1 基础知识

1.1 二进制十进制转换

例如 $(53.7)_{10} = (110101.1\overline{0110})$，小数点左边倒序，小数点右边正序。

$$
\begin{array}{llll}
53 \div 2 = 26 \cdots 1 & 6 \div 2 = 3 \cdots 0 & 0.7 \times 2 = 0.4 + 1 & 0.6 \times 2 = 0.2 + 1 \\
26 \div 2 = 13 \cdots 0 & 3 \div 2 = 1 \cdots 1 & 0.4 \times 2 = 0.8 + 0 & 0.2 \times 2 = 0.4 + 0 \\
13 \div 2 = 6 \cdots 1 & 1 \div 2 = 0 \cdots 1 & 0.8 \times 2 = 0.6 + 1 & 0.4 \times 2 = 0.8 + 0
\end{array}
$$

1.2 浮点数、误差、加减法

标准化 IEEE 浮点数 $\pm 1.bbb \cdots b \times 2^p$，IEEE 最近舍入法则：对 53 位，如果为 0，则舍去，如果为 1，则进位。舍入误差的计算

精度	符号	指数	尾数
单精度	1	8	23
双精度	1	11	52
长双精度	1	15	64

$$
\begin{aligned}
\mathrm{fl}(8.3) &= 8.3 + [1 - (0.\overline{1001})_2] \times 2^{-52} \times 2^3 \\
&= 8.3 + 2^{-49} - (0.0\overline{1001})_2 \times 2 \times 2^{-49} \\
&= 8.3 + 2^{-49} - 0.3 \times 2 \times 2^{-49} \\
&= 8.3 + 0.4 \times 2^{-49}
\end{aligned}
$$

加减法时需要用 0 补齐到指数最大的数对应的位置。

$$
\begin{aligned}
(8.3)_{10} = (1000.0\overline{1001})_2 = 1.0000\overline{1001} \times 2^3 &= 1.\cdots 10011010 \quad \times 2^3 \\
(7.3)_{10} = (111.0\overline{1001})_2 = 1.110\overline{1001} \times 2^2 &= 1.\cdots 00110011 \quad \times 2^2 \\
\text{（向 52 位之后的位置补齐）}(8.3)_{10} - (7.3)_{10} &= 1.00001001 \cdots 10011010\mathbf{0} \times 2^3 \\
\text{（对齐，保留 52 位之后的数字）} &- 0.11101001 \cdots 100110011 \times 2^3 \\
\text{（52 位之后的数字也要进行计算）} &= 0.00100000 \cdots 000000001 \times 2^3 \\
\text{（移动到 0 位为 1，舍入到 52 位）} &= 1.00000000 \cdots 00000100 \quad \times 2^0
\end{aligned}
$$

2 解方程

2.1 二分法、误差

初始区间 $[a,b]$ 使 $f(a)f(b) < 0$，取中点 $c = (a+b)/2$ 若 $f(a)f(c) < 0$，下一迭代区间为 $[a,c]$，若 $f(c)f(b) < 0$，下一迭代区间为 $[c,b]$，输出近似解为 $x_a = (a+b)/2$（线性收敛）。近似解 x_a 的前向误差为 $|r - x_a|$，后向误差为 $|f(x_a)|$。

2.2 不动点迭代

不动点迭代将方程 $f(x) = 0$ 变换为 $g(x) = x$，满足条件可以达到线性收敛。

$$
x_{i+1} = g(x_i) \qquad \lim_{i\to\infty} \frac{e_{i+1}}{e_i} = S = |g'(r)| < 1 \qquad x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f(x_{i+1})}
$$

牛顿方法，可以达到二次收敛，出现 $m > 2$ 重根时变为线性收敛。

$$
\lim_{i\to\infty} \frac{e_{i+1}}{e_i^2} = \left| \frac{f''(r)}{2f'(r)} \right| \qquad \lim_{i\to\infty} \frac{e_{i+1}}{e_i} = \frac{m-1}{m} \qquad x_{i+1} = x_i - \frac{mf(x_i)}{f(x_{i+1})}
$$

如果 $0 = f(r) = f'(r) = \cdots = f^{(m-1)}(r)$，但是 $f^{(m)}(r) \neq 0$，则 r 为 m 重根，可用改进的牛顿方法，恢复二次收敛速度。

