum_{j=0}^{n}\left(x_j-x\right)^k l_j(x) \equiv 0,\ k=1,\cdots,n.$

其中 $l_j(x)=\frac{w_{n+1}(x)}{(x-x_j)w_{n+1}'(x_j)}$ 为 Lagrange 插值基函数, $w_{n+1}(x)=\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$.

1. 令$p_k(x)=x^k$，注意到左边就是p_k的Lagrange插值多项式，所以右-左$=R(x)=\frac{p_k^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$，根据$k\le n$可知右-左恒等于0
2. 根据二项式展开以及第一问结论：

$$\sum_{j=0}^{n}(x_j-x)^k\ell_j(x)=\sum_{j=0}^{n}\sum_{i=0}^{k}\binom{k}{i}x_j^k(-x)^{k-i}\ell_j(x)$$
$$=\sum_{i=0}^{k}\binom{k}{i}(-x)^{k-i}\left(\sum_{j=0}^{n}x_j^k\ell_j(x)\right)=\sum_{i=0}^{k}\binom{k}{i}(-x)^{k-i}x^k=(x-x)^k\equiv 0.$$

- 【例2】

题目 2. 设 $f(x)=\frac{1}{a-x}$, 试证明

1. $f\left[x_0,x_1,\cdots,x_n\right]=\prod_{j=0}^{n}\left(\frac{1}{a-x_j}\right);$
2. $\frac{1}{a-x}=\frac{1}{a-x_0}+\frac{x-x_0}{(a-x_0)(a-x_1)}+\cdots+\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{n-1})}{(a-x_0)\cdots(a-x_n)}+\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(a-x_0)\cdots(a-x_n)(a-x)}.$

1. 用数学归纳法直接计算

当 $n=1$ 时,$f\left[x_0,x_1\right]=\frac{\frac{1}{a-x_1}-\frac{1}{a-x_0}}{x_1-x_0}=\frac{1}{(a-x_0)(a-x_1)}$. 假设对 $k=n-1$ 成立，则

$$\begin{aligned}f\left[x_0,x_1,\ldots,x_n\right]&=\frac{f\left[x_1,\ldots,x_n\right]-f\left[x_0,\ldots,x_{n-1}\right]}{x_n-x_0}\\&=\frac{\prod_{j=1}^{n}\left(\frac{1}{a-x_j}\right)-\prod_{j=0}^{n-1}\left(\frac{1}{a-x_j}\right)}{x_n-x_0}\\&=\prod_{j=0}^{n}\left(\frac{1}{a-x_j}\right).\end{aligned}$$

由数学归纳法可知等式对任意 $n\in\mathbb{N}$ 都成立.

2. 用Newton型插值公式

- 【例3】设$f(x)=x^7+x^4+3x+1$，求$f[2^0,2^1,\cdots,2^7]=1$，$f[2^0,\cdots,2^8]=0$

【注】$f[2^0,\cdots,2^7]=\frac{f^{(7)}(\xi)}{7!}$，并注意到$f^{(7)}(x)\equiv 7!$；$f[2^0,\cdots,2^8]=\frac{f^{(8)}(\xi)}{8!}$，所以$f[2^0,\cdots,2^8]=0.$

- Newton型插值公式：

$$p_n^N(x)=f[x_0]+f[x_0,x_1](x-x_0)+\cdots+f[x_0,\cdots,x_n]\prod_{j=0}^{n-1}(x-x_j)$$

可以证明$L_n(x)=p_n^N(x)$

Newton型插值余项：

$$R_n(f)(x)=f[x,x_0,\cdots,x_n]\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)=f[x,x_0,\cdots,x_n]\omega_{n+1}(x).$$

插值余项估计：

$$R_n(f)(x)=\frac{f^{(n+1)}(\eta_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

（用均差性质的第五条可得$f[x,x_0,\cdots,x_n]=\frac{f^{(n+1)}(\eta_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$）

