插值：(默认节点 x_i, $i=0,\cdots,n$)　n+1个

1. Lagrange插值：①插值多项式：$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i)$，其中 $l_i(x)=\prod_{j\neq i}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}$ ⇒相当于对插值点加权 $l_i(x)$ 平均

②插值误差：1)直接估计：$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_n)$，$\xi=\xi(x_0,\cdots,x_n,x)$

(截断)

⇒差商代替法：$R_n(x)=f[x_0,\cdots,x_n,x](x-x_0)\cdots(x-x_n)$

2)事后估计：

③特殊性质：$l_i(x_j)=\delta_{ij}$，$\sum_{i=0}^{n} l_i(x)=1$

2. Newton插值：①插值多项式：$N_n(x)=\sum_{i=0}^{n} t_i(x)(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})=f[x_0]+f[x_0,x_1](x-x_0)+\cdots+f[x_0,\cdots,x_n](x-x_0)\cdots(x-x_{n-1})$

(关键是算差商表)

$N_{n+1}(x)=N_n(x)+f[x_0,\cdots,x_n,x_{n+1}](x-x_0)\cdots(x-x_n)$ ⇒已知n次，求n+1次仅需再加一项.

②插值误差：$R_n(x)=f[x_0,\cdots,x_n,\underset{\triangle}{x}](x-x_0)\cdots(x-x_n)$

③特殊性质：1) k阶差商有(k+1)个点：$f[x_0,\cdots,x_k]$

2)差商与导数：$\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}=f[x_0,\cdots,x_n,x]$ ⇒n阶导数就对应n阶差商.

3)若 $f(x)$ 为m次多项式，则 $f[x_0,\cdots,x_{k-1},x]$ 为(m-k)次 ⇒k阶差商相当于作k阶导，剩m-k次

3. Hermite插值：①一般Hermite插值步骤：1)确定n，利用基函数 $h(x)$, $g(x)$ 构造 $H_{2n+1}(x)=h_i(x)f(x_i)+g_i(x)f'(x_i)$

n+1个节点有2n+2个条件，
除去0次项则最多(2n+1)次.

2)代入基函数条件求解各个值.

3)得到 $H_{2n+1}(x)$ 及误差.

插值误差：$R_{2n+1}(x)=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}(x-x_0)^2\cdots(x-x_n)^2$

②利用Newton差商构造Hermite步骤：1)令 $x_i=z_{2i}=z_{2i+1}$，$i=0,\cdots,n$

2)计算差商表：$\begin{cases} f[z_{2i},z_{2i+1}]=f'(x_i) \\ f[z_{2i+1},z_{2i+2}]=\text{正常差商} \end{cases}$

3) $H_{2n+1}(x)=f[z_0]+f[z_0,z_1](x-z_0)+\cdots+f[z_0,\cdots,z_{2n+1}](x-z_0)\cdots(x-z_{2n})$

③特殊性质：1)推广差商：$f[x_0,x_0]=f'(x_0)$，$f[\overset{n+1个}{x_0,\cdots,x_0}]=\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}$.

2)重根定理：

4. 三次样条插值: ① Runge现象: 高次插值多项式在插值区间内可能发生剧烈振荡.

② 分段线性插值: 在各个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上作线性插值

误差 $f(x)-P_i(x)=\frac{f''(\xi)}{2!}(x-x_i)(x-x_{i+1})$.

③ M关系式 $S(x_i)=y_i$ 且至多三次且二阶连续

$\because \mu_i M_{i-1}+2M_i+\lambda_i M_{i+1}=d_i$, $i=1,\cdots,n-1$

又 $\because \lambda_i=\frac{h_i}{h_i+h_{i-1}}$, $\mu_i=1-\lambda_i$

$d_i=6f[x_{i-1},x_i,x_{i+1}]$

1) 给定 M_0, M_n, 则

$$\begin{pmatrix} 2 & \lambda_1 & & \\ \mu_2 & 2 & & \\ & & \ddots & \lambda_{n-2} \\ & & \mu_{n-1} & 2 \end{pmatrix}_{(n-1)\times(n-1)} \begin{pmatrix} M_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ M_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1-\mu_1 M_0 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1}-\lambda_{n-1}M_n \end{pmatrix}$$

2) 指定 m_0, m_n, 则

$d_0=2M_0+M_1=\frac{6}{h_0}(f[x_0,x_1]-m_0)$

$d_n=M_{n-1}+2M_n=\frac{6}{h_{n-1}}(m_n-f[x_{n-1},x_n])$

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & & & \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ & & & 1 & 2 \end{pmatrix}_{(n+1)\times(n+1)} \begin{pmatrix} M_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ M_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix}$$

解之得 $M_0,\cdots,M_n$, 分段线性插值得 $S_i''(x)$.

