《工程硕士数学》期末复习

第二章 解线性方程组的直接解法

1. Gauss（顺序）消去法

消去（$O(n^3)$）：将$Ax=b$通过初等行变换化简为$Ux=b$。

- 从第二行开始，给每行乘以一个不同的系数l，使得每行第一位都等于第一行第一位的相反数；
- 从第二行开始，给每行加上第一行，使得每行第一位都等于0；
- 从第三行开始，给每行乘以一个不同的系数l，使得每行第二位都等于第二行第二位的相反数；
- 从第三行开始，给每行加上第二行，使得每行第二位都等于0；
- ......
- 最后得到上三角阵U。

回代（$O(n^2)$）：从最后一行开始逐行解$Ux=b$。

2. Gauss列主元消去法

若消去到第$k-1$步（$k\geq 1$），此时第k行及以下部分的第k位待消去，则挑选所有这些数中绝对值最大的，把它所在行换到第k行，再消去。

$$
\left[\begin{array}{cccccc:c}
a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\
 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(1)} \\
 & & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & & \boxed{a_{kk}^{(k)}} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\
 & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)}
\end{array}\right].
$$

示例：

例 2.2.4 用列主元法解方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，计算过程取五位数字，其中

$$
[\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b}]=\left[\begin{array}{ccc:c}
-0.002 & 2 & 2 & 0.4 \\
1 & 0.78125 & 0 & 1.3816 \\
3.996 & 5.5625 & 4 & 7.4178
\end{array}\right].
$$

这一题就需要先把3.996所在行换到第一行，再进行第一次消去。

3. 顺序主子式

- 顺序主子式：对$n \times n$的方阵，求其左上角1×1、2×2、……、$n \times n$这n个部分的行列式，这个过程称为求顺序主子式Δ_1、Δ_2、…、Δ_n。
- Gauss消去法的可行性：当顺序主子式任何一项都不为零时，方阵A可以使用上述的Gauss消去。

4. LU分解

- Doolittle分解（LU分解）：通过Gauss消去法得到U以后，一定能找到下三角阵L，使$A = LU$。
  - L的对角元素显然全为1。
- Crout分解：对换Doolittle分解中L的对角元素和U的对角元素，使得U的对角元素全为1。
- LDU分解：提取Doolittle分解中U的对角元素，形成对角矩阵D，使得U变成对角元素全为1的上三角阵$\widetilde{U}$，而此时A可以分解为$A = LD\widetilde{U}$。
- 单位上（下）三角阵：对角元素全为1的上（下）三角阵。
- Doolittle分解的存在唯一性：存在唯一Doolittle分解的条件为方阵$A_{n \times n}$的顺序主子式Δ_1到Δ_{n-1}都不为零。
  - 显然，如果Doolittle分解存在且唯一，则Crout、LDU分解也都存在且唯一。

5. 三对角矩阵

- 三对角矩阵：三对角矩阵是形如下图的方阵。

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix}$$

- 三对角矩阵LU分解的形状：三对角矩阵的LU分解一定形如下图。

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{bmatrix}, \qquad U = \begin{bmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ & u_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & & c_{n-1} \\ & & & & u_n \end{bmatrix}$$

- 追赶法：
  - 先进行LU分解，使得$LUx = b$。
  - 计算$Ly = b$，此时有$y = Ux$。
  - 计算$Ux = y$，求出x。

6. 正定矩阵的Cholesky分解

- 正定矩阵：顺序主子式全部大于0的实对称方阵。
- Cholesky分解：对正定对称阵作LU分解，必有$U = L^T$、$A = LL^T$。这种分解称为Cholesky分解。
- 平方根法（Cholesky法）：
  - 先进行Cholesky分解，使得$LL^Tx = b$。
  - 计算$Ly = b$，此时有$y = L^Tx$。
  - 计算$L^Tx = y$，求出x。