- Hermite型插值公式

  Hermite插值基函数：$\alpha_j(x)=(1+2l_j'(x_j)(x_j-x))l_j^2(x)$；$\beta_j(x)=(x-x_j)l_j^2(x)$

  满足的条件是：$\alpha_j(x_k)=\delta_{jk}$，$\alpha_j'(x_k)=0$，$\beta_j(x_k)=0$，$\beta_j(x_k)'=\delta_{jk}$

- 问：每一次都用插值基函数构造Hermite插值过于麻烦，是否有类似的Newton型插值公式？

  这需要引入重节点的均差：$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f[x,x_0,\cdots,x_n]=f[x,x,x_0,\cdots,x_n]$（可用于构造Newton型的一般Hermite插值）

  特别地，$f'(x)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f[x]=f[x,x]$，另外重节点均差也满足：

$$f[x_0,\cdots,x_n]=\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!},\quad f[x_0,\cdots,x_n]=\frac{f[x_0,\cdots,x_{n-1}]-f[x_1,\cdots,x_n]}{x_0-x_n},$$

  以上$x_0,\cdots,x_n$都可以有相同的，$\xi\in(\min\xi_i,\max\xi_i)$

- **一般Hermite插值（密切插值法）**

  把导数看成重节点的误差，有**Newton型**插值多项式：

  $p^{(k)}(x_0)=f^{(k)}(x_0)$，$k=0,1,2$，$p(x_1)=f(x_1)$，$p(x_2)=f(x_2)$，$p'(x_2)=f'(x_2)$

$$\begin{aligned}p_5(x)=f[x_0]&+f[x_0,x_0](x-x_0)+f[x_0,x_0,x_0](x-x_0)^2+f[x_0,x_0,x_0,x_1](x-x_0)^3\\&+f[x_0,x_0,x_0,x_1,x_2](x-x_0)^3(x-x_1)+f[x_0,x_0,x_0,x_1,x_2,x_2](x-x_0)^3(x-x_1)(x-x_2)\\&+f[x_0,x_0,x_0,x_1,x_2,x_2](x-x_0)^3(x-x_1)(x-x_2)\end{aligned}$$

  $R_5(x)=f(x)-p_5(x)=f[x,x_0,x_0,x_0,x_1,x_2,x_2](x-x_0)^3(x-x_1)(x-x_2)^2$

  其中，**重节点均差表**可以用递推公式一步一步地计算，并注意$f[x,x]=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f[x]=f'(x)$

  【例题】函数$f(x)$在点$x_0=0$，$x_1=1$上的值分别是$f(x_0)=0$，$f(x_1)=1$，以及在x_1点处的导数值为$f'(x_1)=0$，二阶导数值$f''(x_1)=1.$

  可用待定系数法求出一个三次多项式$P_3(x)$，满足：

$$\begin{cases}P_3(x_i)=f(x_i), & i=0,1\\ P_3'(x_1)=f'(x_1), & P_3''(x_1)=f''(x_1).\end{cases}$$

  其插值余项表达式为：

$$R_3(x)=f(x)-P_3(x)=f[x,0,1,1,1]x(x-1)^3$$

- 分段低次插值
  - 分段线性插值基函数（帽子函数）：

$$\phi_0(x)=\begin{cases}0, & x_1\le x;\\ \frac{x-x_1}{x_0-x_1}, & x_0\le x\le x_1;\end{cases}\quad \phi_n(x)=\begin{cases}0, & x\le x_{n-1};\\ \frac{x-x_{n-1}}{x_n-x_{n-1}}, & x_{n-1}\le x\le x_n;\end{cases}$$

$$\phi_j(x)=\begin{cases}0, & x\le x_{j-1}\text{ or }x\ge x_{j-1};\\ \frac{x-x_{j-1}}{x_j-x_{j-1}}, & x_{j-1}\le x\le x_j;\\ \frac{x-x_{j+1}}{x_j-x_{j+1}}, & x_j\le x\le x_{j+1};\end{cases}\quad j=1,2,\cdots,n-1.$$

