数学实验

数值积分

插值型积分(数学知识)

n次插值多项式

最高幂n, n+1个参数, 需要取n+1个点 x_0,\ldots,x_n 来插值

对函数f以及取点 $\{(x_i,y_i)\}_0^n$,可以用n+1个多项式 l_k 来描述f:

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) l_k(x) = \sum y_k l_k(x) \ f(x) = L_n(x) + \mathop{\widehat{st}}
olimits R_n(x)$$

数值积分 I_n 就是每个多项式的积分之加 $\mathbf{V}(y_k)$ 和:

$$A_k = \int_S l_k(x) \mathrm{d}x, \ I_n = \sum_k A_k y_k = A_k f(x_k), \ I_f = I_n + \int_S R_n(x) \mathrm{d}x \equiv I_n + E_n$$

代数精度

设幂函数 $f(x) = x^k$,如果存在一个**最小的**k = m + 1使得 $I_n \neq I$,那么m就是 I_n 的代数精度 n + 1个节点的插值求积公式**至少**有n次代数精度。

n阶插值求积式有2n+1次代数精度 \iff 求积节点是[a,b]上的n+1次正交多项式的零点

Legendre多项式

$$l_n(x) = rac{1}{2^n n!} rac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} ig[(x^2 - 1)^n ig] \,, n \geq 1; \ l_0(x) = 1, l_1(x) = x$$

Gauss公式

先将区间变换到[-1,1], 然后按上面计算。

复合Gauss公式(Gauss-Lobatto)

由于-1和1是 $n \geq 2$ 的Legendre多项式的零点,所以如果把区间分成若干份,端点都是要取到的。一般阶数较小。

收敛性(*)

对积分I的某个数值积分 I_n ,

$$\lim_{n\to\infty}\frac{I-I_n}{h^p}=c\neq 0,$$

那么 I_n 是p阶收敛的。

插值求积公式汇总

实际应用当中我们一般用它们的复合形式或者自适应形式。

名字	形式	误差上界	复合收敛阶
梯形	$rac{b-a}{2}(f(a)+f(b))$	$rac{\left(b-a ight)^{3}}{12}\Vert f^{\prime\prime}\Vert_{ ext{max}}$	2
辛普森	$rac{b-a}{6}\Big(f(a)+4f\left(rac{a+b}{2} ight)+f(b)\Big)$	$rac{(b-a)^5}{2880} \ f^{(4)}\ _{ m max}$	4
高斯	$A_1 f(a) + \sum_{k=2}^{n-1} A_k f(x_k) + A_n f(b)$?	2n-2

ODE

ODE初值问题(数学知识)

常微分方程的一般形式:

$$\begin{cases} y' = f(x, y), \\ y(x_0) = a, \end{cases}$$

问在 $\{x_i\}_0^n$ 处,y的近似取值 $y_k \approx y(x_k)$ 。一般 $x_i = x_0 + ih$,步长为h。已知 $y_0 = a$ 。

单步法

常见的是Euler法。t0

$$y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, y_{n+1}; h),$$

其中 φ 称为增量函数;如果其跟 y_{n+1} 有关,则为隐式法;否则为显式法,可以直接计算。

误差

局部截断误差: 假设 $y_n = y(x_n)$, 讨论 y_{n+1} 的误差。

使用Taylor展开来进行分析:

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

利用局部截断假设,计算真实值(通常要Taylor展开)与估计值的差。**h的阶数最小的项叫做局部截断误 差主项**。

精度

如果局部截断误差的主项是 h^{p+1} 级的,那么称单步法具有p阶精度,是p阶方法。

Runge-Kutta

在每一步之内不止使用2个点。用待定参数法,将这些点处的导数(f)值求加权平均,构造出精度更高的计算式。

由于出现了f在中间点的取值,所以需要用二维泰勒展开来估计f:

$$f(x+A,y+B) = f(x,y) + Df(x,y) + \frac{1}{2}D^2 f(x,y)$$

 $+ \dots + \frac{1}{n!}D^n f(x,y) + O((A+B)^{n+1}),$
 $D = A\frac{\partial}{\partial x} + B\frac{\partial}{\partial y}$

一般形式如下:

$$\left\{egin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h \sum_i \lambda_i K_i, \ K_1 &= f(x_n, y_n), \ K_i &= f(x_n + c_i h, y_n + c_i h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j), \end{aligned}
ight.$$

