《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消去法

- 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$Ux=b$。
- 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。

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

  - 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

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

这一题的第一步，就需要先把3.996所在行换到第一行，再进行第一次消去。

2. 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。

3. 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。

4. 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。

5. 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。

6. 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$|\lambda I-A|$计算出的多项式，特征值为特征多项式的零点。
- 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。

7. 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：
    - 代数余子式：矩阵元素的代数余子式为$B_{ij}=(-1)^{i+j}A_{ij}$。
    - 伴随矩阵：这个矩阵的(i,j)项是原矩阵(j,i)项的代数余子式。记作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

- 收敛：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$\lim_{k\to+\infty} \frac{f^{(p)}(x^*)}{p!} \neq 0$，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：$x_i=\frac{x_ix_{i-2}-x_{i-1}^2}{x_i+x_{i-2}-2x_{i-1}}$。
- Steffensen加速法：对于不动点迭代法$x=\varphi(x)$，Steffensen加速法为：$\begin{cases}m=\varphi(x_k)\\n=\varphi(m)\\x_{k+1}=x_k-\frac{(n-m)^2}{n-2m+x_k}\end{cases}$。
  - 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

> 此处待求解的方程变为$f(x)=0$而非$f(x)=x$。

- （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。

第五章 矩阵特征值问题

> 本章讨论的矩阵特征值均用λ表示，其中λ_1是主特征值（最大的特征值），其余特征值按λ_2、λ_3、…、λ_n从大到小排列。

1. 幂法

- 幂法：对任给v_0，有$\begin{cases}z^{(k)}=Av^{(k-1)}\\m^{(k)}=\max(z^{(k)})\\v^{(k)}=\frac{z^{(k)}}{m^{(k)}}\end{cases}$，其中$m^{(k)}$收敛到主特征值$\lambda_1$，$v^{(k)}$收敛到$\lambda_1$对应的特征向量。
- 幂法的收敛速度：用$\frac{\lambda_2}{\lambda_1}$表示。$\lambda_2$越接近$\lambda_1$，收敛越慢。
- 幂法的Aitken加速：$\overline{\lambda_1}^{(k)}=\frac{m_km_{k+2}-m_{k+1}^2}{m_{k+2}-2m_{k+1}+m_k}$，这个算法比$m^{(k)}$收敛得更快。
- 逆幂法：$\begin{cases}A'z^{(k)}=v^{(k-1)}\\m^{(k)}=\max(z^{(k)})\\v^{(k)}=\frac{z^{(k)}}{m^{(k)}}\end{cases}$，其中第一步需要解方程，$m^{(k)}$收敛到最小特征值$\lambda_n$的倒数，$v^{(k)}$收敛到$\lambda_n$对应的特征向量。
  - 逆幂法的收敛速度：用$\frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}}$表示。$\lambda_n$越接近$\lambda_{n-1}$，收敛越慢。

- 原点位移的逆幂法：$\begin{cases}(A'-qI)z^{(k)}=v^{(k-1)}\\ m^{(k)}=\max(z^{(k)})\\ v^{(k)}=\frac{z^{(k)}}{m^{(k)}}\end{cases}$，其中第一步需要解方程。当$q$最接近某一特征值$\lambda_i$时，$m^{(k)}$收敛到$\frac{1}{\lambda_i-q}$，$v^{(k)}$收敛到$\lambda_i$对应的特征向量。
    - 若已知λ_i对应的特征向量近似为x，可直接取$q=\frac{(Ax,x)}{(x,x)}$。