    性质：$\sum_{j=0}^n\phi_j(x)=\mathbb{1}_{[a,b]}$

    由这些基函数的线性组合可以构造出在每个$[x_k,x_{k+1}]$上的限制都是线性函数的函数（分段线性插值函数）：

$$I_h(x)=\sum_{j=0}^n f_j\phi_j(x)$$

    【收敛性】$f\in C[a,b]$，当$h=\max h_i=\max(x_i-x_{i-1})\to 0$时，$I_h$一致收敛到$f$

    【证明】当$x\in[x_{k-1},x_k]$时，根据$1=\phi_{k-1}(x)+\phi_k(x)$可得

$$|f(x)-I_h(x)|=|[f(x)-f(x_{k-1})]\phi_{k-1}(x)+[f(x)-f(x_k)]\phi_k(x)|\le\phi_{k-1}(x)\omega(f;h_k)+\phi_k(x)\omega(f;h_k)\le\omega(f;h),$$

    对所有$x\in[a,b]$都成立，所以$\|f-I_h\|_\infty\le\omega(f;h)\to 0$

    （连续模的定义：$\omega(f;h)=\sup_{|t|\le h,x,x+t\in[a,b]}|f(x+t)-f(x)|$

  - 分段Hermite插值基函数：相当于在每个小区间上做三次Hermite插值（用到端点的函数值和端点的导数值），也就是：

$$I_h|_{[x_k,x_{k+1}]}=f_k\alpha_k+f_{k+1}\alpha_{k+1}+m_k\beta_k+m_{k+1}\beta_{k+1}.$$

    其中$f_j=f(x_j)$，$m_j=f'(x_j)$

由此可知α_j和β_j都是帽子函数的形式，例如α_j只在$[x_{j-1},x_j]$和$[x_j,x_{j+1}]$上不得0，表达式为：

$$\alpha_j|_{[x_{j-1},x_j]}=(1+2(x_j-x)l_j'(x))l_j^2(x)=\left(1+\frac{2(x_j-x)}{x_j-x_{j-1}}\right)\left(\frac{x-x_{j-1}}{x_j-x_{j-1}}\right)^2,$$

$$\alpha_j|_{[x_j,x_{j+1}]}(1+2(x_j-x)l_j'(x))l_j^2(x)=\left(1+\frac{2(x_j-x)}{x_j-x_{j+1}}\right)\left(\frac{x-x_{j+1}}{x_j-x_{j+1}}\right)^2,$$

这样：

$$I_h(x)=\sum_{j=0}^n[f_j\alpha_j(x)+m_j\beta_j(x)].$$

- 分段样条插值

  以三次为例：共有n个小区间，每个小区间上确定4个自由度，有$4n$自由度

  约束条件：每个节点处满足插值条件——$n+1$限制；每个内部节点处要求**二阶连续可微**，也就是函数值、一阶导、二阶导都要相等，$3(n-1)$限制

  还剩下$4n-n-1-3n+3=2$个自由度，因此还需要两个边界条件. 可以选择：

  - I型边界条件（端点一阶导数）
  - II型边界条件（端点二阶导数）
  - 周期边界条件（一阶导、二阶导分别相等）

  求解方法：由于三次样条是分段三次多项式，根据前面求出的线性空间：

  $$\mathfrak{S}=\{\sum_{j=0}^n[f_j\alpha_j+m_j\beta_j]:f_j\in\mathbb{R},m_j\in\mathbb{R}\}$$

  由插值条件可以给出f_j，如何求出m_j？要用到二阶连续可微性. 回忆基函数支集性质：

  $$S|_{[x_k,x_{k+1}]}=f_k\alpha_k+f_{k+1}\alpha_{k+1}+m_k\beta_k+m_{k+1}\beta_{k+1}.$$

