计算方法复习

1 绪论

误差

- 误差限 $e^* = |x^* - x| \le \epsilon^*$
- 相对误差限 $e_r^* = \left|\frac{x^*-x}{x^*}\right| \le \epsilon_r^*$

有效数字 x^* 有 n 位有效数字可写成标准形式

$$x^* = \pm 10^m \times (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)})$$

且 $a_1 \ge 1$，

$$|x - x^*| \le \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$$

映射误差

$$\begin{aligned}
\epsilon(x_1^* \pm x_2^*) &= \epsilon(x_1^*) + \epsilon(x_2^*) \\
\epsilon(x_1^* x_2^*) &\approx |x_1^*|\epsilon(x_2^*) + |x_2^*|\epsilon(x_1^*) \\
\epsilon\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) &\approx \frac{|x_1^*|\epsilon(x_2^*) + |x_2^*|\epsilon(x_1^*)}{|x_2^*|^2} \quad (x_2^* \ne 0) \\
\epsilon(f(x^*)) &\approx |f'(x^*)|\epsilon(x^*) \\
\epsilon(f(x_1^*, \cdots, x_n^*)) &\approx \sum_{k=1}^{n} \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^* \right| \epsilon(x_k^*)
\end{aligned}$$

2 方程求根

迭代法 $f(x) = 0 \Rightarrow x = \phi(x)$。

全局收敛 $\forall x \in [a,b] : \phi \in C^1[a,b]; \phi(x) \in [a,b]; |\phi'(x)| \le q < 1$

$$\begin{aligned}
&\exists x^* \in [a,b], \forall x_0 \in [a,b], x_{k+1} = \phi(x_k) \to x^* \\
&|x_k - x^*| \le \frac{q^k}{1-q}|x_1 - x_0| \\
&|x_k - x^*| \le \frac{q}{1-q}|x_k - x_{k-1}|
\end{aligned}$$

局部收敛 $\phi \subseteq C^1(O_\delta(x^*)); |\phi'(x^*)| < 1$，则 $x_{k+1} = \phi(x_k)$ 在 x^* 邻近局部收敛。

收敛速度 迭代误差 $e_k = x_k - x^*$，p 阶收敛：

$$\lim_{k\to\infty} \frac{e_{k+1}}{e_k^p} = C \quad (C \ne 0)$$

或者 $\phi \in C^p(x^*)$，$p \ge 2(p = 1$见局部收敛)

$$\begin{cases}
\phi'(x^*) = \phi''(x^*) = \cdots = \phi^{(p-1)}(x^*) = 0, \\
\phi^{(p)}(x^*) \ne 0
\end{cases}$$

此时 $C = \frac{\phi^{(p)}(x^*)}{p!}$; $p = 1$ 线性收敛; $p > 1$ 超线性收敛; $p = 2$ 平方收敛。

Newton 公式 局部平方收敛 $p = 2$

$$f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) = 0 \xrightarrow{x = x_{k+1}} x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

弦截法（割线法） 不知道导数信息，局部超线性收敛 $p = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618$

$$\begin{aligned}
&f(x_k) + \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}(x - x_k) = 0 \\
\xrightarrow{x = x_{k+1}} &x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}(x_k - x_{k-1})
\end{aligned}$$

3 方程组求解

3.1 直接法

顺序 Guass 消元、列主元消元略。

LU 分解 $\mathbf{A}$ 为 n 阶矩阵，如果 $\mathbf{A}$ 的顺序主子式 $D_i \ne 0 (i = 1, 2, \cdots, n-1)$，则 $\mathbf{A}$ 可唯一 Dolittle 分解为 $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$。（如果 $1, \cdots, n$ 顺序主子式都大于 0 将正定）

Dolittle 分解 $\mathbf{L}$ 对角线全为 1（单位下三角）

Crout 分解 $\mathbf{U}$ 对角线全为 1（单位上三角）

对称矩阵分解 $\mathbf{A} = \mathbf{LDL}^\top$

对称正定分解或 Cholesky 分解 $\mathbf{A} = \mathbf{LL}^\top$

p-范数 $\|\mathbf{x}\|_p = (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{1/p}$