要求 $\sum \lambda_i = 1$, $\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} = 1$,一共是 K_1 到 K_L ,叫做L阶R-K方法。

经典的龙格库塔方法是4级、4阶的。

方法汇总

名字	形式	精度
向前Euler	$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)$	1
向后Euler	$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$	1
梯形Euler	$y_{n+1} = y_n + rac{h}{2}(f(x_n,y_n) + f(x_{n+1},{ar y}_{n+1}))$	2
改进Euler	$egin{aligned} ar{y}_{n+1} &= y_n + h f(x_n, y_n), \ y_{n+1} &= y_n + rac{h}{2} (f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, ar{y}_{n+1})) \end{aligned}$	2
龙格库塔	见上	L

步长的选择请看下面稳定性。

线性方程组问题

数学知识

高斯消元和矩阵初等变换

高斯消元法等价于矩阵的LU分解。对于A,存在A=LU,L是一个下三角阵,U是一个上三角阵。有

$$Ax = LUx = b$$

因此事实上我们是先解

$$Ly = b$$

再解

$$Ux = y$$

对于对称正定矩阵, $A = LL^{T}$ 。

矩阵范数

常见的矩阵范数(以及矩阵范数的定义):

阶	值
1-范数	$\max_j \sum_i a_{ij} $
2-范数	$\sqrt{\lambda_{ ext{max}}(A^\intercal A)}$
p-范数 (范数的定义)	$\max_{\left\Vert x ight\Vert _{p}=1}\left\Vert Ax ight\Vert _{p}$
∞	$\max_i \sum_j a_{ij} $

由定义直接得到不等式: $||Ax|| \le ||A|| ||x||$

条件数和扰动误差

$$Cond(A) = \left\|A^{-1}\right\| \left\|A\right\|$$

误差:考虑b的扰动 δb , x有误差 δx , 则

$$A(x + \delta x) = b + \delta b,$$

 $A\delta x = \delta b.$

可以得到不等式

$$\frac{1}{cond(A)} \frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \le \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le cond(A) \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

其中前半段说明了x误差的下限,后半段说明了x误差的上限。条件数越大,x的误差可能会越大。

病态矩阵:条件数大(多大?)的矩阵

迭代法解稀疏矩阵

关键:构造矩阵B和向量f满足:对于解x,有

$$x = Bx + f$$

下面设A = D - L - U是A的自然分解,D, L, U分别是对角,下三角,上三角矩阵。另一种描述:

$$x = x + C(b - Ax)$$

当C接近 A^{-1} 时,收敛就快。

Jacobi和Gauss-Seidel

见表格。注意可以写成

• Jacobi: Dx(k+1) = Lx(k) + Ux(k) + b

• Gauss-Seidel: Dx(k+1) = Lx(k+1) + Ux(k) + b

或是把D除过去。

迭代的收敛条件

 $\rho(B) = \max |\lambda(B)| < 1$,也即谱半径小于1。注意**取模**。

充分条件:

• 对角线占优:同行对角线元素最大(取模),则收敛

• 对称正定: Gauss-Seidel收敛

• B的任何一种范数小于1: 收敛(注意谱半径自身小于等于所有的范数)

超松弛SOR迭代

用G-S

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

推广:

$$x(k+1) = \omega D^{-1}(Lx(k+1) + Ux(k) + b) + (1-\omega)x(k)$$

当 $\omega = 1$,是G-S;大于1为超松弛,小于1为低松弛。如果A对称正定,那么收敛 $\iff \omega \in (0,2)$ 。

方法汇总

名字	方法
Jacobi	$B=D^{-1}(L+U), \ f=D^{-1}b$
GS	$B=(D-L)^{-1}U, \ f=(D-L)^{-1}b$
SOR	$B = (D - \omega L)^{-1} (\omega U + (1 - \omega)D), \ f = (D - \omega L)^{-1} \omega b$

非线性方程

数学知识

重根

m重根=前m-1阶导数都为0,到m阶不为0

非线性方程

$$f(x) = 0$$

二分法: 需要单调性; 收敛慢

迭代方法

选择迭代函数

$$\varphi(x)$$

以满足在非线性方程的根处有 $\varphi(x)=x$,也即原方程的一个根是 φ 的不动点。因此有这样的迭代方程:

$$x_{k+1} = \varphi(x_k)$$

一般是把方程f(x) = 0改写成为 $x = \varphi(x)$ 的形式。

例如, 牛顿迭代法如下

$$x(k+1) = x(k) - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

其中 $\varphi(x) = x - f(x)/f'(x)$ 。直观感觉: 假设f是线性的, 那么这样就立马可以找到f的根。

局部收敛性

在迭代函数不动点的一个邻域处,如果 $\varphi'(x)$ 存在、连续且**小于1**,那么迭代法局部收敛。

判断的关键在于邻域内导数小于1. 或者不动点处导数小于1.