  代入二阶导数连续性条件+边界条件可得——转角方程

  代入一阶导数连续性条件+边界条件可得——三弯矩方程

函数逼近和数据拟合

- 最佳一致逼近
  - 定义：称

    $$p_n^*=\text{argmin}_{p_n\in\mathcal{P}_n}\Delta(f,p_n).$$

    其中

    $$\Delta(f,p_n):=\|f-p_n\|_\infty$$

    为f在$[a,b]$上的最佳一致逼近n次多项式

    （存在性由$\mathbb{R}^{n+1}$中闭球的紧性保证）
  - Tchebyshev定理：$p^*\in\mathcal{P}_n$，则p^*是最佳一致逼近当且仅当它“至少”有$n+2$个轮流为正负的偏差点

    推论——必要条件：若为最佳一致逼近，则必然同时有正的和负的偏差点

    推论——存在唯一性：**最佳一致逼近多项式是唯一的**

    （如果不唯一，考虑$\frac{p+q}{2}$，则通过计算可得必有$p(x_k)=q(x_k)$对所有偏差点都成立，因此$p-q$有$n+2$个不同的零点，所以$p=q$）

    【例题】设$f\in C[-a,a]$，$p_n(x)\in\mathcal{P}_n$是f的最佳一致逼近多项式，证明当f是偶（奇）函数时，p_n也是偶（奇）函数.

    【证明】考虑$q(x)=\frac{1}{2}(p(x)+p(-x))$，则对任何$x\in[-a,a]$我们有：

    $$|f(x)-q(x)|=\left|\frac{f(x)+f(-x)}{2}-\frac{p(x)+p(-x)}{2}\right|\leq\sup_{x\in[-a,a]}\left|\frac{f(x)-p(x)}{2}\right|+\sup\left|\frac{f(-x)-p(-x)}{2}\right|\leq\|f-p\|_\infty$$

    所以q也是f的最佳一致逼近多项式，根据最佳一直逼近多项式的唯一性可知$p=q$，因此p是偶函数.

    对于奇函数，考虑$q(x)=\frac{1}{2}(p(x)-p(-x))$即可.
- 最佳平方逼近

- 最佳平方逼近存在唯一。事实上，我们需要求解的是：

$$f^* = P_{\mathfrak{S}_n} f = \mathrm{argmin}_{g\in\mathfrak{S}_n}\|f-g\|_2$$

  其中二范数由带权内积$(\cdot,\cdot)_\rho$诱导

  根据Hilbert空间$L^2_\rho[a,b]$中的**投影定理**可知，这等价于求解法方程（f^*在$\mathfrak{S}_n$中极小化均方误差当且仅当$f-f^*$垂直于每一个$\mathfrak{S}_n$中的基向量）：

$$(f-f^*,\varphi_k)_\rho = 0,\quad \text{i.e.}\quad (f,\varphi_k) = \sum_{\ell=1}^{n} a_\ell(\varphi_\ell,\varphi_k) = \sum_{\ell=1}^{n} a_\ell(\varphi_k,\varphi_\ell),\quad \forall k$$

  写成矩阵方程的形式为

$$\mathbf{G}\mathbf{a}^* = \mathbf{f}.$$

  其中$\mathbf{G}$是Gram矩阵，如果使用正交多项式，则$\mathbf{G}$是对角矩阵！

- 正交多项式：由$(1,x,x^2,\cdots)$经过G-S正交化得到的一组向量

  基本性质：

  - $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$是$\mathcal{P}_n$一组基
  - $\varphi_n\perp\mathcal{P}_{n-1}$
  - 令$\varphi_{-1}(x)\equiv 0$，则有递推关系：

$$\varphi_{n+1}(x) = (\alpha_n x+\beta_n)\varphi_n(x)+\gamma_{n-1}\varphi_{n-1}(x).$$