等价性 设 $\|\mathbf{x}\|_s, \|\mathbf{x}\|_t$ 为 $\mathbf{R}^n$ 上向量的任意两种范数，则存在 $c_1, c_2 > 0$ 使得 $\forall x \in \mathbf{R}^n : c_1\|\mathbf{x}\|_s \le \|\mathbf{x}\|_t \le c_2\|\mathbf{x}\|_s$。

矩阵范数 $\rho(\mathbf{A}) \le \|\mathbf{A}\|$

行范数 $\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^n |a_{ij}|$

列范数 $\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^n |a_{ij}|$

2-范数 $\|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(\mathbf{A}^\top\mathbf{A})}$，若 $\mathbf{A}$ 对称，$\|\mathbf{A}\|_2 = \rho(\mathbf{A})$

F-范数 $\|\mathbf{A}\|_F = \left(\sum_{i,j=1}^n a_{ij}^2\right)^{1/2}$

条件数 $\mathrm{cond}(\mathbf{A})_v = \|\mathbf{A}^{-1}\|_v\|\mathbf{A}\|_v \ge 1(\det\mathbf{A}\ne 0)$

$$\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \le \mathrm{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\Delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}, \mathbf{A}(\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}) = \mathbf{b}+\Delta\mathbf{b}$$

$$\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \le \frac{\mathrm{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\Delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}{1-\mathrm{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\Delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}, (\mathbf{A}+\Delta\mathbf{A})(\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}) = \mathbf{b}$$

$$\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \le \frac{\mathrm{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\Delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}{1-\mathrm{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\Delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}\left(\frac{\|\Delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}+\frac{\|\Delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}\right)$$
$$(\mathbf{A}+\Delta\mathbf{A})(\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}) = \mathbf{b}+\Delta\mathbf{b}$$

$\mathrm{cond}(\mathbf{A})_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(\mathbf{A}^\top\mathbf{A})}{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^\top\mathbf{A})}}$，$A$ 对称时，$\mathrm{cond}(\mathbf{A})_2 = \frac{\max|\lambda|}{\min|\lambda|}$

3.2 迭代法

Jacobi 迭代法 $\mathbf{A} = \mathbf{D}-\mathbf{L}-\mathbf{U}, \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{D}\mathbf{x} = (\mathbf{L}+\mathbf{U})\mathbf{x}+\mathbf{b}$，$\mathbf{x} = \mathbf{B}_0\mathbf{x}+\mathbf{f}$，$\mathbf{B}_0 = \mathbf{E}-\mathbf{D}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}+\mathbf{U}), \mathbf{f} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}$。

Guass–Seidel 迭代法 $(\omega = 1)$ $(\mathbf{D}-\mathbf{L})\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{b}+\mathbf{U}\mathbf{x}^{(k)}$

收敛性 充要条件：$\rho(\mathbf{B}) < 1$；充分条件：$\|\mathbf{B}\|_v = q < 1$ 或 $\mathbf{A}$ 严格对角占优 $|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1\\j\ne i}}^n |a_{ij}|$（它也将是非奇异矩阵）

收敛速度 $R(\mathbf{B}) = -\ln\rho(\mathbf{B})$

SOR 方法 $\mathbf{D}\mathbf{x}^{(k+1)} = \omega(\mathbf{b}+\mathbf{L}\mathbf{x}^{(k+1)}+\mathbf{U}\mathbf{x}^{(k)})+(1-\omega)\mathbf{D}\mathbf{x}^{(k)}$，收敛充要条件 $\rho(\mathbf{L}_\omega) < 1$; 如果 $\mathbf{A}$ 是对称正定的，且 $0 < \omega < 2$，则 SOR 收敛；如果 $\mathbf{A}$ 是严格对角占优的，且 $0 < \omega \le 1$，则 SOR 收敛。

4 插值与逼近

4.1 插值

Lagrange 插值 $L_n(x) = \sum_{k=0}^n y_k l_k(x)$

$$l_k(x) = \frac{\prod_{\substack{i=0\\i\ne k}}^n (x-x_i)}{\prod_{\substack{i=0\\i\ne k}}^n (x_k-x_i)}$$