3 解方程组

3.1 高斯消元法、LU 分解

高斯消元的操作次数 $\frac{2}{3}n^3$，LU 分解的操作次数 $\frac{2}{3}n^3$，每次回代的操作数：n^2。

3.2 PA=LU 分解

部分主元：每一行根据第一列元素从大到小排序，避免湮灭问题。

$$
\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad P = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{2}{3} & 1 \end{bmatrix}
$$

$$
A = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \to ① \leftrightarrow ② \to \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \to ② - ① \times \frac{2}{3} \to \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 0 & \frac{5}{3} \end{bmatrix} = U
$$

$$
Lc = Pb \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{2}{3} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad Ux = c \Rightarrow \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 0 & \frac{5}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}
$$

3.3 迭代方法、误差

要求矩阵 A 为严格对角占优矩阵，$|a_{ii}| > \sum_{i\neq j} |a_{ij}|$，$D$ 表示 A 的主对角线矩阵，L 表示 A 的下三角矩阵，U 表示 A 的上三角矩阵。

雅可比方法，高斯-赛德尔方法

$$
x_{k+1} = D^{-1}(b - (L+U)x_k) \qquad x_{k+1} = D^{-1}(b - Ux_k - Lx_{k+1})
$$

连续过松弛 $\omega > 1$，$\omega = 1$ 时，退化为高斯-赛德尔方法

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

近似解 x_a 的余项为 $r = b - Ax_a$，前向误差为 $\|x - x_a\|$，后向误差为 $\|b - Ax_a\|_\infty$。

4 插值

4.1 拉格朗日插值

对 n 个数据点 $(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)$，有 $n-1$ 阶多项式

$$
L_k(x) = \frac{(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\cdots(x - x_n)}{(x_k - x_1)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n)}
$$

$$
P_{n-1}(x) = y_1 L_1(x) + \cdots + y_n L_n(x)
$$

$$
P_2(x) = y_1 \frac{(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} + y_2 \frac{(x - x_3)(x - x_1)}{(x_2 - x_3)(x_2 - x_1)} + y_3 \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)}
$$

4.2 牛顿商差

$$
\begin{array}{c|cccc}
x_1 & f[x_1] & & \\
 & & f[x_1\,x_2] & \\
x_2 & f[x_2] & & f[x_1\,x_2\,x_3] \\
 & & f[x_2\,x_3] & \\
x_3 & f[x_3] & &
\end{array}
$$

$$
\begin{aligned}
f[x_k] &= f(x_k) \\
f[x_k\,x_{k+1}] &= \frac{f[x_{k+1}] - f[x_k]}{x_{k+1} - x_k} \\
f[x_k\,x_{k+1}\,x_{k+2}] &= \frac{f[x_{k+1}\,x_{k+2}] - f[x_k\,x_{k+1}]}{x_{k+2} - x_k} \\
P_{n-1}(x) &= \sum_{i=1}^{n} f[x_1 \cdots x_i](x - x_1)\cdots(x - x_{i-1})
\end{aligned}
$$

4.3 切比雪夫插值

在区间 $[a,b]$ 内，切比雪夫插值节点，使以下不等式在 $[a,b]$ 内成立

$$
x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cos \frac{(2i-1)\pi}{2n} \qquad i = 1, 2, \cdots, n \qquad |(x - x_1)\cdots(x - x_n)| \leqslant \frac{\left(\frac{b-a}{2}\right)^n}{2^{n-1}}
$$

4.4 插值误差

插值误差公式，以及误差上界，其中 $x_{min} < c < x_{max}$，

$$
|f(x) - P(x)| = \frac{(x - x_1)\cdots(x - x_n)}{n!} f^{(n)}(c) \leqslant \frac{|(x - x_1)\cdots(x - x_n)|}{n!} \left|f^{(n)}(x_i)\right|_{max}
$$

5 最小二乘法

5.1 不一致方程组、误差

最小二乘解 $\bar{x}$ 的余项为 $r = b - A\bar{x}$，后向误差（二范数误差，欧式长度）为

$$
\|r\|_2 = \sqrt{r_1^2 + \cdots + r_m^2} \qquad \text{对于不一致系统} Ax = b \Rightarrow A^T A\bar{x} = A^T b
$$