由 $S_i(x)$ 及 $S_i'(x)$ 的连续 解得 $S_i(x)$

1101C-08 201412·2500

最小二乘拟合

误差平方和 $Q=\sum[\varphi(x_i)-y_i]^2$
本质是令各个 $\frac{\partial Q}{\partial a_j}=0$.

1. 矛盾方程组：$A\alpha=Y$ 的最小二乘解(即 $\|A\alpha-Y\|_2$ 最小) 满足 $\overset{\text{法方程}}{A^TA\alpha=A^TY}$. $\Rightarrow \|A\alpha-Y\|_2$ 最小 $\Leftrightarrow A^TA\alpha=A^TY$ 的 α.

☆ ⇒ 步骤：① 写出矛盾方程组 $A\alpha=Y$ 并化为矩阵

② 解法方程 $A^TA\alpha=A^TY$ 得 α.

2. 一般多项式拟合：本质是求解矛盾方程组.

☆ ① 直接拟合：1) 根据抽样点数确定 m，令 $\varphi(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$. $\Rightarrow$ $n+1$ 个待定系数，m 个拟合点

用于多项式形
(注意法方程中若 $a_i=0$ 则这一行为0)

2) 列出法方程 $\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i & \cdots & \sum_{i=1}^m x_i^n \\ \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 & \cdots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \sum_{i=1}^m x_i^n & \cdots & & \sum_{i=1}^m x_i^{2n} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_iy_i \\ \vdots \\ \sum x_i^ny_i \end{pmatrix}$，其中 $\sum=\sum_{i=1}^m$

3) 解出 $\alpha=(a_0,\cdots,a_n)^T$，则 $\varphi(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$.

首选☆ ② 解矛盾方程组：1) 根据抽样点数确定 m，令 $\varphi(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$.

例题2.8
用于其它形式

2) 写出矛盾方程组 $A\alpha=Y$ (即 $\varphi(x_i)=y_i$, $i=1,\cdots,m$)

3) 解法方程 $A^TA\alpha=A^TY$ 得 α.

3. 可化为多项式拟合：(关键是对数据预处理化为多项式形).

① 作形如 $\varphi(x)=a\cdot b^x$ 拟合：令 $\hat{\varphi}(x)=\ln\varphi(x)=\ln a+\ln b\cdot x$，$\hat{y}_i=\ln y_i$. 则对 $(x_i,\hat{y}_i)$ 作拟合 $\ln a+\ln b\cdot x_i=y_i$

② 作形如 $\varphi(x)=\frac{1}{a+bx}$ 拟合：令 $\hat{\varphi}(x)=\frac{1}{\varphi(x)}=a+bx$，$\hat{y}_i=\frac{1}{y_i}$，则对 $(x_i,\hat{y}_i)$ 作拟合 $\hat{\varphi}(x_i)=y_i$

③

4. 函数逼近步骤：① 确定 $\varphi(x)$ 形式及区间 $[x_1,x_2]$

② $Q=\int_{x_1}^{x_2}|\varphi(x)-f(x)|^2dx$

③ 令各个 $\frac{\partial Q}{\partial a_j}=0$ 解得 $\varphi(x)$.

1101C-08 201412·2500

Hermite插值

给定 $f(x_0)=y_0$, $f'(x_0)=m_0$, $f(x_1)=y_1$, $f'(x_1)=m_1$，构造Hermite插值多项式.

普通Hermite

解: ∵ $n=1$，有 $H_3(x)$ 三次多项式.

令 $H_3(x)=h_0(x)y_0+h_1(x)y_1+g_0(x)m_0+g_1(x)m_1$.

则 $\begin{cases} h_0(x_0)=1 \\ h_0(x_1)=0 \\ h_0'(x_0)=0 \\ h_0'(x_1)=0 \end{cases}$ $\begin{cases} h_1(x_0)=0 \\ h_1(x_1)=1 \\ h_1'(x_0)=0 \\ h_1'(x_1)=0 \end{cases}$ $\begin{cases} g_0(x_0)=0 \\ g_0(x_1)=0 \\ g_0'(x_0)=1 \\ g_0'(x_1)=0 \end{cases}$ $\begin{cases} g_1(x_0)=0 \\ g_1(x_1)=0 \\ g_1'(x_0)=0 \\ g_1'(x_1)=1 \end{cases}$

∵ $h_0(x_1)=h_0'(x_1)=0$，x_1是二重根.

设 $h_0(x)=(ax+b)(x-x_1)^2$.