差商

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k] = \frac{f[x_1,x_2,\cdots,x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_0}$$
$$= \sum_{j=0}^k \frac{f(x_j)}{\prod_{\substack{i=0\\i\ne j}}^k (x_j-x_i)} = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}, \quad \xi\in[a,b]$$

Netwon 插值

$$N_n(x) = f(x_0)+\sum_{i=0}^n f[x_0,\cdots,x_i]\prod_{j=0}^{i-1}(x-x_j)$$
$$R_n(x) = f[x,x_0,x_1,\cdots,x_n]\prod_{j=0}^n (x-x_j)$$

插值余项 $\xi\in(a,b)$，

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^n (x-x_j)$$

Hermite 插值

Lagrange–Hermite $H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^n (y_i\alpha_i(x)+y_i'\beta_i(x)), \alpha_i(x) = (1-2(x-x_i)l_i'(x_i))l_i^2(x), \beta_i(x) = (x-x_i)l_i^2(x)$

Newton–Hermite $p_{2n+1}(x) = f[x_0]+f[x_0,x_0](x-x_0)+f[x_0,x_0,x_1](x-x_0)^2+\cdots+f[x_0,x_0,\cdots,x_n,x_n](x-x_0)^2\cdots(x-x_{n-1})^2(x-x_n)$

$R_{2n+1}(x) = f[x,x_0,x_0,\cdots,x_n,x_n](x-x_0)^2\cdots(x-x_n)^2 = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}(x-x_0)^2\cdots(x-x_n)^2$

分段 解决 Runge 现象

分段线性 (1) $I_h(x)\in C[a,b]$ (2) $I_h(x_k) = f_k$ (3) $I_h(x)$ 在每个区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上是线性函数。

分段三次 Hermite (1) $I_h(x)\in C^1[a,b]$ (2) $I_h(x_k) = f_k, I_h'(x_k) = f_k'$ (3) $I_h(x)$ 在每个区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上是三次多项式。$R_i(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_i)^2(x-x_{i+1})^2$

三次样条 (1) $S(x)\in C^2[a,b]$ (2) $S(x_k-0) = S(x_k+0) = f_k, S'(x_k-0) = S'(x_k+0), S''(x_k-0) = S''(x_k+0)$，边界条件（两端一阶导数值、两端二阶导数值或周期样条）(3) $S(x)$ 在每个区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上是三次多项式。

三转角、三弯矩略。

4.2 逼近

最小二乘法（数据点） $\mathbf{G}\mathbf{a} = \mathbf{d}$ 使得 $\|\delta\|_2^2 = \sum_i w(x_i)[S(x_i)-f(x_i)]^2$ 最小。其中 $\mathbf{G}$ 由 $(\phi_j,\phi_k) = \sum_i w(x_i)\phi_j(x_i)\phi_k(x_i)$ 组成，$\mathbf{d}$ 由 $(f,\phi_k) = \sum_i w(x_i)f(x_i)\phi_k(x_i)$ 组成。

一致逼近 $\|f(x)-P(x)\|_\infty=\max_{a\le x\le b}|f(x)-P(x)|$

最佳（一致）逼近 Chebyshev 交错点组，$n+2$ 个轮流的正负偏差点。Chebyshev 正交多项式。

平方逼近 $\|f(x)-P(x)\|_2=\sqrt{\int_a^b[f(x)-P(x)]^2\mathrm{d}x}$

最佳平方逼近 $\mathbf{Ga}=\mathbf{d}$ 此时是函数内积。

正交多项式 正交化方法 $g_n(x)=x^n-\sum_{k=0}^{n-1}\frac{(x^n,g_k)}{(g_k,g_k)}\cdot g_k(x)$

Legdendre 多项式 区间为 $[-1,1]$，权函数 $\rho(x)\equiv 1$，由 $\{1,x,x^2,\cdots\}$ 正交化得到。$P_0(x)=1,P_1(x)=x,P_2(x)=\frac{3}{2}x^2-\frac{1}{2}$,$(n+1)P_{n+1}(x)=(2n+1)xP_n(x)-nP_{n-1}(x)$，在所有最高项系数为 1 的 n 次多项式中，在 $[-1,1]$ 上与 0 的平方误差最小（最佳平方逼近）。$P_n(x)$ 在 $[-1,1]$ 上有 n 个零点。