收敛阶

定义: 第k次的误差记为 $e_k = x_k - x^*$ 。如果对于 $p \ge 1, C \ne 0$,

$$\lim_{k o\infty}rac{\leftert e_{k+1}
ightert }{\leftert e_{k}
ightert ^{p}}=C,$$

就叫做p阶收敛。

收敛阶定理 (无名)

如果 $\varphi^{(p)}$ 在不动点的邻域连续且 $\varphi^{(k)}(x^*)=0$ 对于k< p成立(对k=p不成立),那么就是p阶收敛了。

1阶:需要导数小于1;2阶以上:不需要对应阶导数的范围限制。

技巧: 利用 $f(x^*) = 0$ 的性质来简化导数计算(也就是说遇到含有f(x)的部分,除了把f(x)求导以外,其他的就不用算了)。

例如, 牛顿迭代法

$$\varphi'(x) = f(x)f''(x)/f'^2(x)$$

很容易知道,如果x是单根,那么上式在不动点处为0;而(注意简化)

$$\varphi''(x) = f''(x)/f'^{2}(x) + f(x)[\cdot]$$

在 x^* 处不为0。于是牛顿迭代法是2阶的。

如果是重根,那么(可由L'Hospital法则)对 φ' 做连续延拓可得

$$\varphi'(x^*) = \frac{1}{2} < 1$$

因此是1阶收敛的。

计算误差,稳定性

稳定性

若一个算法在计算中的(计算)误差不增长,那么该算法是稳定的。

在一个单步(迭代)算法当中,**假设误差仅由此前的误差随算法传播而来**,设第n步的误差为 ε_n ,若满足

$$|\varepsilon_{n+1}| < |\varepsilon_n|,$$

则该单步算法是稳定的。

对于一个单步算法,一般考虑使用一个线性的试验方程。例如:

常微分方程: 考虑试验方程 $y' = -\lambda y$ ($\lambda > 0$)

方法	稳定性条件
向前Euler	$h \leq 2/\lambda$
向后Euler	恒稳
经典R-K	$h \leq 2.785/\lambda$

对于一个一般的方程, 需要近似化为上面的形式, 然后对步长进行估计。

刚性现象

一个微分方程的通解中通常存在快瞬态解和慢瞬态解,前者衰减快,后者衰减慢,两者特征根相差悬殊,即刚性现象。然而步长由快瞬态解决定,稳定时间由慢瞬态解决定,因此如果以恒定速度计算,将会很慢。

$$s = rac{\max_k |\mathfrak{Re}(\lambda_k)|}{\min_k |\mathfrak{Re}(\lambda_k)|}$$

如果s > 10,则称微分方程为刚性方程。

课程只要求了解该现象,不要求掌握解决方法。

Monte-Carlo

积和式

$$\mathrm{per} A = \sum_{\pi} \prod_{i} a_{i,\pi_i}$$

0-1矩阵的per计算

Godsil/Gutman估计子: 0的位置不变,1随机取1和-1。 $Z=det(B)^2$

KKLLL估计子: 0的位置不变,1随机取三个三次单位根中的一个。Z = det(B)det(B)

统计推断

参数估计

点估计、区间估计

math

note:
$$s^2=1/(n-1)\sum^n(x_i-ar{x})^2$$

name	imp	statistic
N(0,1)	$\sqrt{n}(ar{x}-\mu)/\sigma$	z
$\chi^2(n)$	$\sum^n x_i^2, x \sim N(0,1) \ (n-1)s^2/\sigma^2 \sim \chi^2(n-1)$	χ^2
$F(d_1,d_2)$	$rac{X/d_1}{Y/d_2},\ldots\sim\chi^2(d_1),(d_2)$	F
t(n-1)	$rac{\sqrt{n}(ar{x}-\mu)}{s}$	t