则 $\begin{cases} h_0(x_0)=(ax_0+b)(x_0-x_1)^2=1 \\ h_0'(x_0)=a(x_0-x_1)^2+2(ax_0+b)(x_0-x_1)=0 \end{cases}$

解得 $\begin{cases} a=\dfrac{-2}{(x_0-x_1)^3} \\ b=\dfrac{3x_0-1}{(x_0-x_1)^3} \end{cases}$ $\Rightarrow h_0(x)=\left(1-2\dfrac{x-x_0}{x_0-x_1}\right)\left(\dfrac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2$

同理 $h_1(x)=\left(1-2\dfrac{x-x_1}{x_1-x_0}\right)\left(\dfrac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2$.

∵ $g_0(x_1)=g_0'(x_1)=0$，x_1是二重根，$g_0(x_0)=0$，x_0是根

令 $g_0(x)=a(x-x_0)(x-x_1)^2$. 则 $g_0'(x_0)=1$ 解得 $a=\dfrac{1}{(x_0-x_1)^2}$

∴ $g_0(x)=(x-x_0)\left(\dfrac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2$.

同理 $g_1(x)=(x-x_1)\left(\dfrac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2$.

∴ $H_3(x)=$

$R_3(x)=f(x)-H_3(x)=\dfrac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_0)^2(x-x_1)^2$.

Newton-Hermite.

解: 令 $x_0=z_0=z_1$

$x_1=z_2=z_3$.

则有下列差商表:

i	z_i				
0	x_0	$f[z_0]=y_0$			
1	x_0	$f[z_1]=y_0$	$f[z_0,z_1]=m_0$		
2	x_1	$f[z_2]=y_1$	$f[z_1,z_2]=\dfrac{y_1-y_0}{x_1-x_0}$	$f[z_0,z_1,z_2]=\dfrac{\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}-m_0}{x_1-x_0}$	
3	x_1	$f[z_3]=y_1$	$f[z_2,z_3]=m_1$	$f[z_1,z_2,z_3]=\dfrac{m_1-\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}}{x_1-x_0}$	$f[z_0,z_1,z_2,z_3]=\dfrac{f[z_1,z_2,z_3]-f[z_0,\dots]}{x_1-x_0}$

∴ $H_3(x)=f[z_0]+f[z_0,z_1](x-z_0)+f[z_0,z_1,z_2](x-z_0)(x-z_1)$

$+f[z_0,z_1,z_2,z_3](x-z_0)(x-z_1)(x-z_2)$.

数值积分：$I_n(f)=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i f(x_i)$

1、代数精度：$E(x^k)=I(x^k)-I_n(x^k)=0$，$E(x^{k+1})\neq 0 \Rightarrow k$阶.

$\Rightarrow$ n次（$n+1$个点）多项式至少有 n 阶精度

n个积分节点，最多$(2n-1)$阶精度.

2、插值型积分：① 一般步骤：1) 作Lagrange插值多项式 $L_n(x)$及$R_n(x)$.

2) 对$L_n(x)$及$R_n(x)$积分得$I_n(f)$和$E_n(f)$

② 代数精度：n次至少n阶.

$\Rightarrow$ Newton-Cotes积分：① 积分系数

取为n等分点的特例 $(x_0,\cdots,x_n)$

② 积分误差：1) n为奇数，$E_n(f)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_a^b (x-x_0)\cdots(x-x_n)\,dx$，$n$阶精度.

2) n为偶数，$E_n(f)=\frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_a^b x(x-x_0)\cdots(x-x_n)\,dx$，$(n+1)$阶精度.

$\Rightarrow$ 梯形积分：① 积分公式：$T_1(f)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$

一个区间

② 积分误差：$E_1(f)=-\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)^3=\int_a^b\frac{f''(\eta)}{2!}(x-a)(x-b)\,dx$，一阶精度.

$\Rightarrow$ Simpson积分：① 积分公式：$S_2(f)=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$

二等分

② 积分误差：$E_2(f)=\int_a^b\frac{f''(\xi)}{4!}x(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)\,dx=\frac{-f^{(4)}(\eta)}{2880}(b-a)^5$，三阶精度.

$\Rightarrow$ 复化积分：① 复化梯形：$T_n(f)=h\left[\frac{f(a)}{2}+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+\frac{f(b)}{2}\right]$，其中$h=\frac{b-a}{n}$.

