

计算方法复习

1 绪论

误差

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

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 $a_1 \geq 1$,

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

映射误差

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

2 方程求根

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

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

$$\exists x^* \in [a, b], \forall x_0 \in [a, b], x_{k+1} = \phi(x_k) \rightarrow x^*$$

$$|x_k - x^*| \leq \frac{q^k}{1-q} |x_1 - x_0|$$

$$|x_k - x^*| \leq \frac{q}{1-q} |x_k - x_{k-1}|$$

局部收敛 $\phi \in C^1(O_\delta(x^*)); |\phi'(x^*)| < 1$, 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:

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

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

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

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 Gauss 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 $D_i \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n-1)$, 则 \mathbf{A} 可唯一 Doolittle 分解为 $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$ 。(如果 $1, \dots, n$ 顺序主子式都大于 0 将正定)

Doolittle 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 $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^\top$

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

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 $\forall x \in \mathbf{R}^n : c_1 \|\mathbf{x}\|_s \leq \|\mathbf{x}\|_t \leq c_2 \|\mathbf{x}\|_s$ 。

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

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

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

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 $\text{cond}(\mathbf{A})_v = \|\mathbf{A}^{-1}\|_v \|\mathbf{A}\|_v \geq 1 (\det \mathbf{A} \neq 0)$

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

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

$$\frac{\|\Delta \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \frac{\text{cond}(\mathbf{A}) \frac{\|\Delta \mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}{1 - \text{cond}(\mathbf{A}) \frac{\|\Delta \mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}} \left(\frac{\|\Delta \mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|} + \frac{\|\Delta \mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|} \right)$$

$$(\mathbf{A} + \Delta \mathbf{A})(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}) = \mathbf{b} + \Delta \mathbf{b}$$

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

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: $\|\mathbf{B}\|_v = q < 1$ 或严格对角占优 $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i}^n |a_{ij}|$ (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 $0 < \omega \leq 1$, 则 SOR 收敛。

4 插值与逼近

4.1 插值

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

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

差商

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

Newton 插值

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

$$R_n(x) = f[x, x_0, x_1, \dots, x_n] \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

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

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

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。

三角角、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 $\|f(x) - P(x)\|_\infty = \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - P(x)|$

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 $\|f(x) - P(x)\|_2 = \sqrt{\int_a^b [f(x) - P(x)]^2 dx}$

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 $\{1, x, x^2, \dots\}$ 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 $\{1, x, x^2, \dots\}$ 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)。 $f(x) - P_2^*(x) = \frac{1}{2}T_3(x)$

5 数值积分

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

k 是二分分数, m 是加速数。

Guass 公式

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

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

对应的 A_k 由 $2n+1$ 次代数精度确定。

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

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

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 $y' = f, y'' = \frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial f}{\partial y}, \dots, y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2!}y''_n + \dots$, 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 $y_{n+1} = y_n + h(\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2), K_1 = f(x_n, y_n), K_2 = f(x_n + ph, y_n + phK_1), \lambda_1 + \lambda_2 = 1, \lambda_2 p = \frac{1}{2}$

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 $y' = \lambda y, \text{Re}(\lambda) < 0, |y_{n+1}| \leq |y_n|$, Euler 方法条件稳定 $|1 + h\lambda| \leq 1$, 后退 Euler 方法恒稳定。

7 特征值

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

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

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

反幂法 $\mathbf{v}_k = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{u}_k = \frac{\mathbf{v}_k}{\max \mathbf{v}_k}, \max \mathbf{v}_k \rightarrow \frac{1}{\lambda_n}$, 可以先进行三角分解 $\mathbf{P}(\mathbf{A} - p\mathbf{E}) = \mathbf{LU}$ 。

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 $\mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{y}$, $\mathbf{w} = \frac{\mathbf{x}-\mathbf{y}}{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_2}$

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。

$\mathbf{u}_i = (\pm\|\alpha_i\|, 0, \dots)^\top, \mathbf{H} = \mathbf{E} - 2\mathbf{u}_i\mathbf{u}_i^\top, \mathbf{A}_2 = \mathbf{H}\mathbf{A}_1 \rightarrow \mathbf{R}, \mathbf{Q} = \mathbf{H}_1\mathbf{H}_2 \dots$, \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, $\tilde{\mathbf{Q}}_k = \mathbf{Q}_1 \dots \mathbf{Q}_k$ 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。