数值分析和科学计算引论

- 分析误差：两种都要算
- 模型误差：数学模型和实际问题中的误差
- 观测误差：由观测结果产生的误差
- 截断误差（方法误差）：数值方法近似过程中的误差
- 舍入误差：原始数据在计算机上表示的误差
- x^*是x的近似值，$e^*=x^*-x$称为绝对误差，$e_r^*=e^*/x$为相对误差，上限为绝对误差限和相对误差限
- 若 $x^*=\pm10^m(a_1+a_2\times10^-1+\cdots+a_l\times10^{l-1})$有$n$位有效数字，则 $\epsilon_r^*\le\frac{1}{2a_1}\times10^{-(n-1)}$.如果其具有相对误差限 $\epsilon_r^*\le\frac{1}{2a_1+2}\times10^{-(n-1)}$，则说明$x^*$至少有$n$位有效数字
- 避免产生误差危害的方法：先小后大；避免相近相减；避免交错级数；避免被除数远大于除数；松弛技术

插值法

- 在$a\le x_0<x_1<\cdots<x_n\le b$上点唯一确定一个$n$次多项式插值

Lagrange插值法

- n次Lagrange插值基函数$l_j(x)$满足 $l_j(x_k)=\delta_{kj}$
- $l_k(x)=\prod_{j\neq k}(x-x_j)/\prod_{j\neq k}(x_k-x_j)$
- $\omega_{n+1}(x)=\prod_{j=0}^{n}(x-x_j),\omega'(x_k)=\prod_{j=0,j\neq k}^{n}(x_k-x_j)$
- $l_k(x)=\frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_k)\omega_{n+1}'(x_k)},L_n(x)=\sum y_kl_k(x)$
- $R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\le\frac{M}{(n+1)!}\max\{\omega_{n+1}\}$ 证明$R_n(x)=f(x)-L_n(x)=K(x)\prod(x-x_i)$,$\phi(t)=K(x_0)\prod(t-x_i)-f(t)+L_n(t)$，在节点和$x_0$上为零，使用罗尔定理
- 插值基函数性质：$\sum x_i^kl_i(x)=x^k,\sum(x_i-x)^kl_i(x)=0,\sum l_i(x)=1$
- 计算代价：总体$\mathcal{O}(n^2)$，单步：$\mathcal{O}(n^2)$

Newton插值法

- 一阶均差：$f[x_0,x_k]=\frac{f[x_k]-f[x_0]}{x_k-x_0}$
- 二阶均差：$f[x_0,x_1,x_k]=\frac{f[x_0,x_k]-f[x_0,x_1]}{x_k-x_1}$
- k阶：$f[x_0,\cdots,x_k]=\frac{f[x_0,\cdots,x_{k-2},x_k]-f[x_0,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_{k-1}}$
- $f[x_0,\cdots,x_k]=\sum_{j=0}^k[\frac{f(x_j)}{\prod_{i\neq j,i=0}^k(x_j-x_i)}]$
- 轮转对称性：$f[x_0,\cdots,x_k]=f[Q[x_0,\cdots,x_k]]$
- 若$f(x)$在$[a,b]$上存在n阶导数，$f[x_0,\cdots,x_n]=\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$
- 插值公式$P_n(x)=P_{n-1}(x)+f[x_0,\cdots,x_n]\omega_n(x)$
- 余项$R_n(x)=f[x,x_0,\cdots,x_n]\omega_{n+1}(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$
- 一阶向前差分$\Delta f_k=f_{k+1}-f_k$，向后差分$\nabla f_k=f_k-f_{k-1}$，中心差分$\delta f_k=f_{k+\frac12}-f_{k-\frac12}$
- 位移因子$Ef_k=f_{k+1},\Delta=E-I,\nabla=I-E^{-1}$，可以二项展开，$(a+b)^n=\sum_{i=0}^na^ib^{n-i}\frac{n!}{i!(n-1)!}$
- Newton等间隔（前插）公式，下面h为插值节点间隔
- $P(x_0+th)=\sum_{i=0}^n\frac{\prod_{j=1}^i(t-j+1)}{i!}\Delta^if_0=f_0+t\Delta f_0+\frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2f_0+\cdots+\frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^nf_0$
- 余项 $R_n(x)=t(t-1)\cdots(t-n)h^{n+1}f^{(n+1)}(\xi)/(n+1)!$，t是变量
- 计算代价：总体$\mathcal{O}(n^2)$，单步：$\mathcal{O}(n)$

埃尔米特插值：给定节点和节点上的若干导数

- $R_n(x)=\frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}\prod(x-x_i)^{\alpha_i}$
- α_i 为每个节点上的条件个数，$m=\sum\alpha_i-1$