在各个小区间上单独使用

$E_n(f)=-\sum_{i=0}^{n-1}\frac{f''(\xi_i)}{12}h^3=-\frac{nf''(\eta)}{12}h^3=-\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\eta)$ $\Rightarrow$ 求给定误差下的最小区间数

② 复化Simpson：$S_n(f)=\sum_{i=0}^{m-1}\frac{2h}{6}\left[f(x_{2i})+4f(x_{2i+1})+f(x_{2i+2})\right]$

$$\begin{array}{ccccccc} 1 & 4 & 1 & & & & \\ & & 1 & 4 & 1 & & \\ & & & & 1 & 4 & 1 \\ 1 & 4 & 2 & 4 & 2 & 4 & 1 \end{array}$$

$E_n(f)=\sum_{i=0}^{m-1}-\frac{f^{(4)}(\xi_i)}{2880}(2h)^5=-\frac{mf^{(4)}(\eta)}{2880}(2h)^5=-\frac{(b-a)^5}{180n^4}f^{(4)}(\eta)$.

③ Romberg积分：① 分段数 $n=2^{k-1}$，k是行标

② 计算 $R_{k,1}$，$k=1,\cdots$.

③ $R_{k,j}=R_{k,j-1}+\frac{R_{k,j-1}-R_{k-1,j-1}}{4^{j-1}-1}$

行				
1	R_{11}			
2	R_{21}	R_{22}		
3	R_{31}	R_{32}	R_{33}	
4	R_{41}	R_{42}	R_{43}	R_{44}

3. Gauss-Legendre积分：$I_n(f)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^{(n)}f(x_i^{(n)})$，其中$\{x_i^{(n)}\}$是n次Legendre多项式的n个零点，有2n-1阶精度.

数值微分：

1. 差商型微分：①向前差商：$f'(x_0)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$，一阶

$R(x)=O(h)$ ⇒对$f(x_0\pm h)$在x_0处展开至二阶.

②向后差商：$f'(x_0)=\frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}$

$R(x)=O(h)$ 展至三阶.

③中心差商：$f'(x)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$，$R(x)=O(h^2)$，

⇒最佳步长：①理论估计(中心)：$h=\sqrt[3]{\frac{3e}{M}}$，e是y_i绝对限

②事后估计：$|D(h,x)-D(\frac{h}{2},x)|<\varepsilon$ 所得那个h，其中$f'(x_0)\triangleq D(h,x)$是步长h的公式.

2. 插值型微分：

1101C-08 201412·2500

常微分方程数值解 $\begin{cases} y'(x)=f(x,y(x)) \\ y(a)=y_0 \end{cases}$ $a\le x\le b$

0. 一般步骤：①区间离散化；

②写出迭代方程，判断收敛、稳定、误差、

③代入初值条件迭代求 $y(x_i)\approx y_i$；

$\Rightarrow$ 即 $|f_y(x,y)|<L$ 对 $\forall y$.

解问存在唯一稳定解 $\Leftrightarrow$ $f(x,y)$ 对 y 有 Lipschitz 条件：$\exists L>0$，使 $|f(x,y)-f(x,\bar{y})|<L|y-\bar{y}|$ 对 $\forall y,\bar{y}$ 成立.

2. 基于数值微分的 Euler 公式（差商代替导数）

①向前 Euler（显式）：$y_{i+1}=y_i+hf(x_i,y_i)$，一阶方法

②向后 Euler（隐式）：$y_{i+1}=y_i+hf(x_{i+1},y_{i+1})$，一阶方法

1) 一般迭代

2) Picard 迭代 $\begin{cases} y_{i+1}^{(0)}=y_i+f(x_i,y_i) \\ y_{i+1}^{(k+1)}=y_i+f(x_i,y_{i+1}^{(k)}) \end{cases}$

3) 预估校正迭代 $\begin{cases} \bar{y}_{i+1}=y_i+f(x_i,y_i) \\ y_{i+1}=y_i+f(x_i,\bar{y}_{i+1}) \end{cases}$

③中心 Euler（多步）：$y_{i+1}=y_{i-1}+2hf(x_i,y_i)$，二阶方法，不稳定.

④Euler 公式的数值积分：$y_{n+1}=y_n+\int_{x_n}^{x_{n+1}}f(x,y)dx$

1) 左矩形：向前

2) 右矩形：向后

3) 梯形（隐式）：$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{2}[f(x_i,y_i)+f(x_{i+1},y_{i+1})]$

a). 一般迭代

b). Picard 迭代；

c) 预估校正迭代：

$\Rightarrow$ 改进 Euler：$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{2}\{f(x_i,y_i)+f[x_{i+1},y_i+hf(x_i,y_i)]\}$

中国科学技术大学

求解非线性方程的二分法：$f(a)\cdot f(b)<0$

求解非线性方程的不动点迭代法（$f(x)=0$）

1. 一般步骤：① 将 $f(x)=0$ 化为 $x=\varphi(x)$；

② 构造迭代格式 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$，并判断收敛性；

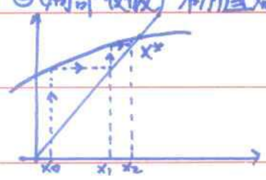
③ 代入 x_0 迭代直至 $|f(x)|<\varepsilon$.