平方误差，均方根误差，以及三者直接的关系分别为

$$
SE = r_1^2 + \cdots + r_m^2 \qquad RMSE = \sqrt{\frac{r_1^2 + \cdots + r_m^2}{m}} \qquad RMSE = \frac{\sqrt{SE}}{\sqrt{m}} = \frac{\|r\|_2}{\sqrt{m}}
$$

5.2 数据拟合

多项式（线性）模型，周期型数据，指数模型的线性化。

$$
\begin{array}{ll}
y = c_1 + c_2 t + c_3 t^2 + \cdots & y = c_1 + c_2 \cos 2\pi t + c_3 \sin 2\pi t \\
y = c_1 e^{c_2 t} \Rightarrow \ln y = \ln c_1 + c_2 t & y = c_1 t e^{c_2 t} \Rightarrow \ln y - \ln t = \ln c_1 + c_2 t
\end{array}
$$

5.3 QR 分解

使用格拉姆-斯密特正交找出 $A = (A_1|\cdots|A_n)$ 的消减 QR 分解

$$
y_j = A_j - q_1(q_1^T A_j) - q_2(q_2^T A_j) - \cdots - -q_{j-1}(q_{j-1}^T A_j) \qquad q_j = \frac{y_j}{\|y_j\|_2}
$$

$$
\begin{cases} r_{jj} = \|y_j\|_2 \\ r_{ij} = q_i^T A_j \end{cases} \qquad A = (q_1|\cdots|q_n) \begin{bmatrix} r_{11} & \cdots & r_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ & & r_{nn} \end{bmatrix} = QR
$$

对 $A=(A_1|\cdots|A_n)$ 补齐 $(m-n)$ 个向量 $[1,0,\cdots,0]^T$，计算 $q_{n+1},\cdots,q_{n+m}$，得到完全 QR 分解，并通过回代 $R\bar{x}=Q^Tb$，求解最小二乘问题（虚线以下部分直接扔掉）

$$A=(q_1|\cdots|q_m)\begin{bmatrix} r_{11} & \cdots & r_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ & & r_{nn} \\ \hdashline 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}=QR \qquad \begin{bmatrix} r_{11} & \cdots & r_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ & & r_{nn} \\ \hdashline 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}=Q^T\begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_n \\ \hdashline d_{n+1} \\ \vdots \\ d_m \end{bmatrix}$$

6 数值微分积分

6.1 数值微分

二点前向差分公式（一阶导一阶公式），三点中心差分公式（一阶导二阶公式）

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}-\frac{h}{2}f''(c) \qquad f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''(c)$$

二阶导数的三点中心差分公式（二阶导二阶公式），都可以由泰勒展开推导而来。

$$f''(x)=\frac{f(x-h)-2f(x)+f(x+h)}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(c)$$

$$f(x+h)=f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)+\frac{h^3}{3!}f'''(x)+\cdots+\frac{h^k}{k!}f^{(k)}(x)+\cdots$$

6.2 理查德外推

对 n 阶近似公式 $F_n(x)$ 外推，至少可以得到 $(n+1)$ 阶近似 Q 的公式

$$Q\approx\frac{2^nF(h/2)-F(h)}{2^n-1}$$

对三点中心差分公式的外推结果为 4 阶

6.3 数值积分、求积法则、精度

梯形法则，中点法则，辛普森法则，及其复合法则

$$\int_{x_0}^{x_1}f(x)\,\mathrm{d}x=\frac{h}{2}(y_0+y_1)-\frac{h^3}{12}f''(c) \qquad h=x_1-x_0$$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=\frac{h}{2}(y_0+y_m+2\sum_{i=1}^{m-1}y_i)-\frac{(b-a)h^2}{12}f''(c) \qquad h=\frac{b-a}{m}$$

$$\int_{x_0}^{x_1}f(x)\,\mathrm{d}x=hf(x_0+\frac{h}{2})+\frac{h^3}{24}f''(c) \qquad h=x_1-x_0$$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=h\sum_{i=0}^{m-1}f(x_i+\frac{h}{2})+\frac{(b-a)h^2}{24}f''(c) \qquad h=\frac{b-a}{m}$$

$$\int_{x_0}^{x_2}f(x)\,\mathrm{d}x=\frac{h}{3}(y_0+4y_1+y_2)-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(c) \qquad h=x_1-x_0=x_2-x_1$$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=\frac{h}{3}(y_0+y_{m2}+4\sum_{i=1}^{m}y_{2i-1}+2\sum_{i=1}^{m-1}y_{2i}) \qquad -\frac{(b-a)h^4}{180}f^{(4)}(c) \quad h=\frac{b-a}{2m}$$