分段低次插值与三次样条插值,h为区间长度

- 分段线性插值：$|R_n(x)|\le\frac{h^2}{8}M_2$。三次埃尔米特插值：$|R_n(x)|\le\frac{h^4}{384}M_4$（每个点多给出导数，单一区间）
- 三次样条插值：$0\to n$共n+1个点，4n个待定参数。插值函数值，一阶、二阶导数连续（$3n-3$个条件），每个点的函数值（$n+1$个条件），两个边界条件，确定。
- 常见边界条件：1. 给定两端一阶导数；2. 给定两端二阶导数，为零：自然边界条件；3. x_0,x_n处二阶导数，一阶导数相等（再加上原来相等，为周期函数）
- 三次样条误差界：$R^{(k)}(x)=M_4h^{4-k}C_k$对应各阶导数的误差，$C_0=\frac{5}{384},C_1=\frac{1}{24},C_2=\frac38$

函数逼近

- 最小零偏差：函数范数最小
- 向量范数：$\|x\|\ge0,\|x\|=0\iff x=0,\|\alpha x\|=|\alpha|\|x\|,\|x+y\|\le\|x\|+\|y\|$ 当且仅当线性相关取等号
- 内积空间:$|(u,v)|^2\le(u,u)(v,v)$，当且仅当线性相关取等号，$|(u_i,u_j)_{i,j}|\neq0\iff$ 向量组u_*线性无关
- 函数范数$\|f\|_\infty=\max\{|f|\},\|f\|_1=\int_a^b|f|\mathrm{d}x,\|f\|_2=\sqrt{\int_a^bf^2\mathrm{d}x}$，对应函数逼近分别称为（一致）逼近，平方逼近
- 函数带权内积$<f,g>=\int_a^bfg\rho\mathrm{d}x,\rho(x)\ge0$且连续
- 正交函数族：$<\phi_j,\phi_k>=A_i\delta_{ij},A_i=1$则称标准正交
- 施密特正交化方法：从函数族$\{\eta_i\}$中正交化：$\phi_0=\eta_0$ $\phi_n=\eta_n-\sum_{i=0}^{n-1}[\frac{<\eta_n,\phi_i>}{<\phi_i,\phi_i>}\phi_i]$，主要研究多项式函数族

正交多项式性质

- 任何$P(x)\in H_n$可表示为$\{\phi\}_0^n$的线性组合
- $\phi_n(x)$与任何次数小于n的多项式$P(x)\in H_{n-1}$正交
- $\{\phi_x(x)\}$在$[a,b]$上正交,$\phi_0=1,\phi_{-1}=0\Rightarrow$ $\phi_{n+1}=(x-\alpha_n)\phi_n(x)-\beta_n\phi_{n-1}x$。证明思路：$x\phi_n$正交化，并从积分上分析$(x\phi_n,\phi_{n-1})=(\phi_n,x\phi_{n-1})=(\phi_n,\phi_n),(x\phi_n,\phi_i)=(\phi_n,x\phi_i)=0,i<n-1$
- $\{\phi\}_0^n$正交，则ϕ_n在区间上有n个不同的零点。证明思路将所有零点补成偶数重，则内积大于零（正定），反证法。

最佳平方逼近，Legendre多项式：$\widetilde{P_n}$是首一的

- 带权$\rho=1,[-1,1]$正交，$P_0=1;P_n=\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\frac{(x^2-1)^n}{2^nn!}$; $(P_n,P_m)=\frac{2}{2n+1}\delta_{m,n};P_n(-x)=-1^nP_n(x);\widetilde{P_n}=\frac{n!}{(2n)!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n;(n+1)P_{n+1}=(2n+1)xP_n-nP_{n-1}$
- $P_2=\frac{3x^2-1}{2},P_3=\frac{5x^3-3x}{2},P_4=\frac{35x^4-30x^2+3}{8}$
- 正交函数最佳平方逼近，$a_k=\frac{(f,\phi_k)}{(\phi_k,\phi_k)},f\approx P^*=\sum a_k\phi_k$，余项最低次为$n+1$。$\widetilde{P_n}$是$\widetilde{H_n}$中平方范数最低的
- 对线性无关非正交多项式函数组做逼近：求n元方程$\sum_j(\psi_i,\psi_j)a_j=(\psi_i,f),f\approx S=\sum a_i\psi_i$,最小偏差表达式：$(f,f)-(S,f)$