一般收敛条件：①（区间收敛）若 $x\in[a,b]$ 时 $\varphi(x)\in[a,b]$，且 $\exists L<1$ 使 $\forall x\in[a,b]$ 有 $|\varphi'(x)|\le L<1$，

则 $\exists$ 唯一 $x^*\in[a,b]$ 使 $x^*=\varphi(x^*)$ 收敛对 $\forall$ 初值 x_0，且 $|x^*-x_k|\le\frac{L^k}{1-L}|x_1-x_0|$.

②（局部收敛）初值 x_0 取自 x^* 的充分小邻域，且该邻域内 $|\varphi'(x)|<1$.

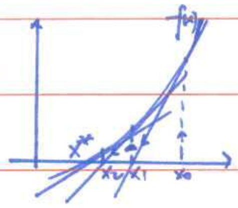
几何意义：



2. Newton 迭代（Taylor 展开取线性部分）

① 迭代格式：$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$（单根 $\varphi'(x^*)=0$）

④ 几何意义：



② 收敛条件：局部收敛条件，x_0 充分接近 x^*.

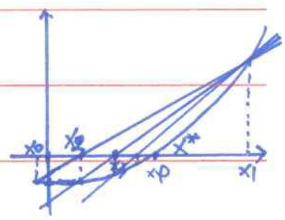
③ 收敛阶：1) 单根是二阶方法

2) 重根是一阶方法，但取迭代格式 $x_{k+1}=x_k-p\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ 则是二阶方法.

3. 弦截法（用差商代替 Newton 的 f'）.

① 迭代格式：$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f[x_k,x_{k-1}]}=x_k-\frac{f(x_k)(x_k-x_{k-1})}{f(x_k)-f(x_{k-1})}$.

④ 几何意义：



② 收敛条件：局部收敛条件，x_0 充分接近 x^*.

③ 收敛阶：不小于 $\frac{\sqrt{5}+1}{2}$（当且仅当是单根时取等）.

1101C-08 201412·2500

中国科学技术大学

4.非线性方程组的Newton迭代 $\begin{cases} f(x,y)=0 \\ g(x,y)=0 \end{cases}$

①迭代格式：$J=\begin{bmatrix} f'_x & f'_y \\ g'_x & g'_y \end{bmatrix}$

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

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

②收敛条件：局部收敛条件，在 X^* 附近 $\rho(X)<1$ 或 $\|J(X)\|_\infty<1$ 或 $\|\Delta X\|<\varepsilon$

$\Rightarrow$ 收敛阶：设 $e_k=|x_k-x^*|$，若 $\exists n\geq 1$ 及 $M>0$，使 $\lim\limits_{k\to\infty}\frac{e_{k+1}}{e_k^n}=M$，则是 n 阶收敛.

$\Rightarrow$ 确定 n：①定理法：若 $\varphi(x)$ 在 x^* 附近可导且 $\varphi'(x^*)=\cdots=\varphi^{(n-1)}(x^*)=0$，$\varphi^{(n)}(x^*)\neq 0$，则是 n 阶.

②展开法：对 $x_{k+1}-x^*=\varphi(x_k)-\varphi(x^*)$，将 $\varphi(x_k)$ 在 x^* 附近展开.

$\Rightarrow$ ①一般收敛阶：$x_{k+1}-x^*=\varphi(x_k)-\varphi(x^*)=\varphi(x^*)+\varphi'(x^*)(x_k-x^*)+\cdots+\frac{\varphi^{(n-1)}(x^*)}{(n-1)!}(x_k-x^*)^{n-1}+\frac{\varphi^{(n)}(x^*)}{n!}(x_k-x^*)^n+\cdots-\varphi(x^*)$

若 $\varphi'(x^*)=\cdots=\varphi^{(n-1)}(x^*)=0$，$\varphi^{(n)}(x^*)\neq 0$，则有

$$x_{k+1}-x^*=\frac{\varphi^{(n)}(x^*)}{n!}(x_k-x^*)^n+\frac{\varphi^{(n+1)}(x^*)}{(n+1)!}(x_k-x^*)^{n+1}+\cdots$$

$$\therefore\left|\frac{x_{k+1}-x^*}{(x_k-x^*)^n}\right|=\frac{\varphi^{(n)}(x^*)}{n!}+\frac{\varphi^{(n+1)}(x^*)}{(n+1)!}(x_k-x^*)+\cdots\xrightarrow{k\to\infty}\frac{\varphi^{(n)}(x^*)}{n!}$$，是 n 阶.