7. 范数

- 向量范数：
  - 1-范数：向量所有元素的和。
  - 2-范数：向量模长。
  - 无穷范数（$\infty-$范数）：向量所有元素的绝对值的最大值。
- 谱半径： 方阵A的谱半径为其所有特征值的绝对值的最大值，记为$\rho(A)$。
  - 回忆：特征多项式为$\lambda I - A$的行列式计算结果，特征值为特征多项式的根。
- 矩阵范数：
  - 1-范数（列范数）：对所有元素取绝对值，再对每列进行求和。取最大的和为1-范数。
  - 2-范数：$\sqrt{\rho(A^TA)}$。
    - 当A为对称矩阵时，有$\sqrt{\rho(A^TA)} == \sqrt{\rho(A^2)} = \rho(A)$。
  - 无穷范数（$\infty-$范数、行范数）：对所有元素取绝对值，再对每行进行求和。取最大的和为无穷范数。

8. 条件数与病态

- 条件数：$Cond(A)_n = ||A||_n||A^{-1}||_n$，其中$||A||$表示矩阵范数，$||A||_1$为1-范数，$||A||_2$为2-范数，……。
  - 回忆：
    - 矩阵元素的代数余子式为$B_{ij} = (-1)^{i+j}A_{ij}$。
    - 矩阵所有元素取代数余子式会得到伴随矩阵A^*，而$A^{-1} = \frac{1}{|A|}A^*$。
- 病态：对病态矩阵A的任意元素进行扰动（加减一个微小量），都会导致$Ax = b$求解结果的巨大变化。
- 病态矩阵的判别：当A的任意一种条件数的数量级远大于A的数量级时，A就是病态的。
- 比较可能出现病态的矩阵：
  - 各元素数量级差别很大的矩阵；
  - 进行列主元消去或LU分解时，发现主元也很小的矩阵；
  - 行列式很小的矩阵。

第三章 解线性方程组的迭代法

1. Jacobi、Gauss-Seidel法与SOR法

当矩阵A满足下图所示形式时：

$$A=(a_{ij})_{n\times n}\in R^{n\times n}$$
$$A=D-L-U;D=diag[a_{11},a_{22},\dots,a_{nn}]$$

$$L=\begin{bmatrix}0 & & & & \\ -a_{21} & 0 & & & \\ -a_{31} & -a_{32} & 0 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & & -a_{n,n-1} & 0\end{bmatrix}\qquad U=\begin{bmatrix}0 & -a_{12} & -a_{13} & & -a_{1n} \\ & 0 & -a_{23} & & -a_{2n} \\ & & 0 & & \\ & & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & & 0\end{bmatrix}$$

- Jacobi法：$\begin{cases}B=D^{-1}(L+U)\\x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+D^{-1}b\end{cases}$；
- Gauss-Seidel法：$\begin{cases}B=(D-L)^{-1}U\\x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+(D-L)^{-1}b\end{cases}$；
- SOR法：$\begin{cases}B=L_\omega=(D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D+\omega U]\\x^{(k+1)}=L_\omega x^{(k)}+\omega(D-\omega L)^{-1}b\end{cases}$，式中$\omega$为自主选择的松弛因子。
- 迭代矩阵：以上三式中的B称为迭代矩阵。