最佳一致逼近，Chebyshev多项式，$\widetilde{T_n}$是首一的

- 带权$\rho=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$正交：$T_n(x)=\cos(n\arccos(x)),x\in[-1,1],T_{n+1}=2xT_n-T_{n-1},(T_m,T_n)=\frac{\pi}{2}\delta_{m,n}(m\neq0)=\pi(m=n=0);P_n(-x)=-1^nP_n(x)$；零点位置：$x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi k=1,\cdots,n$；$T_n$首项系数$2^{n-1}$
- $\forall P\in\widetilde{H_n},\|T_n\|_\infty\le\|P\|_\infty$，求取低一次的一致逼近多项式$P*=P-a_1\widetilde{T_n}$，$a_1$是$P$首项系数。
- Chebyshev多项式插值：采用T_{n+1}零点作为n次插值多项式的节点，$\|f-L_n\|_\infty\le\frac{M_{n+1}}{2^n(n+1)!}$
- 最佳一致逼近：$\Delta(f,P_n)=\|f-P_n\|_\infty$偏差点$|f-P_n|_{x_0}=\Delta(f,P_n)$，正偏差点$f-P_n=-\Delta(f,P_n)$，负偏差点$f-P_n=\Delta(f,P_n)$
- 最佳一致逼近多项式总存在。Chebyshev定理：P_n^*是最佳一致逼近，则在f上至少有$n+2$个正负相间的偏差点；当不合理的时候可能有更多。
- $T_2=2x^2-1,T_3=4x^3-3x,T_4=8x^4-8x^2+1,T_5=16x^5-20x^3+5x,T_6=32x^6-48x^4+18x^2-1$
- $\widetilde{T_n}$是首一同次多项式中无穷范数最低的

曲线拟合和最小二乘

- 离散空间带权ω内积:$(f,\phi)=\sum\omega(x_i)\phi(x_i)f(x_i)$
- 函数组在区间线性相关$\Rightarrow$函数在若干点上线性相关（存在某个线性组合使得在某些点上线性组合为0
- H_n函数在$n+1$个点上线性相关$\Rightarrow$函数组线性相关

数值积分与数值微分

- 梯形公式：$\int_a^bf\mathrm{d}x\approx\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$，中矩形公式：$I\approx(b-a)f(\frac{a+b}{2})$，机械求积公式：$I=\sum A_kf(x_k)$，$A_k$成为求积系数或权，仅与$x_k$有关。$\sum A_k=1$
- 代数精度：求积公式对不超过m次多项式均成立，对$m+1$次不成立，则称m次代数精度，常用非线性相关多项式族x^n进行测试
- 机械求积公式选取$x_0,\cdots,x_m$共$m+1$个点至少保证m次代数精度（强行解方程可得），此时系数唯一
- 插值型求积公式：$\int L_n=\int(\sum f_kl_k)=\sum f_k\int l_k$ $A_k=\int l_k$，与n次代数精度等价（n次代数精度$\to$ A_k唯一$\to$ $I=\sum A_kf_k\to\int l_k=\sum A_kf_k=A_k$（利用$l_k(x_j)=\delta_{j,k}$
- 余项$R[f]=\int R_n=\int\frac{f^{n+1}}{(n+1)!}\omega_{n+1}\overset{\text{中值定理}}{=}Kf^{n+1}$。推广对于$m$次代数精度的求积式，$R[f]=Kf^{(m+1)}$,$K$由对$f=x^{m+1}$求积（$f^{(m+1)}=\text{const.}$）定量求得（形式必为$R[f]=k(b-a)^{m+2}M_{m+1}$，因此可以在$[0,1]$下计算器求解）。对梯形公式：$m=1,R[f]\le\frac{(b-a)^3}{12}M_2$，中矩形公式：$m=1,R[f]\le\frac{(b-a)^3}{24}M_2$
- 收敛性：h区间足够小趋近真值。稳定性：f有误差$\tilde{f}$误差不放大$\to\forall k,A_k>0$，插值型积分公式不一定稳定
- Newton-柯特斯公式:积分区间等距取点的插值型机械求积公式，辛普森公式（$n=2$）：$S=\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)],R[f]<\frac{(b-a)^5}{180*16}M_4$，柯特斯公式（$n=4$）：$S=\frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)],R[f]<\frac{(b-a)^7}{945*2048}M_6$，$n=8$，积分公式不稳定,出现误差放大，放大倍数为$\sum|A_k|>\sum A_k=1$，$n$为偶数时，代数精度为$n+1$，为奇数时为$n$（采用中值定理时通过埃尔米特插值方法保证其他项不变号）

复合求积公式和Romberg 求积公式

- 复合梯形 $T_n=\frac{h}{2}[f(a)+2\sum f(x_k)+f(b)],R_n[f]=\frac{b-a}{12}h^2M_2$
- 复合Simpson $S_n=\frac{h}{6}[f(a)+4\sum f(x_{k+\frac12})+2\sum f(x_k)+f(b)],R_n[f]=-\frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4M_4$
- 梯形公式递推：$T_{2n}=\frac{T_n}{2}+\frac{h}{2}\sum f(x_k+\frac12)$
- Richardson外推加速法：$T(h)=I+\alpha h^2+\cdots$，利用$T(h),T(\frac{h}{2})$消除h^2项得到$S(h)$。逐渐外推加速。递推公式$T_m(h)=\frac{4^m}{4^m-1}T_{m-1}(\frac{h}{2})-\frac{T_{m-1}(h)}{4^m-1}$
- Romberg 求积算法：1. 取$k=0,h=b-a,T_0=\frac{h}{2}[f(a)+f(b)]$ 2. 加速求T，包括一个梯形值$T_0(\frac{b-a}{2^k})$，到达给定精度结束。h越小代表复化程度越高，阶次越高代表求积越复杂。