②单根Newton法是二阶，重根是一阶（若取 $\varphi(x)=x-\frac{mf(x)}{f'(x)}$ 则回到二阶）.

③单根弦截法是 $\frac{\sqrt5+1}{2}$ 阶，重根大于 $\frac{\sqrt5+1}{2}$.

$\Rightarrow$ ②阶推导：（单根）$x_{k+1}-x^*=\varphi(x_k)-\varphi(x^*)=\varphi(x^*)+\varphi'(x^*)(x_k-x^*)+\frac{\varphi''(x^*)}{2!}(x_k-x^*)^2+\cdots-\varphi(x^*)$

$\because\varphi(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}$ $\therefore\varphi'(x^*)=0$，$\varphi''(x^*)\neq 0$

$$\therefore x_{k+1}-x^*=\frac{\varphi''(x^*)}{2!}(x_k-x^*)^2+\frac{\varphi'''(x^*)}{3!}(x_k-x^*)^3+\cdots$$

$$\therefore\frac{x_{k+1}-x^*}{(x_k-x^*)^2}=\frac{\varphi''(x^*)}{2!}+\frac{\varphi'''(x^*)}{3!}(x_k-x^*)+\cdots\xrightarrow{k\to\infty}\frac{\varphi''(x^*)}{2!}$$

求解线性方程组的直接法（无系统误差，精度高）

1. 消元法：① Gauss 顺序消元法：化为上三角阵，$\frac{2}{3}n^3+O(n^2)$

② Gauss-Jordan 消元法：化为对角阵，$O(n^3)$，也用于求逆

③ 列主元 Gauss 消元法：每次消元前，选取该列按模最大的为对角元，$O(n^3)$

④ 全主元：选取该矩阵内按模最大，交换行列，$O(n^3)$

$= \begin{bmatrix} 1 & & \\ \vdots & \ddots & \\ \vdots & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & \cdots & \vdots \\ & \ddots & \vdots \\ & & u_{kk} \end{bmatrix}$

2. 分解法：① Doolittle 分解：$A=LU$，其中 L 为单位下三角阵，U 为一般上三角阵，$O(n^3)$

$AX=b$

$\Rightarrow L\underbrace{UX}_{Y}=b$

U 行 L 列

⇒ 步骤：1) 先算 U 第 k 行，再算 L 第 k 列，得 LU；

一般分解：$A=LU=\underline{LD}D^{-1}U=\tilde{L}\tilde{U}$，$D$ 不同则不同。

2) 算 $LY=b$，得 Y；

3) 算 $UX\triangleq Y$，得 X。

② Crout 分解：$A=LU=\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & \ddots & & \vdots \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix}$，$L$ 一般下三角，U 单位上三角，$O(n^3)$

~~L 列 U 行~~

L 列 U 行

相当于 A^T 的 Doolittle.

⇒ 步骤：1) 先算 L 第 k 列，再算 U 第 k 行，得 LU

2)

3)

③ 正定对称阵的 LDL^T 分解：基于 Doolittle 分解.

⇒ 步骤：1) 由 Doolittle 分解得 L, U，则 $A=LDL^T$，其中 D 是 U 对角阵.

2) 解 $\underbrace{LD\underbrace{L^TX}_{Y}}_{Z}=b$

三对角阵的追赶法：基于 Crout 分解，$O(5n)$

⇒ 步骤：1) $\begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ c_2 & a_2 & b_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & c_n & a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_1 & & & \\ c_2 & l_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & c_n & l_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & u_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & u_{n-1} \\ & & & 1 \end{bmatrix}$

2) 解 $L\underbrace{UX}_{Y}=b$

中国科学技术大学

求解线性方程组的迭代法 ($A\mathbf{x}=b$)

1. 一般步骤：① 将 $A\mathbf{x}=b$ 化为 $\mathbf{x}=M\mathbf{x}+g$；（M → 迭代矩阵）

② 构造迭代格式 $\mathbf{x}^{(k+1)}=M\mathbf{x}^{(k)}+g$，并判断收敛性；

③ 代入 $\mathbf{x}^{(0)}$ 迭代直至 $\|A\mathbf{x}-b\|<\varepsilon$ 或 $\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^{(k-1)}\|<\varepsilon$.