2. Householder矩阵的求法

- 一般情况下的Householder矩阵：对任意n维向量x，总存在对称正交矩阵P，使得Px的计算结果为n维向量$v=(v_1,\cdots,v_j=-sgn(x_j)\alpha,v_{j+1}=0,\cdots,v_k=0,v_{k+1},\cdots,v_n)$（相当于将任意变量变换为有一段连续为0的向量，一般记为第$j+1$到k项为0，$1\le j<k$，$j<k\le n$）。这样的矩阵P称为Householder矩阵。
- 一般情况下的Householder矩阵求法：
$\begin{cases}\alpha=\sqrt{x_j^2+x_{j+1}^2+\cdots+x_n^2}\\ u=[0,\cdots,0,x_j+sgn(x_j)\alpha,x_{j+1},\cdots,x_k,0,\cdots,0]^T\\ P=I-\frac{2uu^T}{||u||_2^2}\end{cases}$。
    - $||u||_2^2$的简便算法：$||u||_2^2=2\alpha(\alpha+x_j)$。
    - 如此计算出的Householder矩阵P，从j行j列到k行k列仍为Householder矩阵（记为$\widetilde{P}$），其余部分则为单位矩阵，如下图所示。

$$P=I-\frac{2uu^T}{||u||_2^2}=\begin{pmatrix}I_{j-1} & & \\ & \tilde{P} & \\ & & I_{n-k}\end{pmatrix}$$

    - 等式右边为矩阵的Householder矩阵求法：当等式变为$Px=V$时，若矩阵第一列v仍满足上述的条件，则仍可按上述方法求取Householder矩阵P。
- 特殊情况下的Householder矩阵求法：当计算结果为n维向量$v=[v_1,0,\cdots,0]^T$（即从第二项开始全为0）时，Householder矩阵的求法变为如下形式：
$\begin{cases}v_1=-sgn(x_1)||x||_2\\ u=[x_1+sgn(x_1)||x||_2,x_2,\cdots,x_n]^T\\ \beta=\frac{1}{||x||_2+|x_1|\cdot||x||_2}\\ P=I-\beta uu^T\end{cases}$。

3. 上Hessenberg矩阵的求法

- 上Hessenberg矩阵：次对角线以下元素均为0的矩阵，如下图所示。

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}* & * & \cdots & * & *\\ * & * & \cdots & * & *\\ & * & \cdots & * & *\\ & & \ddots & \vdots & \vdots\\ & & & * & *\end{bmatrix}.$$

- 上Hessenberg矩阵的求法：
    - 将待变换成上Hessenberg矩阵的矩阵A，取第一列v_1，寻找Householder矩阵$P_1v_1=v_1'$使得v_1'形如$(*,*,0,\cdots,0)^T$。

- 计算$H_1 = P_1AP_1$。如H_1还不是上Hessenberg矩阵，则除去A最左上角的一行一列，对右下角的分块A_2，取新的第一列v_2，寻找$n-1$维Householder矩阵$P_2'v_2 = v_2'$使得v_2'形如$(*,*,0,\cdots,0)^T$，构造n维Householder矩阵$P_2 = \begin{bmatrix} I & \\ & P_2' \end{bmatrix}$。
- 计算$H_2 = P_2H_1P_2$。如H_2还不是上Hessenberg矩阵，则再除去A_2最左上角的一行一列，对右下角的分块A_3，取新的第一列v_3，寻找$n-2$维Householder矩阵$P_3'v_3 = v_3'$使得v_3'形如$(*,*,0,\cdots,0)^T$，构造n维矩阵$P_3 = \begin{bmatrix} I & \\ & P_3' \end{bmatrix}$。
- ……
- 直到H_k为上Hessenberg矩阵时，结束。