Gauss求积公式

- 求取A_k,x_k使得机械求积有$2n+1$次精度（正好全部满足）。充要条件：x_k是$n+1$次带权正交多项式的零点：证明思路：前n次说明A_k取值为插值型，后$n+1-2n+1$次对应导数为$x\cdots x_n$带权内积为0，说明高一次正交。积分权重全部是正的$\int l_k^2$可以准确得到，即$\sum A_il_k^2=A_k>0$
- Gauss-Legendre求积：Legendre多项式零点。$\int_{-1}^1f=2f(0)=f(-\frac{1}{\sqrt3})+f(-\frac{1}{\sqrt3})=\frac59f(-\frac{\sqrt{15}}{5})+\frac89f(0)+\frac59f(\frac{\sqrt{15}}{5}),R_n[f]=\frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3}M_{2n+2}$
- Gauss-Chebyshev求积：$\int_{-1}^1\frac{f}{\sqrt{1-x^2}}=\frac{\pi}{n}\sum f(x_k),x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi,1\le k\le n$
- 多重积分：从外向内定参数积分，反复求积，计算量较大

数值微分

- 中点方法 $G(h)=\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h},|f'(a)-G(h)|\le\frac{h^2}{6}M_3$，可以外推加速，但是要对余项进行分析。$G_m(h)=\frac{4^mG_{m-1}(\frac{h}{2})-G_{m-1}(h)}{4^m-1}$
- 插值方法：$f'\approx P'$，求导数的点就在某个节点上，$R=R_n'\le\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\omega_{n+1}'$，其中一点方法为直接求斜率，余项$\frac{h}{2}f''$，三点方法对中间一点直接为中点公式，中间一个点没参与计算。

非线性方程与方程组的数值解法

- 不动点迭代法：$f(x)=0\to\phi(x)=x$迭代。不动点存在条件为$\exists a,b\forall x\in[a,b].a\le\phi(x)\le b,\exists L<1,s.t.|\phi(x)-\phi(y)|\le L|x-y|,|\phi(x)'|<1$
- 序列误差估计$x_k-x^*\le\frac{L^k}{1-L}|x_1-x_0|,e_k=x_k-x*,\lim_{k\to\infty}\frac{e_{k+1}}{e_k^p}=C\neq0$则称$p$阶收敛，$p=1$线性收敛，$p=2$平方收敛，$p>1$超线性收敛
- 迭代法局部收敛：存在邻域R使得$|\phi(x)|<1$，需要选取初始点
- 若$\phi^{(p-1)}(x^*)=0,\phi^{(p)}(x^*)\neq0$，后者连续，则$p$阶收敛

Newton法及其衍生方法

- Newton法：$\psi(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}$，平方收敛速度
- $\psi'(x)=\frac{ff''}{(f')^2},\phi''(x^*)=\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}$
- Newton下山法：下山条件$|f_{k+1}<f_k|,\psi(x)=x-\lambda\frac{f}{f'}$从$\lambda=1$开始试算，直到满足下山条件
- 简化Newton法：$\psi=x-\frac{f(x)}{f'(x_0)}$，线性速度
- 出现m重根时，普通Newton法变为一次收敛，$\psi=x-\frac{f}{f'},\psi=x-\frac{ff'}{(f')^2-ff''}$二阶收敛。

- 弦截法：$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$，$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$阶收敛，抛物线法：1.840阶收敛

常微分方程初值问题的数值解法

线性单步法

- 满足L.条件的微分方程误差传播$|y(x, x_0) - y(x, \widetilde{x_0}| \leq \exp(L|x_0 - \widetilde{x_0}|)|x_0 - \widetilde{(}x_0)|$，数值计算过程中等距取点迭代计算，$y(x_{n+1} = y(x_n) + h\psi, y' = f(x, y)$
- 局部截断误差$y - \widetilde{y} = \mathcal{O}(h^{p+1})$，称为$p$阶精度，其$h^{p+1}$对应主项为阶段误差主项
- 欧拉法：$\psi = y'(x_n)$，1阶局部误差精度；向后欧拉法（隐式）：$\psi = y'(x_{n+1})$，一阶局部误差精度；梯形方法（隐式）：$\psi = \frac{y'(x_n) + y'(x_{n+1})}{2}$2阶局部误差精度；改进欧拉法：$\psi = f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \overline{y_{n+1}}), \overline{y_{n+1}} = y_n + hf(x_n, y_n)$2阶局部误差精度。隐式方法需要通过迭代确定未知值
- Runge-Kutta方法：局部线性积分$\psi = \frac{1}{r}\sum_{i=1}^{r} C_i K_i$，

$K_i = f(x_n + \lambda_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{i} \mu_{ij} K_j)$，具体数值不唯一