区间估计

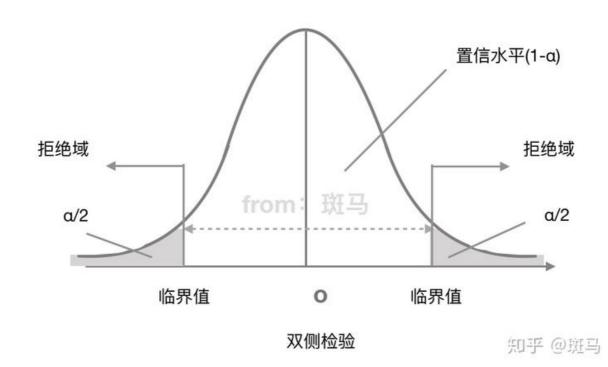
这里给出的是上分位数。

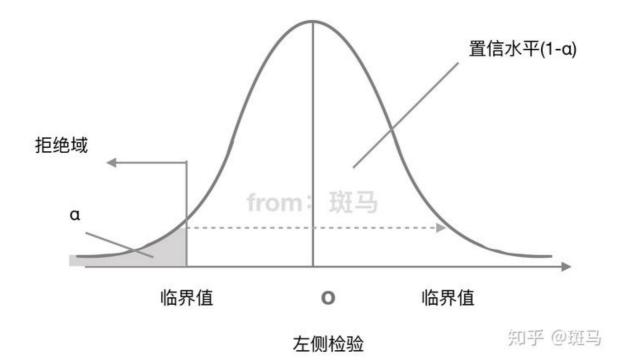
注意置信度1-alpha,代表真实值有alpha的概率落在区间外。置信度越低,alpha越高,区间就越小。

Situ	$interval(\mathrm{trust} = 1 - lpha)$
$\sigma = \sigma_0 \ \mu ?$	$ar{x}\pmrac{\sigma}{\sqrt{n}}z_{lpha/2}$
σ unknown μ ?	$ar{x}\pmrac{s}{\sqrt{n}}t_{lpha/2}$
μ unknown σ^2 ?	$\left(rac{(n-1)s^2}{\chi^2_{lpha/2}(n-1)},rac{(n-1)s^2}{\chi^2_{1-lpha/2}(n-1)} ight)$

假设检验

单/双侧。





下面表里给出的全部是双侧检验,且 $u_{1-\alpha/2}$ 等属于下分位数,需要注意。

	假	设检验	统计量	检验规则	MATLAB 命令
	单个总	$H_0: \mu = \mu_0$	$z = \frac{\overline{x} - \mu_0}{\sigma / \sqrt{n}} \sim N(0,1)$	$ z \le u_{1-\alpha/2}$	h=ztest(x,mu,sigma)
	体均值 (♂己	H_0 : $\mu < \mu_0$	σ/\sqrt{n}	接受 <i>H</i> ₀	[h,sig,ci,zval]=
	知)	$H_0: \mu > \mu_0$		(z 检验)	ztest(x,mu,sigma,
L	<i>/</i> \n/			(2 12 12)	alpha,tail)
	单个总	$H_0: \mu = \mu_0$	$\overline{x} - \mu_0$	$ t \le t_{1-\alpha/2}$	h=ttest(x,mu)
	体均值	$H_0: \mu < \mu_0$	$t = \frac{\overline{x} - \mu_0}{s / \sqrt{n}} \sim t(n - 1)$	14-7	
	(♂未	$H_0: \mu > \mu_0$	J. V	接	[h,sig,ci]=ttest(x,mu,alpha
L	知)	110 · μ > μ0		(t 检验)	,tail)
	単个总 体方差	$H_0: \sigma^2 = \sigma_0^2$ $H_1: \sigma^2 \neq \sigma_0^2$	$\chi^2 = \frac{(n-1)s^2}{\sigma_0^2} \sim$	$\chi_{\alpha/2}^2 \le \chi^2 \le \chi_{1-\alpha/2}^2$	无
	サガ左	$H_1: \sigma^2 \neq \sigma_0^2$	$\chi^2(n-1)$	接受 H ₀	