⇒ 一般收敛条件：①（充要）$\rho(M)<1$

②（充分）$\|M\|<1$

2. Jacobi 迭代

① 迭代格式：
$$\begin{cases} a_{11}x_1=-a_{12}x_2-a_{13}x_3-\cdots-a_{1n}x_n+b_1 \\ a_{22}x_2=-a_{21}x_1-a_{23}x_3-\cdots-a_{2n}x_n+b_2 \\ \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \\ a_{nn}x_n=-a_{n1}x_1-a_{n2}x_2-\cdots-a_{n,n-1}x_{n-1}+b_n \end{cases}$$
，再将 a_{ii} 除过去.

② 迭代矩阵：$M=I-D^{-1}A$ ⇒ $(A+D-D)\mathbf{x}=b$ ⇒ $D\mathbf{x}^{(k+1)}=(D-A)\mathbf{x}^{(k)}+b$

③ 收敛条件：1) 一般收敛条件 $\begin{cases}\rho(M)<1\\ \|M\|<1\end{cases}$

2) 若 A 为严格对角占优，则 Jacobi 迭代收敛.（行或列均可）.

3. Gauss-Seidel 迭代

① 迭代格式：
$$\begin{cases} a_{11}x_1^{(k+1)}=-a_{12}x_2^{(k)}-a_{13}x_3^{(k)}-\cdots-a_{1n}x_n^{(k)}+b_1 \\ a_{21}x_1^{(k+1)}+a_{22}x_2^{(k+1)}=-a_{23}x_3^{(k)}-\cdots-a_{2n}x_n^{(k)}+b_2 \\ \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \\ a_{n1}x_1^{(k+1)}+a_{n2}x_2^{(k+1)}+\cdots+a_{nn}x_n^{(k+1)}=b_n \end{cases}$$
，再将其它项移过去.

② 迭代矩阵：$M=-(D+L)^{-1}U$ ⇒ $(L+D+U)\mathbf{x}=b$ ⇒ $(L+D)\mathbf{x}^{(k+1)}=-U\mathbf{x}^{(k)}+b$

③ 收敛条件：1) 一般收敛条件 $\begin{cases}\rho(M)<1\\ \|M\|<1\end{cases}$

2) 若 A 为严格对角占优，则 G-S 迭代收敛（行或列均可）

若 A 对称，可尝试该判定 ⟸ 3) 若 A 为正定阵，则 G-S 迭代收敛.

判定（充要）：A 的顺序主子式均大于 0.

1101C-08 201412·2500

中国科学技术大学

4. 松弛迭代 ($X^{(k+1)}$ 是 $X^{(k)}$ 和 G-S 所得 $X^{(k+1)}$ 的平均)

① 迭代格式：$a_{11}x_1^{(k+1)}=(1-\omega)x_1^{(k)}+\omega(-a_{12}x_2^{(k)}-a_{13}x_3^{(k)}-\cdots-a_{1n}x_n^{(k)}+b_1)$

$a_{22}x_2^{(k+1)}=(1-\omega)x_2^{(k)}+\omega(-a_{21}x_1^{(k+1)}-a_{23}x_3^{(k)}-\cdots-a_{2n}x_n^{(k)}+b_2)$

$\vdots$

$a_{nn}x_n^{(k+1)}=(1-\omega)x_n^{(k)}+\omega(-a_{n1}x_1^{(k+1)}-a_{n2}x_2^{(k+1)}-\cdots-a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)}+b_n)$

② 迭代矩阵：$M=(D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D-\omega U]$

③ 收敛条件：1) 一般收敛条件 $\begin{cases}\rho(M)<1\\ \|M\|<1\end{cases}$

2) 若 A 为正定阵，且 $\omega\in(0,2)$，则 SOR 迭代收敛.

3) (必要) SOR 迭代收敛的必要条件是 $\omega\in(0,2)$.

⟹ 推导迭代矩阵：由 G-S 迭代 $X^{(k+1)}=-(D+L)^{-1}UX^{(k)}+(D+L)^{-1}b$

$\because (D+L)X^{(k+1)}=-UX^{(k)}+b$

$\therefore DX^{(k+1)}=-LX^{(k+1)}-UX^{(k)}+b$

先将 G-S 迭代的矩阵形式化作与迭代格式相同. ⟸ $\therefore X^{(k+1)}=-D^{-1}LX^{(k+1)}-D^{-1}UX^{(k)}+D^{-1}b$ 这是 G-S 迭代所得 $X^{(k+1)}$

$\therefore$ SOR 迭代 $X^{(k+1)}=(1-\omega)X^{(k)}+\omega X^{(k+1)}$

$\therefore X^{(k+1)}=(1-\omega)X^{(k)}-\omega D^{-1}LX^{(k+1)}-\omega D^{-1}UX^{(k)}+\omega D^{-1}b$

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

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

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

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

$\therefore M=(I+\omega D^{-1}L)^{-1}[(1-\omega)I-\omega D^{-1}U]$ ⟹ 证 3)

$=(D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D-\omega U]$ ⟹ 证 2)、3)

中国科学技术大学

计算矩阵特征值与特征向量

1.幂法：计算按模最大特征值 $X^{(k+1)}=AX^{(k)}$

①按模最大只有一个且是单根，则 $X^{(k+1)}=\lambda X^{(k)}$、

若 $\frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}}$ 趋于收敛，则第①种.