Chebyshev 多项式 区间为 $[-1,1]$，权函数 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，由 $\{1,x,x^2,\cdots\}$ 正交化得到。$T_n(x)=\cos(n\arccos x)$,$T_0(x)=1,T_1(x)=x,T_2(x)=2x^2-1$,$T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x)$。在所有最高项系数为 1 的 n 次多项式中，在 $[-1,1]$ 上 $w_n(x)=\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$ 与 0 的偏差最小（最佳逼近）。$f(x)-P_2^*(x)=\frac{1}{2^2}T_3(x)$

5 数值积分

矩形公式 $R=(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$

机械求积 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{k=0}^n A_kf(x_k)$

代数精度 对于 $1,x,\cdots,x^m$ 求积都能准确成立，则有 m 次代数精度。

插值型积分余项 $R[f]=\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^n(x-x_i)\mathrm{d}x$

Newton–Cotes 公式 等分 $x_k=a+kh$，$I_n=(b-a)\sum_{k=0}^n C_k^{(n)}f(x_k),C_k^{(n)}=\cdots$

梯形公式 $T=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$，余项 $R_T=\frac{f^{(2)}(\xi)}{2}\int_a^b(x-a)(x-b)\mathrm{d}x=-\frac{f^{(2)}(\xi)}{12}(b-a)^3$

Simpson 公式 $S=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$（三次代数精度）余项 $R_S=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}\int_a^b(x-a)(x-c)^2(x-b)\mathrm{d}x=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4f^{(4)}(\xi)$（三次代数精度）

Cotes 公式 略。（五次代数精度）

复化求积法

复化梯形公式 $T_n=\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$，余项 $I-T_n=-\frac{f^{(2)}(\xi)}{12}(b-a)h^2$，二阶收敛精度

复化 Simpson 公式 $S_n=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}\left[f(x_k)+4f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)+f(x_{k+1})\right]$，四阶收敛精度

p 阶收敛 $\lim_{h\to 0}\frac{I-I_n}{h^p}=C\neq 0$

Romberg 算法 $\frac{I-T_{2n}}{I-T_n}\approx\left(\frac{1}{2}\right)^2,\bar{T}=T_{2n}+(I-T_{2n})$

Richardson 外推 $T_m^{(k)}=\frac{4^m}{4^m-1}T_{m-1}^{(k+1)}-\frac{1}{4^m-1}T_{m-1}^{(k)}$

$$
\begin{array}{lll}
T_0^{(0)} & & \\
T_0^{(1)} & T_1^{(0)} & \\
T_0^{(2)} & T_1^{(1)} & T_2^{(0)}
\end{array}
$$

k 是二分数，m 是加速数。

Guass 公式

Guass 点 x_k 是 Guass 点，对于 $\forall P(x),\deg P(x)\le n$，

$$\int_a^b P(x)\prod_{k=0}^n(x-x_k)\mathrm{d}x=0$$

对应的 A_k 由 $2n+1$ 次代数精度确定。

Guass–Legdendre 公式 $[-1,1]$ 上 Guass 公式 — Legdendre 正交多项式。

余项 $R(x)=\frac{f^{(2n+2)(\xi)}}{(2n+2)!}\int_a^b\left(\prod_{k=0}^n(x-x_k)\right)^2\mathrm{d}x$

6 常微分方程数值解

$$
\begin{cases}
y'=f(x,y)\\
y(x_0)=y_0
\end{cases}
$$

Euler 公式 $y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)$，局部截断误差 $\frac{h^2}{2}y''(x_n)$

后退 Euler 公式 $y_{n+1}=y_n+hf(x_{n+1},y_{n+1})$，局部截断误差 $-\frac{h^2}{2}y''(x_n)$

梯形格式 $y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})]$

改进的 Euler 格式 $y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_n+h,y_n+hf(x_n,y_n))]$