假	设检验	统计量	检验规则	MATLAB 命令
两个总 体均值 (σ ₁ ² ,σ ₂ ² 己知)	$H_0: \mu_1 = \mu_2$ $H_1: \mu_1 \neq \mu_2$	$z = \frac{\bar{x} - \bar{y}}{\sqrt{\frac{\sigma_1^2}{n_1} + \frac{\sigma_2^2}{n_2}}} \sim N(0,1)$	$ z \le u_{1-\alpha/2}$ 接受 H_0	无
两个总 体均值 (σ ₁ ² =σ ₂ ² 未知)	$H_0: \mu_1 = \mu_2$ $H_0: \mu_1 < \mu_2$ $H_0: \mu_1 > \mu_2$	$\sqrt{\frac{s^2}{n_1} + \frac{s^2}{n_2}}$	t ≤t _{1-α/2} 接受 H ₀	h=ttest2(x,y) [h,sig,ci]=ttest2 (x,y,alpha,tail)
两个总 体方差	$H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2$ $H_1: \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$	$F = \frac{s_1^2}{s_2^2} \sim F(n_1 - 1,$ $n_2 - 1), s_1^2 \ge s_2^2$	$F \le F_{1-\alpha/2}$ 接受 H_0	无

p值与一般的统计量检验

ppf 或 inv:可以求下分位数。

cdf: 其反函数, 也即cumulative。

p值: 比观测结果更加极端的数据出现的概率。

若求出了检验统计量t,那么ar=1-pdf(t)就是出现在观测点右端的概率,al=pdf(t)是出现在观测点左端的概率。

对于双侧检验,取 al和 ar之更小者,并乘2,就是p值。

对于单侧检验,取对应的单边概率,就是p值。

如果求出了p值,就清楚地知道:对于所有置信度 $1-\alpha$ 的假设, $\alpha < p$,假设都是成立的。

13. 回归分析

回归模型(数学知识)

线性回归模型:假设因变量y与若干自变量 $\{x_i\}_1^n$ 之间有关系

$$y=eta_0+\sum_{i=1}^neta_ix_i+arepsilon$$

其中, ε 是一个独立于其他变量的随机变量,称为随机误差,满足 $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$ 。

一维线性回归模型的性质

1. 独立性(对于多个样本 (x_i, y_i) , x_i 互相独立, y_i 也互相独立)

2. 线性性: 期望是线性的

3. 齐次性:对不同的x,y方差为常数 4. 正态性:对相同的x,y服从正态分布

方差估计

当根据一些样本数据, 拟合出方程

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$$

平方和公式

总偏差平方和=回归平方和+残差平方和

$$\sum_{i} (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i} (\hat{y}_i - \bar{y})^2 + \sum_{i} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

决定系数

$$R^2 = U/S$$

参数分布

$$\Rightarrow s_{xx} = \sum (x_i - \bar{x})^2.$$

$$egin{align} \hat{eta}_1 &\sim N\left(eta_1, rac{\sigma^2}{s_{xx}}
ight), \ \hat{eta}_0 &\sim N\left(eta_0, \sigma^2\left(rac{1}{n} + rac{ar{x}^2}{s_{xx}}
ight)
ight)
onumber \end{aligned}$$

由此可得

$$Q/\sigma^2 \sim \chi^2(n-2).$$

令剩余方差

$$s^2 = \frac{Q}{n-2}$$

作为方差的估计值。

显著性检验、t检验和区间估计

显著性检验:检验参数是否为0。因为如果为0,模型就失去意义了。

当 $H_0: \beta_1 = 0$ 时,

$$U/\sigma^2 \sim \chi^2(1),$$

F检验

$$F=rac{U}{Q/(n-2)}\sim F(1,n-2)$$

t检验

令

$$egin{align} S^2_{eta_0} &= \left(rac{1}{n} + rac{ar{x}^2}{s_{xx}}
ight)rac{Q}{n-2}, \ S^2_{eta_1} &= rac{Q}{(n-2)s_{xx}}, \ \end{aligned}$$

则当 $H_0: \beta_0 = 0$,

$${\hat eta}_0/S_{eta_0} \sim t(n-2)$$

 $\stackrel{\text{dis}}{=} H_0: \beta_1 = 0,$

$$\hat{eta}_1/S_{eta_1} \sim t(n-2)$$

一般地: 令

$$t = rac{\hat{eta}_1 \sqrt{s_{xx}}}{s} \sim t(n-2)$$

若上述关于 β_1 的检验的p值小于一定的数(例如0.05),就认为模型显著。

区间估计

$$egin{aligned} eta_0 : [\hat{eta}_0 - t_{1-lpha/2}(n-2)S_{eta_0}, \hat{eta}_0 + t_{1-lpha/2}(n-2)S_{eta_0}] \ eta_1 : [\hat{eta}_1 - t_{1-lpha/2}(n-2)S_{eta_1}, \hat{eta}_1 + t_{1-lpha/2}(n-2)S_{eta_1}] \end{aligned}$$