    其中$\alpha_n,\beta_n,\gamma_n$是一些常数，可以通过做内积确定（可以用来推导一些递推关系）

    （即：第$n+1$个正交多项式总是可以用$x\varphi_n(x)$，$\varphi_n(x)$和$\varphi_{n-1}(x)$的线性组合生成）

  - j次正交多项式必然恰好有j个单根
  - Christoffel-Darboux恒等式：

    $\{\varphi_j\}_{j=0}^\infty$正交多项式，$a_n$为$\varphi_n$首项系数，$(\varphi_j,\varphi_k)=\delta_{jk}$（标准正交），令$\alpha_n = a_{n+1}/a_n$，则：

$$(x-y)\sum_{k=0}^{n}\varphi_k(x)\varphi_k(y) = \frac{1}{\alpha_n}[\varphi_{n+1}(x)\varphi_n(y)-\varphi_{n+1}(y)\varphi_n(x)]$$

- Legendre多项式：$[-1,1]$上关于权函数1的正交多项式$\propto \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(x^2-1)^n]$

  Tchebyshev多项式：$[-1,1]$上关于权函数$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$的正交多项式 **可以表示成**$T_n(x)=\cos(n\arccos x)$（用$\cos n\theta$的形式可以推出很多关于Tchebyshev多项式的递推式）

  Tchebyshev多项式的首项系数为2^{n-1}

  【证明】$T_{n+1}(x)=\cos(n+1)\theta=\cos n\theta$，$T_{n-1}(x)=\cos(n-1)\theta$，所以
  $T_{n+1}(x)+T_{n-1}(x)=2\cos\theta\cos n\theta = 2xT_n(x)$

  因为$T_0=1$，所以T_n的首项系数为2^{n-1}

  Laguerre多项式：$[0,+\infty)$上关于权函数e^{-x}的正交多项式

  Hermite多项式：$(-\infty,+\infty)$上关于e^{-x^2}的正交多项式

- 广义Fourier级数
  - Fourier级数，Bessel不等式，Parseval等式
  - 【定理】首项系数为1的Legendre多项式是所有n次首1多项式中二范数最小的

    【证明】任取$q_n(x)=x^n+q_{n-1}(x)\in\mathcal{P}_n$是首一多项式，可以重新写成$q_n(x)=p_n(x)+\tilde{q}_{n-1}(x)$，其中$p_n(x)$是$n$次首一Legendre多项式，$\tilde{q}_{n-1}=x^n-p_n+q_{n-1}\in\mathcal{P}_{n-1}$，根据$p_n\perp\mathcal{P}_{n-1}$可知$\|q_n\|\geq\|p_n\|$.

  - 插值余项最小化：由于带权二范数意义下用截断Tchebyshev级数可以近似对函数**一致逼近**，所以选择差值节点为Tchebyshev多项式的零点时，可以使$\|\omega\|_\infty$近似最小

- 有理逼近

$$R_{nm}(x)=\frac{P_n(x)}{Q_m(x)}=\frac{\sum_{k=0}^n a_k x^k}{\sum_{k=0}^m b_k x^k}$$

  计算方法：

  首先求Taylor展式，确定前$n+m$个系数；求解线性方程组$Hb=c$，其中：

$$H=\begin{pmatrix} c_n & \cdots & c_{n-m+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n+m-1} & \cdots & c_n \end{pmatrix}, \quad b=\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}, \quad c=-\begin{pmatrix} c_{n+1} \\ \vdots \\ c_{n+m} \end{pmatrix}$$

其中c_j就是第i个Taylor展开的系数，然后再按照公式：

$$a_k = c_k + b_1 c_{k-1} + b_2 c_{k-2} + \cdots + b_k c_0$$

计算每个a_k

例题：

写出 $f(x)=\log(1+x)$ 在零点附近的 Taylor 展式：

$$f(x) = -\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k},$$

所以：

$$c_0 = 0, \quad c_1 = 1, \quad c_2 = -\frac{1}{2}, \quad c_3 = \frac{1}{3},$$
$$c_4 = -\frac{1}{4}, \quad c_5 = \frac{1}{5}, \quad c_6 = -\frac{1}{6},$$

求解 $(3,3)$Pade 逼近，也就是要求解线性方程组 $H\mathbf{b}=\mathbf{c}$，其中：

$$H=\begin{pmatrix} c_3 & c_2 & c_1 \\ c_4 & c_3 & c_2 \\ c_5 & c_4 & c_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}=-\begin{pmatrix} c_4 \\ c_5 \\ c_6 \end{pmatrix}.$$