若 $\frac{x_i^{(k+2)}}{x_i^{(k)}}$ 对奇偶分别收敛，则第②种.

特征值 $\lambda_1=\frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}}$，$i=1,\cdots,n$ $\Rightarrow X^{(k+1)}=\lambda_1 X^{(k)}$

特征向量 $\vec{v}_1=X^{(k)}$

收敛速度 $|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}|$ 越小收敛越快.

②是互反的两个实根，则 $X^{(k+2)}=X^{(k)}$

特征值 $\lambda_1=-\lambda_2=\sqrt{\frac{x_i^{(k+2)}}{x_i^{(k)}}}$ $\Rightarrow X^{(k+2)}=\lambda_1^2 X^{(k)}$

特征向量 $\begin{cases}\vec{v}_1=X^{(k+1)}+\lambda_1 X^{(k)}\\ \vec{v}_2=X^{(k+1)}-\lambda_1 X^{(k)}\end{cases}$

规范幂法：$\begin{cases}Y^{(k)}=X^{(k)}/\|X^{(k)}\|_\infty\\ X^{(k+1)}=AY^{(k)}\end{cases}$

①若 $\{X^{(k)}\}$ 收敛，则只有一个且 $\lambda_1>0$

特征值 $\lambda_1=\|X^{(k+1)}\|_\infty$

特征向量 $\vec{v}_1=Y^{(k)}$

②若 $\{X^{(奇)}\}\{X^{(偶)}\}$ 收敛于互反向量，且只有一个且 $\lambda_1<0$

特征值 $\lambda_1=-\|X^{(k+1)}\|_\infty$

特征向量 $\vec{v}_1=Y^{(k)}$

③若 $\{X^{(奇)}\}\{X^{(偶)}\}$ 收敛于非互反的不同向量，则有一对互反的 λ_1、λ_2. 再做一次非规范运算

特征值 $\lambda_1=-\lambda_2=\sqrt{\frac{x_i^{(k+2)}}{y_i^{(k)}}}$

特征向量 $\begin{cases}\vec{v}_1=X^{(k+2)}+\lambda_1 X^{(k+1)}\\ \vec{v}_2=X^{(k+2)}-\lambda_1 X^{(k+1)}\end{cases}$

1101C-08 201412·2500

中国科学技术大学

2.反幂法：计算按模最小特征值，即求A^{-1}的按模最大.

$$\begin{cases} Y^{(k)} = X^{(k)}/\|X^{(k)}\|_\infty \\ X^{(k+1)} = A^{-1}Y^{(k)} \end{cases}.$$

以下步骤及分类与规范幂法相同.

解得A^{-1}按模最大为μ与$\vec{v}$，则A按模最小为$\lambda=\frac{1}{\mu}$与$\vec{v}$.

3.实对称阵的Jacobi方法：计算全部特征值.

关键是连续实施Givens正交相似变换使非对角元变小.

相似矩阵有相同特征值，而对称阵正交相似于对角阵！$Q^TAQ=diag(\lambda_1,\cdots,\lambda_n)$.

⟹步骤：①由非对角元按模最大元素a_{pq}选取p,q，则$s=\frac{a_{qq}-a_{pp}}{2a_{pq}}$.

②解方程$t^2+2st-1=0$，得$t=\begin{cases} \text{按模来看更小的根(可以是负根)}, & s\neq0 \\ 1, & s=0 \end{cases}$

③由$\begin{cases} \cos\theta=1/\sqrt{1+t^2} \\ \sin\theta=t/\sqrt{1+t^2} \end{cases}$，得Givens旋转矩阵

$$Q(p,q,\theta)=\begin{array}{c} \\ \\ \\ \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} & p & & q & \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \cos\theta & & \sin\theta & \\ & & 1 & & \\ & -\sin\theta & & \cos\theta & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \end{array}\begin{array}{c} \\ \\ p \\ \\ q \\ \\ \end{array}$$

④$A^{(k+1)}=Q_k^TA^{(k)}Q_k$，迭代至$\sum_{i\neq j}a_{ij}^2<\varepsilon$，则$a_{ii}$是特征值.

$Q\triangleq Q_1Q_2\cdots Q_k$的各列是对应的特征向量.

4.QR方法：

1101C-08 201412·2500