2. 迭代法的收敛

- 迭代法的收敛性判定：
  - 对任何迭代法，若迭代矩阵B满足$\rho(B)<1$，则迭代法收敛。
  - 若A严格对角占优，则无论用Jacobi法还是Gauss-Seidel法求解$Ax=b$，均收敛。
    - 回忆：若每行的对角元素绝对值均大于其他元素绝对值之和，则这样的矩阵为严格对角占优矩阵。
    - 因此，若$Ax=b$无法直接用迭代法求解，可以先进行行交换，使A为严格对角占优矩阵，再求解。
  - 对任何对称正定矩阵A，Gauss-Seidel法收敛。
  - 对任何对称正定矩阵A，若将非对角元素全部取相反数，新矩阵仍然对称正定，则Jacobi法收敛。
  - 对任何$\omega\in(0,2)$，有SOR法收敛。
    - 特别的，$\omega<1$称为低松弛，$\omega>1$为高松弛，$\omega=1$时SOR法退化回Gauss-Seidel法。
- 迭代法的渐进收敛速度：$R(B)=-\ln\rho(B)>0$。$\rho(B)$越小，迭代法收敛越快。
  - 最佳松弛因子：对三对角对称正定矩阵，SOR法有最佳松弛因子$\begin{cases}B_J=D^{-1}(L+U)\\\omega_b=\frac{2}{1+\sqrt{1-\rho^2(B_J)}}\end{cases}$。
    - 此时有$\rho(L_{\omega_b})=\omega_b-1$。
    - 当$\omega\approx\omega_b$时，SOR法远快于Jacobi法。

3. 共轭梯度法

- 最速下降法：$\begin{cases} r^{(k)} = b - Ax^{(k)} \\ \alpha_k = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ar^{(k)}, r^{(k)})} \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k r^{(k)} \end{cases}$。
- 共轭梯度法（CG法）：$\begin{cases} \alpha_k = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})} \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)} \\ r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)} \\ \beta_k = \frac{(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{(r^{(k)}, r^{(k)})} \\ p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)} \end{cases}$，初值可取$\begin{cases} r^{(0)} = b - Ax^{(0)} \\ p^{(0)} = r^{(0)} \end{cases}$。
  - CG法显著快于最速下降法和J法，一般也显著快于SOR法。
  - CG法能保证对$A_{n\times n}$最多只需n步就求出精确解。

第四章 非线性方程的数值解法

1. 不动点迭代法

- 把方程化为$x = f(x)$的形式，若当$\lim_{k\to+\infty} x_k = x^*$，则$x^* = f(x^*)$，则此时不动点迭代法收敛。
- 不动点迭代法的整体收敛性：
  - 映内性：若$\forall x \in [a, b]$有$f(x) \in [a, b]$，则$[a, b]$中一定存在$f(x)$的不动点。
  - 压缩性：在映内性满足的情况下，若$\exists L \in (0, 1)$使得$|f(x) - f(y)| \le L|x - y|$对任意$x, y$成立，则映内性所说的不动点是唯一的，因此$f(x)$确认能收敛到这个不动点。
  - 推论：在映内性满足的情况下，若$\exists L \in (0, 1)$使得$|f'(x)| \le L$对任意$x \in [a, b]$成立，则$f(x)$也必然存在唯一的不动点，从而收敛到这一不动点。
    - 显然，一般使用推论证明整体收敛性，不用压缩性证明。（参考第九章第1节“Lipschitz条件”）
- 不动点迭代法的局部收敛性：
  - 局部收敛：若已有有x^*，且确认$f'(x)$在x^*附近的邻域内连续，满足$|f'(x^*)| < 1$，则不动点迭代法是局部收敛的。
  - 阶：给定式子$\lim_{k\to+\infty} \frac{f^{(p)}(x^*)}{p!} \ne 0$，满足该式的最小正整数$p$称为局部收敛阶数。
    - 显然，计算阶数时可以忽略$p!$，直接求f在x^*处的导数、二阶导数……直到不等于0为止。

2. 不动点迭代法的加速方法

- Aitken加速法：从迭代的第三项x_{k+2}起进行修正：$x_i = \frac{x_i x_{i-2} - x_{i-1}^2}{x_i + x_{i-2} - 2x_{i-1}}$。

- Steffensen加速法：对于不动点迭代法$x=\varphi(x)$，Steffensen加速法为：$\begin{cases} m=\varphi(x_k) \\ n=\varphi(m) \\ x_{k+1}=x_k-\frac{(m-n)^2}{n-2m+x_k} \end{cases}$。
  - Steffensen加速法至少能加速到二阶。
  - Steffensen加速法有时能将不收敛的不动点迭代法加速为收敛。