解得：

$$\mathbf{b}=\begin{pmatrix} \frac{3}{2} \\ \frac{3}{5} \\ \frac{1}{20} \end{pmatrix}.$$

所以：

$$a_0 = c_0 = 0,$$
$$a_1 = c_1 = 1,$$
$$a_2 = c_2 + \sum_{j=0}^{1} c_j b_{2-j} = c_2 + c_0 b_2 + c_1 b_1 = 1,$$
$$a_3 = c_3 + \sum_{j=0}^{2} c_j b_{3-j} = c_3 + c_0 b_3 + c_1 b_2 + c_2 b_1 = \frac{11}{60}.$$

根据定义，$(3,3)$Pade 逼近的表达式为：

$$R_{33}(x) = \frac{\sum_{k=0}^{3} a_k x^k}{\sum_{k=0}^{3} b_k x^k} = \frac{0 + x + x^2 + \frac{11}{60}x^3}{1 + \frac{3}{2}x + \frac{3}{5}x^2 + \frac{1}{20}x^3} = \frac{11x^3 + 60x^2 + 60x}{3x^3 + 36x^2 + 90x + 60}.$$

- 最小二乘法：求解正则方程$A^T Ax = b$

  均方误差（MSE）：$MSE = \frac{1}{n}\|b - Ax\|_2^2$
- 周期函数的最佳平方逼近：Fourier展开

  离散情形：离散Fourier变换和快速Fourier变换

- $\{e^{2\pi inx}\}$是$\mathcal{C}[0,1]$上的标准正交向量组
- 离散化：$\mathcal{C}[0,1]\sim S=\{\frac{0}{n},\cdots,\frac{n-1}{n}\}$.
- $\mathbb{C}^S\simeq\mathbb{C}^n$.
- 离散内积：$\langle f,g\rangle=\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}\overline{f(\frac{k}{n})}g(\frac{k}{n})$，其中$f,g\in\mathbb{C}^S$.
- 离散指数函数：$e^{2\pi inx}\sim e^{2\pi i\frac{k}{n}}$，记$n$次本源单位根$\omega_n=e^{\frac{2\pi i}{n}}$，则满足

  $\omega_n^n=1,\omega_n^k\neq 1,\forall k=0,1,2,\cdots,n-1$.

  这时候$e^{2\pi i\frac{k}{n}}$看成是$\mathbb{C}^S$中的向量，它等同于$\left(1,\omega_n^k,\omega_n^{2k},\cdots,\omega_n^{(n-1)k}\right)^T$.

  Fourier矩阵$\mathcal{F}_n=\begin{pmatrix}1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1\\ 1 & \omega & \omega^2 & \omega^3 & \cdots & \omega^{n-1}\\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 & \cdots & \omega^{2(n-1)}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 1 & \omega^{n-1} & \omega^{2(n-1)} & \omega^{3(n-1)} & \cdots & \omega^{(n-1)^2}\end{pmatrix}$

  $\mathcal{F}_n$尚非单位正交，而是满足$\overline{\mathcal{F}}_n^T\mathcal{F}_n=n\mathbf{I}_n$.
- 离散Fourier变换（DFT）

  $f=\hat{f}(0)\mathbf{e}_0+\cdots+\hat{f}(n-1)\mathbf{e}_{n-1}$，$f\in\mathbb{C}^S$.

  因为$\hat{f}(k)=\langle\mathbf{e}_k,f\rangle_{\mathbb{C}^S}=\frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1}\overline{\omega_n^{jk}}f_j$

  $\begin{pmatrix}\hat{f}(0)\\ \vdots\\ \hat{f}(n-1)\end{pmatrix}=\frac{1}{n}\overline{\mathcal{F}}_n\begin{pmatrix}f(0)\\ \vdots\\ f(n-1)\end{pmatrix}$
- 快速Fourier变换（FFT）

  DFT：$\mathcal{O}(n^2)$.