- 总体误差：对局部精度为p的，$y(x_n) - y_n = \mathcal{O}(h^p)$（精度累计降低一次）
- 高阶方程组：处理成一阶状态方程的形式

线性多步法

- $G(x) = f(x, y(x)), y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x^{n+1}} G(x)$ 积分过程，$G(x)$通过前面得到的点插值得到
- 显性公式（用于预测）一般形式：$\psi = \sum \beta_{mi} f_{n-i}$
β_{mi}是标准化m次插值基函数积分值
- 隐性公式（用于矫正：将采样点包括了即将计算的点）$\psi = \sum \beta_{mi} f_{n-i+1}$
- 局部截断误差相当于积分误差

解线性方程组的直接解法

- L的逆矩阵仍是L矩阵，因此LU分解唯一
- 直接方法：适用于低阶矩阵，迭代方法：适用于高阶矩阵
- 矩阵$\boldsymbol{A}$的特征值组合成为$\boldsymbol{A}$的谱$\sigma(\boldsymbol{A})$，特征值绝对值的最大值称为其谱半径$\rho(\boldsymbol{A})$
- 矩阵范数：基本要求：$\|\boldsymbol{A}\| \geq 0, \|\boldsymbol{A}\| = 0 \iff A = 0, \|c\boldsymbol{A}\| = |c|\|\boldsymbol{A}\|, \|\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}\| = \|\boldsymbol{A}\| + \|\boldsymbol{B}\|, \|\boldsymbol{AB}\| = \|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{B}\|$
- 算子范数：结合向量范数给出，$\|\boldsymbol{A}\|_v \triangleq \max \frac{\|\boldsymbol{A}x\|_v}{\|x\|_v}$
- $\|\boldsymbol{A}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_j |a_{ij}|$，最大的行的绝对值的和
- $\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_i |a_{ij}|$，最大的列的绝对值的和
- $\|\boldsymbol{A}\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})}$，最大的特征值的平方根
- 向量范数连续。$\forall s, t \exists c_1, c_2, c_1\|x\|_s \leq \|x\|_t \leq c_2\|x\|_s$
- $\rho(\boldsymbol{A}) \leq \|\boldsymbol{A}\|. \forall \epsilon, \exists(\|\cdot\|_\epsilon), \|\boldsymbol{A}\|_\epsilon \leq \rho(\boldsymbol{A}) + \epsilon$，证明谱半径关系可以通过范数来计算
- $\|\boldsymbol{A}x\|_v \leq \|\boldsymbol{A}\|_v\|x\|_v . \boldsymbol{A}^T = A \Rightarrow \|\boldsymbol{A}\|_2 = \rho(\boldsymbol{A})$
- $\|\boldsymbol{B}\| \leq 1 \Rightarrow |\boldsymbol{I} \pm \boldsymbol{B}| \neq 0, (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B})^{-1} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{B}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B})^{-1} \Rightarrow \|(\boldsymbol{I} \pm \boldsymbol{B})^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|\boldsymbol{B}\|}$
- 矩阵条件数：$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})_v = \|\boldsymbol{A}^{-1}\|_v\|\boldsymbol{A}\| \geq \|\boldsymbol{I}\|_v = 1$
- $\mathrm{cond}(c\boldsymbol{A})_v = \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})_v; \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T \to \mathrm{cond}(A)_2 = |\lambda_1/\lambda_n|; \boldsymbol{AA}^T = \boldsymbol{I} \to \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})_2 = 1, \mathrm{cond}(\boldsymbol{AB}) = \mathrm{cond}(\boldsymbol{BA}) = \mathrm{cond}(\boldsymbol{B})$

LU分解和P-LU分解

- 手算过程中常常采用初等行变换方法得到U, L^{-1}，需要对右侧矩阵求逆：对角线为1的三角阵求逆即是将其他元素取相反数
- LU 分解唯一，PLU分解不一定唯一，LU分解要求各阶顺序主子式非零，P-LU分解要求矩阵非奇异
- 回代消元法计算代价$\frac{n^3}{3} - n^2 - \frac{n}{3}$次乘除，$\frac{n^3}{3} - n^2 - \frac{n}{3}$次加减
- P-LU 分解复杂度$\mathcal{O}(\frac{n^3}{3})$，平方根法计算复杂度$\mathcal{O}(\frac{n^3}{6})$
- 平方根法：$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T \Rightarrow \boldsymbol{A} = \boldsymbol{LDL}_T = \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{L}_1^T$

误差分析

- $\boldsymbol{A}(x + \delta x) = (b + \delta b) \Rightarrow \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$
- $(\boldsymbol{A} + \delta\boldsymbol{A})(x + \delta x) = b \Rightarrow \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})\frac{\|\delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}}{1 - \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})\frac{\|\delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}}$
- 近似：$(\boldsymbol{A} + \delta\boldsymbol{A})(x + \delta x) = (b + \delta b) \Rightarrow \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})(\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|})$
- 事后估计法：得到$\widetilde{x}$，$\frac{\|\widetilde{x} - x^*\|}{\|x^*\|} \leq \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})\frac{\|b - \boldsymbol{A}\widetilde{x}\|}{\|b\|}$