4. QR分解

- QR分解：将非奇异矩阵A分解为$A = QR$，其中Q为正交矩阵，R为对角线均为正数的上三角阵。
- QR分解方法（类似于上Hessenberg矩阵的求法）：
  - 将待分解的矩阵A，取第一列v_1，寻找$P_1v_1 = v_1'$使得v_1'形如$(*,0,\cdots,0)^T$。
  - 计算$R_1 = P_1A$。如R_1还不是上三角矩阵，则除去A最左上角的一行一列，对右下角的分块A_2，取新的第一列v_2，寻找$n-1$维矩阵$P_2'v_2 = v_2'$使得v_2'形如$(*,0,\cdots,0)^T$，构造n维矩阵$P_2 = \begin{bmatrix} I & \\ & P_2' \end{bmatrix}$。
  - 计算$R_2 = P_2P_1A$。如R_2还不是上三角矩阵，则除去A最左上角的一行一列，对右下角的分块A_3，取新的第一列v_3，寻找$n-2$维矩阵$P_3'v_3 = v_3'$使得v_3'形如$(*,0,\cdots,0)^T$，构造n维矩阵$P_3 = \begin{bmatrix} I & \\ & P_3' \end{bmatrix}$。
  - ……
  - 直到$R_k = P_kP_{k-1}\cdots P_1A$为上三角矩阵时，结束。此时有：
    - $Q = (P_1P_2\cdots P_n)^{-1} = (P_1P_2\cdots P_n)^T = P_k^TP_{k-1}^T\cdots P_1^T$。
    - $R = P_kP_{k-1}\cdots P_1A$。
  - 有时希望对角线为正，因此需要取合适的对角矩阵D，使$\bar{Q} = QD$、$\bar{R} = D^{-1}R$对角线为正。
  - 示例：求$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & -1 \\ 2 & -4 & 5 \end{bmatrix}$的QR分解，使$Q$和$R$对角线均为正。
  - 解答：
    - 先找到P使$R = PA$为上三角阵：
      - $k=-3$，$u = [4,2,2]^T$，$\beta = \frac{1}{12}$

- $P = I - \beta uu^T = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{bmatrix}$，此时
  $PA = \begin{bmatrix} -3 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & -3 \\ 0 & -3 & 3 \end{bmatrix}$。
- 注意到第二列对角线以下仍然不是0，因此再对$A_0 = \begin{bmatrix} 0 & -3 \\ -3 & 3 \end{bmatrix}$找$P_0$，使$R_0 = P_0A_0$为上三角阵。
  - $k_0 = -3$，$u_0 = [3, -3]^T$，$\beta_0 = \frac{1}{9}$。
  - $P_0 = I - \beta_0 u_0 u_0^T = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$，此时$P_0A_0 = \begin{bmatrix} -3 & 3 \\ 0 & -3 \end{bmatrix}$。
- 于是取$P_1 = \begin{bmatrix} 1 & \\ & P_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$，此时：
  - $R = P_1 * P * A = \begin{bmatrix} -3 & 3 & -3 \\ 0 & -3 & 3 \\ 0 & 0 & -3 \end{bmatrix}$。
  - $Q = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \end{bmatrix}$。

  但这是对角线非正的。因此取$\bar{D} = diag(-1, -1, -1)$：
  - $\bar{Q} = Q\bar{D} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$。
  - $\bar{R} = \bar{D}^{-1}R = \begin{bmatrix} 3 & -3 & 3 \\ 0 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$。

  检验得$\bar{Q}\bar{R} = A$，符合题意。
- 基本QR迭代方法：$\begin{cases} A_k = Q_kR_k \\ A_{k+1} = R_kQ_k \end{cases}$，该法中$A_k$会收敛与上三角阵，对角元素为$A$特征值。

第六章 插值法

1. Lagrange插值

- n次Lagrange插值多项式：$L_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k)[\prod_{j=0,j\neq k}^n(\frac{x-x_j}{x_k-x_j})]$。
  - 显然，n次Lagrange插值多项式是n次多项式，对应$n-1$个插值点，在这些插值点上$L_n(x) = f(x)$。

2. 均差与Hermite插值

- 均差：$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \frac{f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]-f[x_1,x_2,\cdots,x_k]}{x_0-x_k}$。又称差商。
- 均差表：一个函数的自变量和因变量可以画成形如下图的均差表。

3．设$f(x) \in C^n[a,b], x_j \in [a,b], j = 0,1,\dots,n$为相异节点，那么

$$f[x_0, x_1, \cdots x_n] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi), \xi \in (a,b)$$

均差表（差商表）

x_k	$f(x_k)$	一阶均差	二阶均差	三阶均差
x_0	$f(x_0)$			
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0,x_1]$		
x_2	$f(x_2)$	$f[x_1,x_2]$	$f[x_0,x_1,x_2]$	
x_3	$f(x_3)$	$f[x_2,x_3]$	$f[x_1,x_2,x_3]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3]$