  FFT：考虑矩阵分解，时间复杂度为$\mathcal{O}(n\log n)$.

求解非线性方程

- 二分迭代法
- 不动点迭代法：

  【定理】

  压缩映射：设$\varphi:D\subset\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$，如果存在$C\in(0,1)$使得$\forall x,y\in D$都有$\|\varphi(x)-\varphi(y)\|\leq C\|x-y\|$，则称$\varphi$为压缩映射

  如果φ在闭集D上是压缩映射，且$\varphi(D)\subset D$，则φ在D上有唯一不动点. 而且，任取$x_0\in D$，迭代生成$\{x_n\}_{n=0}^{\infty}$，则$x_n\to x^*$，其中x^*是φ的唯一不动点
- 高阶格式的构造：
  - 高阶格式的充要条件：设φ是迭代函数，φ的p阶导数在$x=\varphi(x)$的根α的邻域内是连续的（$\varphi(\alpha)=\alpha$），如果：

    $$\varphi(\alpha)=\alpha,\quad\varphi^{(k)}(\alpha)=0(k=1,\cdots,p-1),\quad\varphi^{(p)}\neq 0,$$

    则φ是p阶迭代函数. 反之，如果φ是p阶迭代函数，则上式必满足.
  - 在$\alpha=\mathcal{F}(0)$处对f的反函数$\mathcal{F}$Taylor展开，截断可得

    $$\varphi_p(x)=x+\sum_{j=1}^{p-1}\frac{[-f(x)]^j}{j!}\mathcal{F}^{(j)}(f(x))$$

    于是有：

    $$\varepsilon_{k+1}=x_{k+1}-\alpha=\varphi_P(x_k)-\alpha=-\frac{\mathcal{F}^{(p)}(\xi)}{p!}[-f(x_k)]^p.$$

    而$f(x_k)=f(x_k-\alpha+\alpha)=f(\alpha)+f'(\eta)(x_k-\alpha)=f'(\eta)(x_k-\alpha)$，所以：

    $$|\varepsilon_{k+1}|\leq\frac{\left\|\mathcal{F}^{(p)}\right\|_\infty\|f'\|_\infty}{p!}|\varepsilon_k|^p$$

    也就是具有p阶格式

- 注：对$x=\mathcal{F}(f(x))$两边求导可得每个$\mathcal{F}^{(j)}(f(x))$，例如：

  $$1=\mathcal{F}'(f(x))f'(x)$$

  所以：

  $$\mathcal{F}'(f(x))=\frac{1}{f'(x)},\quad \varphi_1(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}$$

  此即Newton迭代格式

- Aitken加速：设有一个迭代格式$\varphi(x)$，初值x_0，产生的序列为$\{x_k\}$，在计算完x_1,x_2之后，按照：

  $$\widetilde{x}_0=x_0-\frac{(x_1-x_0)^2}{x_2-2x_1+x_0}.$$

  由此可以利用x_1和x_2修正x_0

- **Steffensen加速**：将Aitken加速与不动点迭代相结合可以得到Steffensen加速格式：

  $$\psi(x)=x-\frac{(\varphi(x)-x)^2}{\varphi(\varphi(x))-2\varphi(x)+x}$$

  【定理】设$\varphi'(\alpha)\neq 1$，则Steffensen加速格式至少是二阶收敛的（如果$\varphi'(\alpha)=1$，则为一阶收敛的）

  【例题】$\varphi(x)=x+x^5$，有一个不动点$\varphi(0)=0$. 如果用它本身进行迭代，设初值$x_0\neq 0$，则

  $$|\varepsilon_{k+1}|=|x_{k+1}-0|=|x_k+x_k^5|>|x_k|+|x_k|^5>|x_k|=|\varepsilon_k|,\quad k=0,1,\cdots$$

  因为$|\varepsilon_0|=|x_0-0|>0$，所以$\lim_{k\to\infty}\varepsilon_k\neq 0$，所以本身不收敛.