解线性方程组的迭代法

- 矩阵收敛：$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{A} \iff \lim_{k\to\infty} \|\boldsymbol{A}_k - \boldsymbol{A}\| = 0, \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{A}_k = 0 \iff \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{A}_k x = 0, \forall x \in \mathbb{R}^n$
- 迭代法基本形式：$x = \boldsymbol{B}x + f \iff \boldsymbol{A}x = b$，收敛条件$\rho(\boldsymbol{B}) < 1$
- 可以采用$\rho(\boldsymbol{B}) \leq \|\boldsymbol{B}\|_v < 1$的任意从属范数来证明，$\lim_{k\to\infty} \|\boldsymbol{B}^k\|^{1/k} = \rho(\boldsymbol{B})$
- $\|\boldsymbol{B}\|_v = q < 1 \Rightarrow \|x^* - x^{(k)}\|_v \leq q^k\|x^* - x^0\|_v$
$\|x^* - x^{(k)}\|_v \leq \frac{q\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|_v}{1-q} \leq \frac{q^k\|x^1 - x^0\|_v}{1-q}$
如果精度取到$\sigma = 10^{-s}$迭代次数$K \geq \frac{s \ln 10}{-\ln \rho(\boldsymbol{B})}$
- 平均收敛速度$R_k(\boldsymbol{B}) = -\ln(\|\boldsymbol{B}\|_v^{1/k})$，渐进收敛速度$R(\boldsymbol{B}) = -\ln \rho(\boldsymbol{B}) = \lim_{k\to\infty} R_k(\boldsymbol{B})$

Jacobi和Gauss-Seidel迭代法：$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{L} - \boldsymbol{U}$

- Jacobi迭代法：$\boldsymbol{D}x = (\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})x + b \Rightarrow$
$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}) = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{J}$
- Gauss-Seidel迭代法：$(\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})x = \boldsymbol{U}x + b \Rightarrow$
$\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I} - (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{G}$
- 收敛性：$\rho(\boldsymbol{J}) < 1, \rho(\boldsymbol{G}) < 1$
- 严格对角占优矩阵：对角线的绝对值大于同行其他元素绝对值的和，弱对角占优矩阵：大于等于
- 可约矩阵：$\exists\boldsymbol{P}$s.t.$\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{AP} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_{22} \end{pmatrix}$，则$\boldsymbol{A}$可约
- 严格对角占优矩阵和不可约弱对角占优矩阵Jacobi方法和Gauss-Seidel方法收敛（使用无穷范数代替谱半径证明）
- 若$\boldsymbol{A}$正定对称，Gauss-Seidel方法收敛，若$2\boldsymbol{D} - \boldsymbol{A}$同时正定，Jacobi方法收敛
- 直觉上来看，Gauss-Seidel方法的谱半径更小（参考无穷范数），但是实际上不一定，两种方法均有对方收敛和自己不收敛的情况

逐次超松弛迭代法（SOR）

- 对Gauss-Seidel方法加速：$x^{(k+1)} = \boldsymbol{D}^{-1}[b - \boldsymbol{L}x^{(k+1)} - \boldsymbol{U}x^{(k)}] = x^{(k)} + \boldsymbol{D}^{(-1)}[b - \boldsymbol{L}x^{(k+1)} - (\boldsymbol{D} + \boldsymbol{U})x^{(k)}]$，通过对G-S的$x^{(k+1)}$和$x^{(k)}$加权得到下一个值
- $x^{(k+1)} = \omega x^{(k+1)} + (1 - \omega x^{(k)}) = \boldsymbol{L}_\omega x^{(k)} + f, \boldsymbol{L}_\omega = (\boldsymbol{D} + \omega\boldsymbol{L})^{-1}[(1 - \omega)\boldsymbol{D} - \omega\boldsymbol{U}]$
- 收敛必要条件：$0 < \omega < 2$，证明思路：$\rho(\boldsymbol{B}) < 1 \Rightarrow |\det\boldsymbol{B}| < 1$
- $\boldsymbol{A}$正定对称且$0 < \omega < 2$，则SOR收敛
- 舍入误差分析：$\|\delta_{k+1}\| \leq \|\boldsymbol{B}\|\|\delta_k\| + \|\Delta\|$，$\|\Delta\|$为存储误差

矩阵的特征值计算

- $\boldsymbol{A}$的每个特征值必然在下面的某个圆盘之中：$|\lambda - a_{ii}| \leq r_i = \sum_{i \neq j} a_{ij}$。换言之，$\boldsymbol{A}$的特征值在上述圆盘的并集中
- 上述圆盘如果存在m个圆盘孤立于其他的圆盘，则必然这个区间内有m个特征值，特殊地，如果有一个孤立的圆盘，则其中必然仅有一个特征值，如果$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，则此时该特征值必然为实数
- $\mu = \lambda(\boldsymbol{A} + \delta(\boldsymbol{A})) \in \mathbb{R}^{n\times n}, \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{AP} = \boldsymbol{D}$则$\min_{\lambda\in\sigma(\boldsymbol{A})} |\lambda - \mu| \leq \mathrm{cond}(\boldsymbol{P})_p\|\delta(\boldsymbol{A})\|_p$