- Hermite插值：
  $H_n(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[\cdots + f[x_0, x_1, \cdots, x_n] \prod_{k=0}^{n-1}(x - x_k)$。
  - 简记：即只用x分别减对应每个f的括号里的前面几项，再相乘。最后一项不减不乘。
  - 次数：即n。
    - 显然，n次Hermite插值需要n对$(x, f(x))$进行均差求解。
- 重节点：如果提供的$(x, f(x))$不够要求的次数，那么可以使用重节点。在带有重节点的均差表中，如果出现$\frac{f(x_i)-f(x_i)}{x_i-x_i}$的情况，则视为求一阶导$f'(x_i)$。其余情况类推。
  - 使用重节点均差的Hermite插值，如$f[x_0, x_0, x_1, x_1]$，后面就需要乘$(x - x_0)^2(x - x_1)$。这仍然符合上面的简记。

3. 三次样条插值

- 三次样条函数：对函数$f(x)$进行三次样条插值得到的函数$S(x)$，一般为满足如下性质的分段函数。
  - 每个分段上均为最高次数相同的多项式函数$\sum_{k=0}^{n} a_k x^k$。
  - 在每个分段点上，函数值、一阶导数值、二阶导数值相等。
  - 如此时约束条件仍然不够，使得插值得到的系数只能求出关系而不能求值，则可以补足条件。
- 常见的补足条件方法：
  - I型边界条件：对分段的开头x_0与结尾x_n这两处，要求$S'(x) = f'(x)$。
  - II型边界条件：对分段的开头x_0与结尾x_n这两处，要求$S''(x) = f''(x)$。
  - 自然边界条件：对分段的开头x_0与结尾x_n这两处，要求$S''(x) = 0$。
    - 此时的三次样条函数又称自然样条函数。
  - 非扭矩边界条件：对每个分段上的函数$\sum_{k=0}^{n} a_k x^k$，有$a_n = 0$。

第七章 函数逼近

1. 正交多项式

- 正交多项式：设有函数$f(x)$，$g(x)$，其定义域均为$[a,b]$，则若找到$\rho(x)$满足$\int_a^b \rho(x)f(x)g(x)dx=0$，则$f$与$g$在$[a,b]$上互为基于权函数$\rho$的正交多项式。

2. 最小二乘法

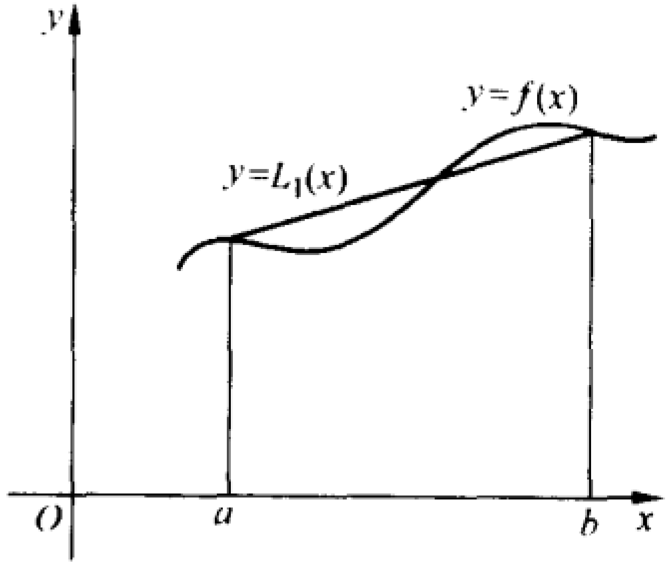
- 线性拟合的最小二乘法：设有n维向量x和n维向量y需要拟合成直线$y=a_0+a_1x$，则方法如下：
  - 定义每个元素全为1的n维向量c。
  - $\begin{bmatrix}(c,c) & (x,c)\\(c,x) & (x,x)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\a_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(c,y)\\(x,y)\end{bmatrix}$，其中$(,)$表示向量内积（点乘）。
  - 由于c、x、y均已知，因此相当于求解$Ax=b$。解出a_0、a_1即为所求。
- 指数拟合的最小二乘法：设有n维向量x和n维向量y需要拟合成指数曲线$y=be^{ax}$，，则方法如下：
  - 两边取$\ln$：$\ln y=\ln b+ax$
  - 于是记$z=\ln y$，$a_0=\ln b$，$a_1=a$，变成$z=a_0+a_1x$，按线性拟合的最小二乘法求解即可。