  但是，如果做Steffensen加速：

  $$\psi(x)=x-\frac{x^{10}}{(x^5+1)^5+x^5+1-2x^5-2+x}=x-\frac{x^9}{x^{24}+5x^{19}+10x^{14}+10x^9+4x^4+1}$$

  设$x_n>0$，则容易看出$x_{n+1}=\psi(x_n)<x_n$且$x_{n+1}>0$；设$x_n<0$，则容易看出$x_{n+1}=\psi(x_n)>x_n$，且$x_{n+1}<0$；所以$\{x_n\}$是单调下降且有下界或单调上升且有上界的序列，所以$\{x_n\}$必然有极限，对$x_{n+1}=\psi(x_n)$两边同时取极限立刻得到$\lim_n x_n=0$.

- Newton迭代法

  根据【高阶迭代格式构造】的讨论，Newton迭代法是二阶格式

  【定理】设$f\in C^2[a,b]$，且$f'\neq 0$，$f''(x)$不变号，且满足：

  令c是a或b中满足$|f'(c)|=\min(|f'(a)|,|f'(b)|)$的值，且满足$\frac{|f(c)|}{b-a}\le|f'(c)|$

  则任取$x_0\in[a,b]$，Newton迭代法二阶收敛到f的根α

  【例题】设$f\in C^2[a,b]$，$f'(x)>0$，$f''(x)<0$，$\forall x\in[a,b]$. 且$f(\alpha)=0$，$\alpha\in(a,b)$. 试证明：使用Newton迭代，任取$x_0\in[a,\alpha]$，都有迭代序列$\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$收敛到α.

  【解答】

  - 因为$f'(x)>0$，$\forall x\in[a,b]$，所以f在$[a,b]$上严格单调递增，所以$f(a)<0$，$f(b)>0$，而且α是f在$[a,b]$上的唯一零点.
  - $x_{k+1}=x_k-[f'(x_k)]^{-1}f(x_k)$. 如果$x_k\in[a,\alpha]$，则$f(x_k)\le 0$，$f'(x_k)>0$，所以$x_{k+1}\ge x_k$，因此$\{x_k\}$是单调递增的序列. 另一方面，令$\varphi(x)=x-[f'(x)]^{-1}f(x)$，则$\varphi'(x)=\frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$. 所以$\varphi'(x)\ge 0$在$[a,\alpha]$上成立，所以$x_{k+1}=\varphi(x_k)\le\varphi(\alpha)=\alpha$，所以$x_{k+1}\in[a,\alpha]$. 根据归纳法可知，如果$x_0\in[a,\alpha]$，则$x_k\in[a,\alpha]$对所有$k$都成立，而且这还说明$x_k$是单调递增有上界的序列，因此必然收敛到某个$x^*$.
  - 对$x_{k+1}=x_k-[f'(x_k)]^{-1}f(x_k)$两边同时取极限可得$x^*=x^*-[f'(x^*)]^{-1}f(x^*)$，根据$f'(x)>0$恒成立可知$f(x^*)=0$，再根据$\alpha$是$(a,b)$上唯一的零点可知$x^*=\alpha$，也即$x_k$收敛到$\alpha$.

- 重根迭代法：考虑$\mu(x)=\frac{f(x)}{f'(x)}$，则$\alpha$必是$\mu$的单根

  对μNewton迭代：$\varphi(x)=x-\frac{\mu(x)}{\mu'(x)}=x-\frac{f(x)f'(x)}{[f'(x)]^2-f(x)f''(x)}$.

  渐进二阶格式：$\varphi(x)=x-h(x)\frac{f(x)}{f'(x)}=\varphi(x)=x-h(x)\frac{f(x)}{f'(x)}\equiv x-\frac{f(x)\ln|f(x)|}{f'(x)(\ln|f(x)|-\ln|f'(x)|)}$

  这里$h(x)=\frac{\ln|f|}{\ln|\mu|}$，它渐进收敛到$m$（重数）