幂法和反幂法

- 幂法：迭代$v^{k+1} = \boldsymbol{A}v^k$之后得到$\lim_{k\to\infty} \frac{v_{k+1}}{v_k} = \lambda_1$
- 幂法计算流程：随机取u_0 $\to$计算$v_1 = \boldsymbol{A}u_0, u_1 = \frac{v_1}{\max(v_1)}$不断计算，最终$\lambda_1 = \frac{v_{k+1}}{u_k} = \lim_{k\to\infty} \max(v_k)$，收敛速度$|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}|$确定
- 对于重根，幂法最终得到的特征值是正确的，对应的特征向量u_k可能随初始值选取的不同出现不同结果
- 问题：只能求解最大的。原点平移方式$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} - c\boldsymbol{I}$可以改进速度，并求取最大的和最小的特征值
- Rayleigh商加速：求取$\frac{(\boldsymbol{A}u_k, u_k)}{(u_k, u_k)}$来获得最后的特征值，有更高的精度（余项$\mathcal{O}(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}^2)$，相比于之前的速度高一次）
- 反幂法：计算按模最小的特征值和对应的特征向量，在已知近似特征值的情况下可以通过此方法得到有效的精确值
- 迭代方法：u_0随机，$v_k = \boldsymbol{A}^{-1}u_{k-1}, u_k = \frac{v_k}{\max v_k}$
$\frac{1}{\lambda_n} = \lim_{k\to\infty} \max v_k$
- 收敛速度：$|\frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}}|$，原点平移之后为$|\frac{\lambda_n - p}{\lambda_{n-1} - p}|$
- Rayleigh商加速仍然可以提高最后一次计算的精度，一般事先现将$\boldsymbol{A}$LU分解方便之后求方程

正交变换和矩阵分解，QR方法

- Householder 变换：$\omega^T\omega = 1, \boldsymbol{H}(\omega) = \boldsymbol{I} - 2\omega\omega^T$构成反射矩阵，正交对称，$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}^T = \boldsymbol{H}^{-1}, \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T \to \boldsymbol{HAH}$对称
- $\|x\|_2 = \|y\|_2 \Rightarrow \exists\boldsymbol{H}, \boldsymbol{H}x = y$，可以将任意一个向量约化到坐标轴上，其中$u = x - y, \boldsymbol{H} = \boldsymbol{I} - 2\frac{uu^T}{(u, u)}$
- Givens变换：两轴上的一个旋转变换，可以将任意两轴上(x_i, x_j)旋转到$(\sqrt{x_i^2 + x_j^2}, 0)$，$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$
- QR分解定理和实舒尔分解：$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}, \boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{AQ} = \boldsymbol{U}_{\boldsymbol{R}}$其中一阶$\boldsymbol{R}_{ii}$是一阶特征值，二阶$\boldsymbol{R}_{ii}$特征值$\boldsymbol{A}$共轭特征值
- QR方法：迭代过程：$\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{R}_k, \boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{R}_k\boldsymbol{Q}_k \Rightarrow \boldsymbol{A}_k\boldsymbol{Q}_k = \boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{A}_{k+1} \Rightarrow \boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{Q}_k^T\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{Q}_k$
- 收敛：若$\boldsymbol{A}$特征值满足$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$，可以对角化成标准型$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{XDX}^{-1}$，$\boldsymbol{X}$可以LU分解，则$\{\boldsymbol{A}_k\}$本质上收敛于上三角矩阵，$\lim_{k\to\infty} a_{ii}^k = \lambda_i, a_{ij, i\neq j} = 0$
- 原点位移法：$\boldsymbol{A}_k - s_k\boldsymbol{I} = \boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{R}_k, \boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{R}_k\boldsymbol{Q}_k + s_k\boldsymbol{I}$，调整每一步的$s_k$使得收敛率$|\frac{\lambda_n - s_k}{\lambda_{n-1} - s_k}|$尽可能小
- 给定原点位移为一个特征值μ的上海森伯格矩阵（带一个下副对角线的上三角矩阵）进行一次原点位移QR分解之后$h_{n,n-1} = 0, h_{nn} = \mu$（单步QR方法）