第八章 数值积分

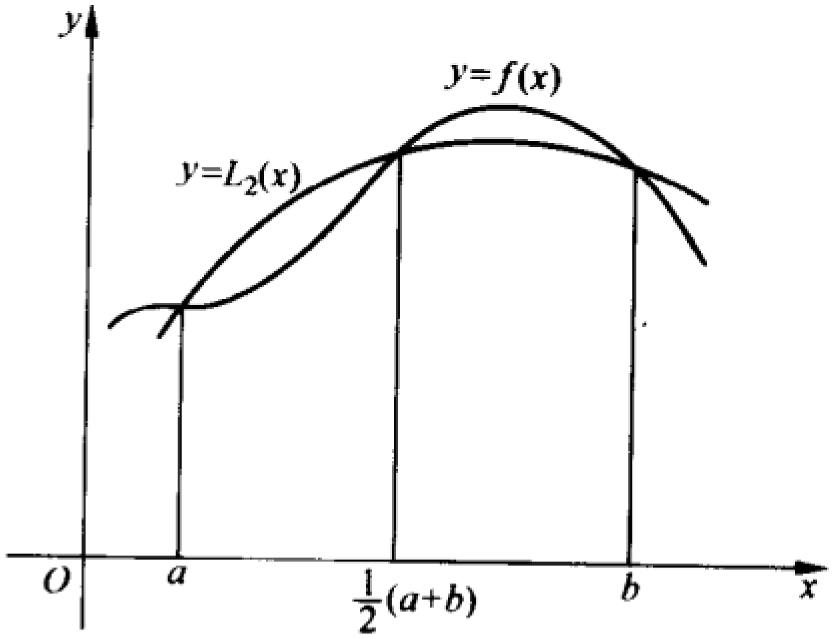
> 本章讨论的数值积分均形如$I(f)=\int_a^b f(x)dx\approx\int_a^b L_1(x)dx$。

1. Newton-Cotes型数值积分

- 插值型公式：设对$f(x)$进行n次Lagrange插值，得到插值多项式$L_n(x)=\sum_{k=0}^n f(x_k)[\prod_{j=0,j\neq k}^n(\frac{x-x_j}{x_k-x_j})]$，则插值型公式定义为$I(f)\approx\sum_{k=0}^n f(x_k)[\prod_{j=0,j\neq k}^n(\frac{x-x_j}{x_k-x_j})]$。
  - 下述的梯形、Simpson、Newton-Cotes求积公式，事实上全部为插值型公式。
- 代数精度：若某个插值型求积公式$I(f)\approx\int_a^b L_1(x)dx$能在$f(x)=1,x,x^2,\cdots,x^p$严格取等，而在$f(x)=x^{p+1}$只能取约等，则该求积公式的代数精度为$p$次。
- 梯形公式：$I(f)\approx\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$，如下图所示。



  - 梯形公式的代数精度：1。
- Simpson公式：$I(f)=\frac{b-a}{6}[f(a)+f(b)+4f(\frac{b+a}{2})]$，如下图所示。



  - Simpson公式的代数精度：3。
- Newton-Cotes求积公式：$I(f)\approx(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k)$，其中$C_k^{(n)}$的值见下表。

n	$C_k^{(n)}$				
1	$\frac{1}{2}$				
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$			
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$			
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$		
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$		
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	
7	$\frac{751}{17\,280}$	$\frac{3577}{17\,280}$	$\frac{1323}{17\,280}$	$\frac{2989}{17\,280}$	
8	$\frac{989}{28\,350}$	$\frac{5888}{28\,350}$	$\frac{-928}{28\,350}$	$\frac{10\,496}{28\,350}$	$\frac{-4540}{28\,350}$