预测

若对于 x_0 求得预测值 \hat{y}_0 ,那么

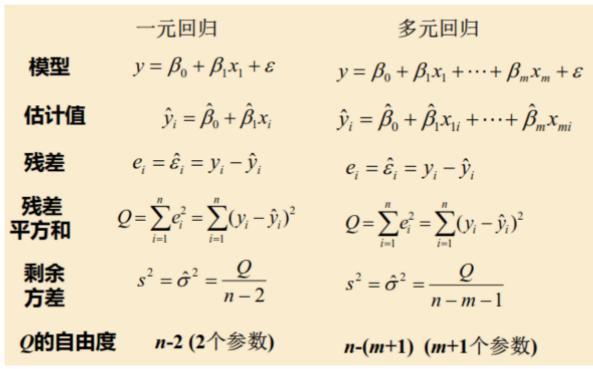
$$T = rac{y_0 - \hat{y_0}}{\sqrt{rac{Q}{n-2}}\sqrt{rac{(x_0 - ar{x})^2}{s_{xx}} + rac{1}{n} + 1}} \sim t(n-2)$$

$$\left[\hat{y_0} - t_{1-\alpha/2}(n-2)s\sqrt{\frac{(x_0-\bar{x})^2}{s_{xx}} + \frac{1}{n} + 1}, \hat{y_0} + t_{1-\alpha/2}(n-2)s\sqrt{\frac{(x_0-\bar{x})^2}{s_{xx}} + \frac{1}{n} + 1}\right]$$

当接近 \bar{x} 且n大时,可以近似:

$$\left[\hat{y_0}-u_{1-lpha/2}s,\hat{y_0}+u_{1-lpha/2}s
ight]$$

总结



一元回归 多元回归 第元回归 第元回归 第元回归 第三世 +
$$Q$$
 次定系数 $R^2 = U/S$ $R^2 = U/S$ $H_0: \beta_1 = 0, \quad H_1: \beta_1 \neq 0$ $H_0^{(j)}: \beta_j = 0, \quad H_1^{(j)}: \beta_j \neq 0$ $H_0 \oplus \Sigma U/\sigma^2 \sim \chi^2(1), \quad Q/\sigma^2 \sim \chi^2(n-2), \quad U/\sigma^2 \sim \chi^2(m), \quad Q/\sigma^2 \sim \chi^2(n-m-1)$ $F = \frac{U}{Q/(n-2)} \sim F(1,n-2)$ $F = \frac{U/m}{Q/(n-m-1)} \sim F(m,n-m-1)$ 检验 $F > F_{1-\alpha}(1,n-2)$ $F > F_{1-\alpha}(m,n-m-1)$

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \dots + \hat{\beta}_m x_m$$

性质: \hat{y}_0 无偏, 且 $E(\hat{y}_0 - y_0)^2$ 最小

预测区间
$$[\hat{y} - \delta(x), \hat{y} + \delta(x)]$$

$$\delta(x) = t_{1-\alpha/2}(n-m-1) \cdot s \sqrt{(x-\bar{x})^T (\tilde{X}^T \tilde{X})^{-1} (x-\bar{x}) + \frac{1}{n} + 1} \approx u_{1-\alpha/2} s$$

与一元回归对比
$$\delta(x) = t_{1-\alpha/2}(n-2) \cdot s \sqrt{\frac{(x-\overline{x})^2}{s_{xx}} + \frac{1}{n} + 1} \approx u_{1-\alpha/2}s$$

交互作用

利用残差分析, 也即考察 $y - \hat{y}$ 是否为 $N(0, \sigma^2)$

对照表

sm.OLS(y,x).fit()具有如下功能。

量/功能	Statsmodel	说明
s^2	mse_resid	summary2 里的scale; 注意开根号
N	nobs	number of observation
df	df_resid	=N-M-1
Q	sum(resid**2)	s^2 =Q/df
eta_i	params	coef in summary
F 和 $P_{>F}$	fvalue, f_pvalue	summary有
t和 P	tvalues	看summary
β的置信区间	根据t自己算 见代码analyze	summary(alpha)
s_xx或c_jj	normalized_cov_params	对角元素
预测	predict([x0,x1,])	x0 需为1
预测区间	自己算 见代码predict	