补充材料

Newton法误差的精确分析

原则上$e_{n+1} \leq \psi'(x)e_n + \Delta$，在精度足够高的情况下$\psi'(x) \approx \psi(x^*) = 0, e_{n+1} = \Delta$。然而手算不能这么算。非线性方程求根，$x_{n+1} - x^* = \psi(x_n) - \psi(x^*) \Rightarrow e_{n+1} = \psi'(x^*)e_n + \cdots + \frac{\psi^{(m)}e_n^m}{m!}$
对于Newton法，变为$e_{n+1} = \frac{\psi''(\xi)e_n^2}{2}$，选取初始区间$[x^* - \delta, x^* + \delta]$，可以得到$M_2$，则$\frac{M_2}{2}|e_{n+1}| \leq \frac{M_2|e_n|^2}{2} \leq [\frac{M_2}{2}|e_0|]^{2^{n+1}}$这里$n$不足够大因此$e_{n+1} \neq 0$。当$\frac{M_2}{2}|e_0| < 1$，相当于$|\psi'| < 1$的条件。

Romberg 方法相关补充

$T_m(h)$为某个复化算法分割h长度的效果m为其阶数，Richardson消去得到前面写的式子$T_m(h) = \frac{4^m}{4^m - 1}T_{m-1}(\frac{h}{2}) - \frac{T_{m-1}(h)}{4^m - 1}$，分析表如下所示，阶次越高（向右）区间误差越小，分割越小（向下）区间长度越小。（牛顿均差的表跟这个的结构是一样的）

利用积分公式求解微分公式

$\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} f' = f(x_{k+1}) - f(x_{k-1})$，利用机械求积公式写成$I = \sum A_k f_k'$的形式反向求线性方程组，如果使用中矩形公式则可以直接求取，效果等同于中点公式。中间差商公式可以采用Richardson外推加速进行加速，$G(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \alpha h^2 + \mathcal{O}(h^4)$，得到$G_1(h) = \frac{4}{3}G_0(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}G_0(h)$

改进欧拉法和欧拉法的累积误差分析

方法单步误差：$\frac{h^2}{2}y(2)(\xi)$。记$M \geq |\frac{\partial f}{\partial y}(x, y)|, L \geq y^{(2)}(\xi)$，方法误差传播：$\Delta_{n+1} = (1 + h\frac{\partial f}{\partial y}(x_n, y_n))\Delta_n + \frac{h^2}{2}y^{(2)}(\xi)$，配参数可以得到$\Delta_{n+1} + \frac{Lh^2}{2hM} \leq (1 + hM)(\Delta_n + \frac{Lh^2}{2hM}) \leq (1 + hM)^{n+1}\frac{Lh^2}{2hM}$
对欧拉法，如果考虑存储误差为$\Delta = \frac{10^{-m}}{2}$，存储误差同上得到$\delta_{n+1} \leq (1 + hM)\delta_n + \Delta$。变换得到$\delta_{n+1} + \frac{10^{-m}}{2hM} \leq (1 + hM)(\delta_n + \frac{10^{-m}}{2hM}) \leq (1 + hM)^{n+1}\frac{10^{-m}}{2hM}$。上述方法误差和存储误差没有联合分析，联合分析相对更加复杂。
改进欧拉法：方法累计误差$\overline{\Delta_{n+1}} \leq (1 + hM)\Delta_n + \frac{Lh^2}{2}, \Delta_{n+1} \leq \Delta_n + \frac{hM\Delta_n}{2} + \frac{hM\overline{\Delta_{n+1}}}{2} + \frac{Th^3}{12}$，其中$T \geq y^{(3)}$
$\Rightarrow \Delta_{n+1} \leq (1 + hM + \frac{h^2M^2}{2})\Delta_n + (\frac{LM}{4} + \frac{T}{12})h^3$
舍入累计误差：$\overline{\delta_{n+1}} \leq (1 + hM)\delta_n + \Delta, \delta_{n+1} \leq \delta_n + \frac{hM\delta_n}{2} + \frac{hM\delta_{n+1}}{2} + \Delta$
$\Rightarrow \delta_{n+1} \leq (1 + hM + \frac{h^2M^2}{2})\delta_n + (1 + \frac{hM}{2}\Delta)$

直接LU分解法

- $u_{1i} = a_{1i}, l_{i1} = a_{i1}/u_{11}; u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk}u_{ki}$
- $l_{ir} = (a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik}u_{kr})/u_{rr}$
- $y_1 = b_1, y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}y_k$
- $x_n = y_n/u_{nn}, x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik}x_k)/u_{ii}$

追赶法：求解三对角矩阵

- 要求$|b_1| > |c_1| > 0, |b_n| > |a_n| > 0, |b_i| \geq |a_i| + |c_i|$
- 追：$\beta_1 = c_1/b_1, \beta_i = c_i/(b_i - a_i\beta_{i-1})$
- 追：$y_1 = f_1/b_1, y_i = (f_i - a_iy_{i-1})/(b_i - a_i\beta_{i-1})$
- 赶：$x_n = y_n, x_i = y_i - \beta_ix_{i+1}$
- $\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & \\ a_1 & b_2 & c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & \\ r_2 & \alpha_2 & \\ & r_3 & \alpha_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & \\ & 1 & \beta_2 \end{pmatrix}$