- $C_k^{(n)}$满足$C_k^{(n)} = C_n^{(n-k)}$。
- $\{x_0 = a, x_1, \cdots, x_n = b\}$等分了区间$[a,b]$。
- $n = 1$时，Newton-Cotes求积公式退化为梯形公式；$n = 2$时退化为Simpson公式，$n = 3$时称为Simpson 3/8公式；$n = 4$时称为Boole公式（或Cotes公式）。
- Newton-Cotes求积公式的稳定性：$n \leq 7$的Newton-Cotes都是稳定的，因为此时所有的C均为正数。

- 开型Newton-Cotes求积公式：即令$\{a, x_0, x_1, \cdots, x_n, b\}$等分$[a,b]$的Newton-Cotes公式。
  - 中点公式：取$n = 0$，有$I(f) \approx (b-a)f(\frac{a+b}{2})$。
  - 两点公式：取$n = 1$，有$I(f) \approx \frac{b-a}{2}[f(x_0) + f(x_1)]$。
  - 三点公式：取$n = 2$，有$I(f) \approx \frac{b-a}{3}[2f(x_0) - f(x_1) + 2f(x_2)]$。

2. 复合求积公式

- 复合梯形公式：将$[a,b]$等分为$\{x_0 = a, x_1, \cdots, x_n = b\}$，并对每个部分使用梯形公式求积分，得到$I_n(f) \approx \frac{b-a}{2n}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)]$，即为复合梯形公式。
- 复合Simpson公式：将$[a,b]$等分为$\{x_0 = a, x_1, \cdots, x_n = b\}$，并对每个部分使用Simpson公式求积分，得到$I_n(f) \approx \frac{b-a}{6n}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) + 4\sum_{k=1}^{n} f(\frac{x_k + x_{k-1}}{2})]$，即为复合Simpson公式。
- Romberg算法：
  1. $h = b - a$，$T(0,0) = \frac{h}{2}(f(a) + f(b))$，转2。
  2. 将区间$[a,b]$分半，$T(1,0) = I_2(f)$，$T(1,1) = \frac{4T(1,0) - T(0,0)}{4^1 - 1}$，$1 \to j$，转4。
  3. 对区间作2^j等分，$T(j,0) = I_{2^j}(f)$，$T(j,k) = \frac{4^k T(j,k-1) - T(j-1,k-1)}{4^k - 1}$，$k = 1, 2, \cdots, j$，求出$T(j,j)$，转4。
  4. $|T(j,j) - T(j-1,j-1)| < \varepsilon$，则$T(j,j)$即为所求；否则$j + 1 \to j$，转3。
  - 式中$I_n(f)$使用复合梯形公式求解。
  - Romberg算法的计算结果可以打印为$T-$表，如下表所示。

$T(0.0)$				
$T(1,0)$	$T(1,1)$			
$T(2,0)$	$T(2,1)$	$T(2,2)$		
$T(3,0)$	$T(3,1)$	$T(3,2)$	$T(3,3)$	
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$