对形如下的积分公式代入 $f(x)=1,x,x^2,\cdots x^n$，来确定 $w_0,w_1,\cdots,w_n$，使得其有最高精度 n，成为 n 阶积分法则。对积分法则 I，有积分误差公式。

$$\int_a^b f(x)\,dx=w_0f(x_0)+w_1f(x_1)+\cdots+w_nf(x_n)$$

$$\int_a^b f(x)\,dx-I=\left|\frac{f^{n+1}(c)}{(n+1)!}\int_a^b(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\,dx\right|$$

6.4 龙贝格积分

添加数据进行扩展，直到达到指定的精度，龙贝格积分是对复合梯形法则的外推。

$$h_j=\frac{b-a}{2^{j-1}} \qquad R_{11}=\frac{h_1}{2}(f(a)+f(b)) \qquad R_{j1}=\frac{1}{2}R_{j-1,1}+h_j\sum_{i=1}^{2^{j-2}}f(a+(2i-1)h_j)$$

$$\begin{matrix} R_{11} \\ R_{21} & R_{22} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \\ \vdots & & & \ddots \end{matrix} \qquad R_{jk}=\frac{4^{k-1}R_{j,k-1}-R_{j-1,k-1}}{4^{k-1}-1} \qquad R_{jj}\text{为定积分的}2j\text{阶近似}$$

$R_{j+1,1}$ 是对 R_{j1} 步长减半的结果（向下），$R_{j,k+1}$ 是对 R_{jk} 理查德外推结果（向右）。

6.5 高斯积分

对于积分区间不在 $[-1,1]$ 上的积分，利用换元归一化到 $[-1,1]$。

$$\int_{-1}^1 f(x)\,\mathrm{d}x\approx\sum_{i=1}^n c_if(x_i) \qquad \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=\int_{-1}^1 f\left(\frac{(b-a)t+b+a}{2}\right)\frac{b-a}{2}\,\mathrm{d}t$$

n 阶	根 x_i	系数 c_i
2	$-\sqrt{\frac{1}{3}}=-0.577350269189$ $\sqrt{\frac{1}{3}}=0.577350269189$	$1=1.000000000000$ $1=1.000000000000$
3	$-\sqrt{\frac{3}{5}}=-0.774596669241$ $0=0.000000000000$ $\sqrt{\frac{3}{5}}=0.774596669241$	$\frac{5}{9}=0.555555555556$ $\frac{8}{9}=0.888888888889$ $\frac{5}{9}=0.555555555556$
4	$-\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}}=-0.861136311594$ $-\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}}=-0.339981043585$ $\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}}=0.339981043585$ $\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}}=0.861136311594$	$\frac{90-5\sqrt{30}}{180}=0.347854845137$ $\frac{90+5\sqrt{30}}{180}=0.652145154863$ $\frac{90+5\sqrt{30}}{180}=0.652145154863$ $\frac{90-5\sqrt{30}}{180}=0.347854845137$

7 常微分方程

7.1 初值问题，方程组，高阶

欧拉方法，中点方法，显示梯形方法，k 阶泰勒方法，偏导展开

$$w_{i+1}=w_i+hf(t_i,w_i), \quad w_{i+1}=w_i+hf\left(t_i+\frac{h}{2},w_i+\frac{h}{2}f(t_i,w_i)\right)$$

$$w_{i+1}=w_i+\frac{h}{2}f(t_i,w_i)+\frac{h}{2}f\left(t_i+h,w_i+hf(t_i,w_i)\right)$$

$$w_{i+1}=w_i+hf(t_i,w_i)+\frac{h^2}{2}f'(t_i,w_i)+\cdots+\frac{h^k}{k!}f^{(k-1)}(t_i,w_i)$$

$$w_{i+1}=w_i+hf(t_i,w_i)+\frac{h^2}{2}\left[\frac{\partial f}{\partial t}(t_i,w_i)+\frac{\partial f}{\partial w}(t_i,w_i)f(t_i,w_i)\right]+\frac{h^3}{6}y'''(c)$$