3. Newton迭代法

- （带导数的）Newton迭代法：$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$。
  - 若要求的根为重根，则Newton迭代法是线性的。否则，Newton迭代法是至少二阶的。
- 不带导数的Newton迭代法（割线法）：$x_{n+1}=x_n-f(x_n)\frac{(x_n-x_{n-1})}{f(x_n)-f(x_{n-1})}$。这个方法需要两个初值。
- 改进的Newton迭代法：$x_{n+1}=x_n-m\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$，式中$m$需要按照原方程情况进行指定。

第九章 常微分方程数值解法

> 本章讨论的常微分方程均形如$\begin{cases} y'=f(x,y) \\ y_0=\alpha \end{cases}$，迭代步长一律为$h$，即$x_k=x_0+kh$。

1. Lipschitz条件

- Lipschitz条件：若存在常数L使任意y_1、y_2满足$|f(y_1)-f(y_2)|\le L(y_1-y_2)$，则$f$满足Lipschitz条件。
- 加强的判别条件：$\forall(x,y)$满足$|\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)|\le L$的函数$f(x,y)$一定对$y$满足Lipschitz条件。
  - 这个条件是充分不必要条件，反推不一定成立。

2. 一阶单步方法

- Euler法
  - 显式Euler法：$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n) \\ y_0=\alpha \end{cases}$；
  - 隐式Euler法：$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+hf(x_{n+1},y_{n+1}) \\ y_0=\alpha \end{cases}$；这个方法在给定$y_n$时并不能直接求解$y_{n+1}$，而是还要解方程，因此一般在近似解$y_n$已知时使用。
  - Euler法的收敛性：若能找到使f对y满足Lipschitz条件的L，则$h<\frac{1}{L}$可使Euler法收敛。
- 梯形方法
  - $\begin{cases} y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})] \\ y_0=\alpha \end{cases}$，即对显式、隐式Euler方法做了折中。
  - 梯形方法的收敛性：若能找到使f对y满足Lipschitz条件的L，则$h<\frac{2}{L}$可使梯形方法收敛。
  - 梯形方法比显式Euler法一般更快。

- 预估-校正方法：
  - 改进Euler法：$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n))] \\ y_0 = \alpha \end{cases}$。
  - 改进Euler法比显式Euler法一般更精确。
- 中点公式：$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f(x_n, y_n)) \\ y_0 = \alpha \end{cases}$

3. 截断误差

- 局部截断误差：对方法$\sum_{k=0}^{p} y_{n+k} = \sum_{k=0}^{q} y'_{n+k}$中的每项进行Taylor展开，得到的式子$T_{n+1} = \sum_{i=0}^{+\infty} \beta h^i y_n^{(i)}$即为局部截断误差。
  - 此处所用的Taylor展开公式：$\begin{cases} y_{n+k} = y(x + kh) = \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{(kh)^i}{i!} y_n^{(i)} \\ y'_{n+k} = f(x + kh) = \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{(kh)^i}{i!} y_n^{(i+1)} \end{cases}$。
- 主局部截断误差：T_{n+1}的前面几项往往是0。对第一个非零项，称之为主局部截断误差。
- 阶：取主局部截断误差中h的次数p，有$p-1$为该方法的阶。

4. 相容性、收敛性与绝对稳定性

- 相容性、收敛性：若显式单步法的阶数≥ 1，则它具有相容性。若它相容，则还具有收敛性。
- 绝对稳定性：取$y'(x) = f(x, y) = \lambda y$，则单步法可以写成$y_{n+1} = E(\lambda h) y_n$。
  - 绝对稳定性的判别方法：令λh满足$|E(\lambda h)| < 1$即可。
  - 当显式单步法中的f不是$f(x, y)$而是$f(g(x), h(y))$时，则λy变成$\lambda h(y)$。