3. Gauss型求积公式

- 最高精度：对于有$n+1$个节点的求积公式，其最高代数精度为$2n+1$。
- Gauss型求积公式：达到了最高代数精度的求积公式。
- Gauss型求积公式的求法：若有Gauss型求积公式$I(f)=\int_a^b\rho(x)f(x)dx$，希望使用$n+1$个节点得到$2n+1$精度，则求法如下：
  - 设$\phi(x)=x^{n+1}+ax^n+bx^{n-1}+\cdots+z$，则联立$\begin{cases}\int_a^b\rho(x)\phi(x)dx-0\\ \int_a^b x\rho(x)\phi(x)dx-0\\ \cdots\\ \int_a^b x^n\rho(x)\phi(x)dx-0\end{cases}$，由此解出$a,b,\cdots,z$。
    - 即是要求$\phi(x)$同时与多项式序列$\{a_{n+1}x^{n+1},a_nx^n,\cdots,a_0x^0\}$在给定区间内基于权函数$\rho(x)$正交。
  - 解$\phi(x)=0$，得到$x_1,x_2,\cdots,x_{n+1}$共$n+1$个解，于是知$I(f)=\int_a^b\rho(x)f(x)dx\approx\sum_{k=1}^{n+1}A_kf(x_k)$。
  - 由于精度为$2n+1$，则显然可以根据代数精度的求法，令$I(f)$在$f(x)=1,x,\cdots,x_n$严格取等，解出$A_1,A_2,\cdots,A_{n+1}$。此时即有Gauss型求积公式$I(f)\approx\sum_{k=1}^{n+1}A_kf(x_k)$。
  - 从以上过程中可以看出，只要给定求积区间$[a,b]$和权函数$\rho(x)$，则不论对于什么样的$f(x)$，都能解出唯一一组$\{A_k\}$，使得$I(f)\approx\sum_{k=1}^{n+1}A_kf(x_k)$。
  - 示例：

例 8.5.2 确定求积公式

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x) \mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

中的系数 A_0, A_1 及节点 x_0, x_1，使该求积公式具有最高代数精度.

解 具有最高代数精度的求积公式为 Gauss 求积公式. 节点 x_0, x_1 为 $[a,b]=[0,1]$ 上以权函数 $\rho(x)=\sqrt{x}$ 的两次正交多项式的零点. 不妨假定 $\phi_2(x)$ 的首项系数为 1(不改变零点).

设 $\phi_2(x)=x^2+ax+b$，如果有

$$\int_0^1 \sqrt{x}\phi_2(x)\mathrm{d}x = 0, \quad \int_0^1 \sqrt{x} \cdot x\phi_2(x)\mathrm{d}x = 0, \tag{8.5.8}$$

那么 $\phi_2(x)$ 在 $[0,1]$ 上以权函数 $\rho(x)=\sqrt{x}$ 与零次和一次多项式正交. 所以 $\phi_2(x)$ 是 $[a,b]$ 上，以权函数 $\rho(x)=\sqrt{x}$ 的二次正交多项式(首项系数为 1).

由(8.5.8)式得出 $a=-\frac{10}{9}, b=\frac{5}{21}$，从而得出

$$\phi_2(x) = x^2 - \frac{10}{9}x + \frac{5}{21}.$$

解 $\phi_2(x)=0$，有

$$x_0 = \frac{35-2\sqrt{70}}{63}, \quad x_1 = \frac{35+2\sqrt{70}}{63},$$

即 $x_0=0.289\,949, x_1=0.821\,162$.

由于两个节点的 Gauss 求积公式具有 3 次代数精度，因此对于 $f(x)=1, x$，求积公式准确成立. 即

$$f(x)=1, \quad 有 \quad \int_0^1 \sqrt{x}\mathrm{d}x = A_0 + A_1,$$

$$f(x)=x, \quad 有 \quad \int_0^1 \sqrt{x} \cdot x\mathrm{d}x = A_0x_0 + A_1x_1.$$

定积分计算后得

$$A_0 + A_1 = \frac{2}{3}, \quad x_0A_0 + x_1A_1 = \frac{2}{5}.$$

由此解得 $A_0=0.277\,556, A_1=0.389\,111$. 求积公式为

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)\mathrm{d}x \approx 0.277\,556 f(0.289\,949) + 0.389\,111 f(0.821\,162).$$

- Gauss-Legendre求积公式：$\int_{-1}^1 f(x)dx=\sum_{k=0}^n A_kf(x_k)$，式中对不同的$n$有不同的$A_k$，如下图所示。