二阶龙格库塔，第一种解为显示梯形方法，第二种解为中点方法

$$w_{i+1}=w_i+af(t_i,w_i)+bf\left(t_i+\alpha h,w_i+\beta f(t_i,w_i)\right)$$

$$w_{i+1}=w_i+(a+b)f(t_i,w_i)+b\left[\alpha h\frac{\partial f}{\partial t}(t_i,w_i)+\beta\frac{\partial f}{\partial w}(t_i,w_i)f(t_i,w_i)+O(h^2)\right]$$

$$\begin{cases} a+b=h \\ b\alpha h=b\beta=\frac{h^2}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a=b=\frac{h}{2} \\ \alpha=1,\beta=h \end{cases} \text{ or } \begin{cases} a=0,b=h \\ \alpha=\frac{1}{2},\beta=\frac{h}{2} \end{cases}$$

四阶龙格库塔 $\quad w_{i+1}=w_i+\frac{h}{6}(s_1+2s_2+2s_3+s_4) \qquad s_1=f(t_i,w_i)$

$$s_2=f\left(t_i+\frac{h}{2},w_i+\frac{h}{2}s_1\right) \qquad s_3=f\left(t_i+\frac{h}{2},w_i+\frac{h}{2}s_2\right) \qquad s_4=f\left(t_i+h,w_i+hs_3\right)$$

对于方程组 $y_1'=f_1(t,y_1,y_2,\cdots),y_2'=f_2(t,y_1,y_2,\cdots),\cdots$ 直接套用以上方法。

对于高阶 $y''=f(t,y,y')$ 变换为 $y_1=y,y_2=y$ 则有 $y_1'=y_2,y_2'=f(t,y_1,y_2)$。

7.2 利普希茨连续、唯一性

当存在利普希茨常熟 L 对 $S=[a,b]\times[\alpha,\beta]$ 中的每一对 $(t,y_1),(t,y_2)$ 都满足

$$|f(t,y_1)-f(t,y_2)|\leq L|y_1-y_2| \qquad L=\left|\frac{\partial f}{\partial y}(t,c)\right|_{max} \qquad \begin{cases} y'=f(t,y) \\ y(a)=y_0 \end{cases} \quad t\in[a,c]$$

则 $f(t,y)$ 相对于 y 在 S 上利普希茨连续，也可以使用求导的方法得到利普希茨常数。

满足以上条件，且 $\alpha<y_0<\beta$，则存在 $c\in(a,b)$ 使初值问题有唯一解。如果 $f(t,y)$ 相对于 y 在 $S=[a,b]\times(-\infty,\infty)$ 利普希茨连续，则在 $[a,b]$ 上存在唯一解。

满足以上条件，如果 $Y(t),Z(t)$ 是 $y'=f(t,y)$ 在 S 上的解，分别有初始值

$$Y(a),Z(a) \qquad \text{则} \qquad |Y(t)-Z(t)|\leqslant \mathrm{e}^{L(t-a)}|Y(a)-Z(a)|$$

7.3 边值问题，有限差分方法

利用差分公式替换微分方程中的导数，组装矩阵，估计初值，解方程组。

$$\begin{cases} y''=4y+t^2 \\ y(a)=y_a \\ y(b)=y_b \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y_a+(-4h^2-2)w_1+w_2+h^2t_1^2=0 & t_1=a+h\text{处} \\ w_{i-1}+(-4h^2-2)w_i+w_{i+1}+h^2t_i^2=0 & \text{非边界}t_i\text{处} \\ w_{n-1}+(-4h^2-2)w_n+y_b+h^2t_n^2=0 & t_n=b-h\text{处} \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} -4h^2-2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4h^2-2 & 1 & & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & & 1 & -4h^2-2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -4h^2-2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \vdots \\ w_{n-2} \\ w_{n-1} \\ w_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -h^2t_1^2-y_a \\ -h^2t_2^2 \\ -h^2t_3^2 \\ \vdots \\ -h^2t_{n-2}^2 \\ -h^2t_{n-1}^2 \\ -h^2t_n^2-y_b \end{bmatrix}$$

有限差分法 n 个区间，区间大小 $h=1/(n+1)$，并可以得到 n 个方程

$$y''=4y+t^2\Rightarrow\frac{w_{i-1}-2w_i+w_{i+1}}{h^2}=4w_i+t_i^2 \qquad w_0=y_a \qquad w_n=y_b$$