

1 基础知识

1.1 二进制十进制转换

例如 $(53.7)_{10} = (110101.10\overline{110})$

$53 \div 2 = 26 \cdots 1$

$26 \div 2 = 13 \cdots 0$

$13 \div 2 = 6 \cdots 1$

$6 \div 2 = 3 \cdots 0$

$3 \div 2 = 1 \cdots 1$

$1 \div 2 = 0 \cdots 1$

$0.7 \times 2 = 0.4 + 1$

$0.4 \times 2 = 0.8 + 0$

$0.8 \times 2 = 0.6 + 1$

$0.6 \times 2 = 0.2 + 1$

$0.2 \times 2 = 0.4 + 0$

$0.4 \times 2 = 0.8 + 0$

1.2 浮点数计算

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。

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

加减法时需要用 0 补齐到指数最大的数对应的位置。

$$(8.3)_{10} = (1000.0\overline{1001})_2 = 1.0000\overline{1001} \times 2^3 = 1. \cdots 110011010 \times 2^3$$
$$(7.3)_{10} = (111.0\overline{1001})_2 = 1.110\overline{1001} \times 2^2 = 1. \cdots 100110011 \times 2^2$$
$$(8.3)_{10} - (7.3)_{10} = 1.00001001 \cdots 10011010\textcolor{blue}{0} \times 2^3$$
$$\qquad \qquad \qquad - 0.11101001 \cdots 10011001\textcolor{red}{1} \times 2^3$$
$$= 0.00100000 \cdots 00000000\textcolor{red}{1} \times 2^3$$
$$= 1.00000000 \cdots 00000100 \times 2^0$$

2 解方程

2.1 二分法

初始区间 $[a, b]$ 使 $f(a)f(b) < 0$, 取中点 $c = (a+b)/2$, 计算 $f(c)$, 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 $x_a = (a + b)/2$ 。

2.2 不动点迭代

将方程 $f(x) = 0$ 变换为 $g(x) = x$, 可以达到线性收敛。

$x_{i+1} = g(x_i)$

$\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{e_{i+1}}{e_i} = S = |g'(r)| < 1$

牛顿法为特殊的不动点迭代方法, 可以达到二次收敛。

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_{i+1})}$$

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{e_{i+1}}{e_i^2} = \left| \frac{f''(r)}{2f'(r)} \right|$$

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{e_{i+1}}{e_i} = \frac{m-1}{m}$$

2.3 误差

近似解 x_a 的前向误差为 $|r - x_a|$, 后向误差为 $|f(x_a)|$ 。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。

3 解方程组

3.1 高斯消元法

高斯消元的操作次数: $\frac{2}{3}n^3$ 。

3.2 LU 分解

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

3.3 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。

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{2}{3} & 1 \end{bmatrix}$$

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

$$Lc = Pb \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{2}{3} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix}$$

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

3.4 迭代方法

要求矩阵 A 为严格对焦占优矩阵, $|a_{ii}| > \sum_{i \neq j} |a_{ij}|$, 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

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

高斯-赛德尔方法

$$x_{k+1} = D^{-1}(b - Ux_k - Lx_{k+1})$$

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

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

3.5 误差

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

x_1

x_2

x_3

$f[x_1]$

$f[x_2]$

$f[x_3]$

$f[x_1]$

$f[x_1 \ x_2]$

$f[x_1 \ x_2 \ x_3]$

$f[x_2]$

$f[x_2 \ x_3]$

$f[x_3]$

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

4.3 切比雪夫插值

在区间 $[a, b]$ 内, 切比雪夫插值节点

$$x_i = \frac{a + b}{2} + \frac{b - a}{2} \cos \frac{(2i - 1)\pi}{2n} \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

使以下不等式在 $[a, b]$ 内成立

$$|(x - x_i) \cdots (x - x_n)| \leq \left(\frac{b - a}{2} \right)^n$$

$$\qquad \qquad \qquad 2^{n-1}$$

4.4 插值误差

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

$$f(x) - P(x) = \frac{(x - x_1) \cdots (x - x_n)}{n!} f^{(n)}(c)$$

$$|f(x) - P(x)| \leq \frac{|(x - x_1) \cdots (x - x_n)|}{n!} |f^{(n)}(x)|_{max}$$

5 最小二乘法

5.1 不一致方程组

对于不一致系统 $Ax = b$ ，求解 $A^T A \bar{x} = A^T b$

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。

$$y = c_1 + c_2 t + c_3 t^2 + \cdots$$
$$y = c_1 e^{c_2 t} \Rightarrow \ln y = \ln c_1 + c_2 t$$

$$y = c_1 + c_2 \cos 2\pi t + c_3 \sin 2\pi t$$
$$y = c_1 t e^{c_2 t} \Rightarrow \ln y - \ln t = \ln c_1 + c_2 t$$

5.3 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

$$\|r\|_2 = \sqrt{r_1^2 + \cdots + r_m^2}$$

平方误差，均方根误差，以及三者直接的关系分别为

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

$$RMSE = \frac{\sqrt{SE}}{\sqrt{m}} = \frac{\|r\|_2}{\sqrt{m}}$$

5.4 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

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

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

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 $R\bar{x} = Q^T b$ ，求解最小二乘问题（虚线以下部分直接扔掉）

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

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）

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

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 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

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

6.3 数值积分

梯形法则与复合梯形法则

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

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

辛普森法则与复合辛普森法则

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x) dx = \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(c)$$
$$h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$$

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} (y_0 + y_m + 4 \sum_{i=1}^m y_{2i-1} + 2 \sum_{i=1}^{m-1} y_{2i}) - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(c)$$
$$h = \frac{b-a}{2m}$$

中点法则与复合中点法则

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

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

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。

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

$$R_{11}$$
$$R_{21}$$
$$\vdots$$

$$R_{22}$$
$$\ddots$$

$$R_{jk} = \frac{4^{k-1} R_{j,k-1} - R_{j-1,k-1}}{4^{k-1} - 1}$$
$$R_{jj}$$
即为定积分的 2^j 阶近似

6.5 高斯积分