表 8.4

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
0	0	2	5	±0.932 469 514 2	0.171 324 492 4
1	±0.577 350 269 2	1		±0.661 209 386 5	0.360 761 573 0
2	±0.774 596 669 2	0.555 555 555 6		±0.238 619 186 1	0.467 913 934 6
	0	0.888 888 888 9	6	±0.949 107 912 3	0.129 484 966 2
3	±0.861 136 311 6	0.347 854 845 1		±0.741 531 185 6	0.279 705 391 5
	±0.339 981 043 6	0.652 145 154 9		±0.405 845 151 4	0.381 830 050 5
4	±0.906 179 845 9	0.236 926 885 1		0	0.417 959 183 7
	±0.538 469 310 1	0.478 628 670 5	7	±0.960 289 856 5	0.101 228 536 3
	0	0.568 888 888 9		±0.796 666 477 4	0.222 381 034 5
				±0.525 532 409 9	0.313 706 645 9
				±0.183 434 642 5	0.362 683 783 4

  - 当求积区间不为$[-1,1]$而为$[a,b]$时，应将x变换为$t=\frac{2x-b-a}{b-a}$，将$\int_a^b f(x)dx$变为$\frac{2}{b-a}\int_{-1}^1 f(t)dt$。
- Gauss-Chebyshev求积公式：$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx=\sum_{k=0}^n \frac{\pi}{n+1}f(\cos(\frac{2k+1}{2n+2}\pi))$。
  - 类似地，当求积区间不为$[-1,1]$而为$[a,b]$时，应将x变换为$t=\frac{2x-b-a}{b-a}$。

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$x_k = x_0 + kh$，$y_k = y(x_0 + kh)$。

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。
    - 示例：梯形公式的$T_{n+1}=-\frac{h^3}{12}y^{(3)}(x_n)+O(h^4)$，因此是二阶的。
    - 显式Euler、隐式Euler法都是一阶的，梯形公式是二阶的。
    - 改进Euler公式需要使用二维Taylor展式（即需要考虑f对x和y求取偏导数、二阶偏导数等）。最终计算得一维部分是$\frac{h^3}{6}y^{(3)}(x_n)+O(h^4)$，二维部分的$h$系数也为3，因此是二阶的。

4. 相容性、收敛性与绝对稳定性

- 相容性：若把显式单步法写成$y_{n+1}=\phi(x_n,y_n;h)$形式，并对所有的h都取0，发现$y_{n+1}=f(x_n,y_n)$，则这个显式单步法是相容的。
- 收敛性：若显式单步法$y_{n+1}=\phi(x_n,y_n;h)$的阶数≥ 1，且ϕ满足对y的Lipschitz条件$|\frac{\phi(x,y;h)-\phi(x,\bar{y},h)}{y-\bar{y}}|\leq L$，则这个显式单步法是收敛的。
    - 相容性-收敛性推论：若显式单步法的阶数≥ 1，则它相容且收敛。
- 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$f(g(x),z(y))$时，则λy变成$\lambda z(y)$。
    - 示例：求改进Euler方法$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_n+hf(x_n,y_n))]$的绝对稳定区间。

对于改进Euler方法有 $E(\lambda h)=1+\lambda h+\frac{(\lambda h)^2}{2}$

绝对稳定性条件为 $\left|1+\lambda h+\frac{(\lambda h)^2}{2}\right|<1$

当$\lambda h\in R$时，此条件等价于 $-1<1+\lambda h+\frac{(\lambda h)^2}{2}<1$

即
$$-2<\lambda h(1+\frac{\lambda h}{2})<0$$

考虑区间 $(-\infty,-2],(-2,0),[0,+\infty)$

当$\bar{h}=\lambda h\in(-2,0)$时，有$|E(\lambda h)|<1$因此，改进Euler方法的绝对稳定性区间为（$-2$，$0$）。

> 未包括的内容：
>
> - 第一章：
>   - 误差、有效数字、数值方法稳定性（送分题）
> - 第二章：
>   - 误差分析（病态？）
> - 第六章：
>   - Newton-Hermite插值（没写Newton插值）
>   - 插值方法的余项

> - 分段低次插值
> - 三次样条插值（只写了三次样条函数的系数求法和常见边界条件）
>
> - 第七章：
>   - 线性以及特殊非线性化成线性问题（最小二乘法？）
> - 第八章：
>   - 梯形公式、Simpson公式以及相应的复合求积公式的余项（代数精度？）
> - 第九章：
>   - Runge-Kutta方法