Euler 两步格式 $y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_n+h,y_{n-1}+2hf(x_n,y_n))]$

Taylor 级数法 $y'=f,y''=\frac{\partial f}{\partial x}+f\frac{\partial f}{\partial y},\cdots,y_{n+1}=y_n+hy_n'+\frac{h^2}{2!}y_n''+\cdots$，局部截断误差 $\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}y^{(p+1)}(\xi)$，$p$ 阶精度

Runge-Kutta 方法 二阶 $y_{n+1}=y_n+h(\lambda_1K_1+\lambda_2K_2),K_1=f(x_n,y_n),K_2=f(x_n+ph,y_n+phK_1),\lambda_1+\lambda_2=1,\lambda_2p=\frac{1}{2}$

p 阶精度 局部（一步）$O(h^{p+1})$，全局 $O(h^p)$

稳定性 针对模型问题 $y'=\lambda y,\mathrm{Re}(\lambda)<0$，$|y_{n+1}|\le|y_n|$，Euler 方法条件稳定 $|1+h\lambda|\le 1$，后退 Euler 方法恒稳定。

7 特征值

幂法 $\mathbf{v}_k=\mathbf{A}^k\mathbf{v}_0\approx a_1\lambda_1^k\mathbf{x}_1$，$\lim_{k\to\infty}\frac{(\mathbf{v}_{k+1})_i}{(\mathbf{v}_k)_i}=\lambda_1$

规范化幂法 $\mathbf{v}_k = \mathbf{A}\mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{u}_k = \frac{\mathbf{v}_k}{\max \mathbf{v}_k}, \max(\mathbf{v}_k) \to \lambda_1$

原点平移法 $\mathbf{B} = \mathbf{A} - p\mathbf{E}$

反幂法 $\mathbf{v}_k = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{u}_k = \frac{\mathbf{v}_k}{\max \mathbf{v}_k}, \max \mathbf{v}_k \to \frac{1}{\lambda_n}$，可以先进行三角分解 $\mathbf{PA} = \mathbf{LU}, \mathbf{L}\mathbf{y}_k = \mathbf{P}\mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{U}\mathbf{v}_k = \mathbf{y}_k, \mathbf{u}_k = \frac{\mathbf{v}_k}{\max \mathbf{v}_k}$。

初等反射阵 $\mathbf{H} = \mathbf{E} - 2\mathbf{w}\mathbf{w}^\top$，对称、正交、对合（$\mathbf{H}^2 = \mathbf{E}$）；关于 $\|\mathbf{x}\|_2 = \|\mathbf{y}\|_2$ 的 $\mathbf{Hx} = \mathbf{y}$，$\mathbf{w} = \frac{\mathbf{x}-\mathbf{y}}{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_2}$

QR 分解 任何方阵 $\mathbf{A}$ 可分解为一正交阵 $\mathbf{Q}$ 与上三角阵 $\mathbf{R}$ 的乘积，$\mathbf{A} = \mathbf{QR}$，当 $\mathbf{A}$ 为非奇异矩阵且 $\mathbf{R}$ 对角线皆为正时分解唯一。

$\mathbf{u}_i = (\pm\|\alpha_i\|, 0, \cdots)^\top, \mathbf{H} = \mathbf{E} - 2\mathbf{u}_i\mathbf{u}_i^\top, \mathbf{A}_2 = \mathbf{H}\mathbf{A}_1 \to \mathbf{R}, \mathbf{Q} = \mathbf{H}_1\mathbf{H}_2\cdots$，$\mathbf{H}$ 按照需要左上角补上单位阵。

QR 算法 $\mathbf{A}_k = \mathbf{Q}_k\mathbf{R}_k, \mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{R}_k\mathbf{Q}_k$，$\mathbf{R}_k$ 对角线上为特征值，$\tilde{\mathbf{Q}}_k = \mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_k$ 的列向量为对应的特征向量。如果 $\mathbf{A}$ 对称，则 $\mathbf{A}_k$ 收敛于对角阵。