计算方法知识点整理 by gMr

第一章 绪论

误差的度量及传播

- **绝对误差** e

  $e(x^*) = x^* - x$ （**近似值** 减去 **真值**）

- **绝对误差限** ε **（误差）**

  $|e(x^*)| \le \varepsilon$

  $x = x^* \pm \varepsilon$

- **相对误差** e_r

  $e_r(x^*) = \dfrac{x^* - x}{x} = \dfrac{e(x^*)}{x}$

  当 x^* 为 **较好近似** 时，也可用公式 $e_r(x^*) = \dfrac{x^* - x}{x^*} = \dfrac{e(x^*)}{x^*}$

  > 意思是分母既可以是近似值也可以是真值，后面貌似以近似值为主

- **相对误差限** ε_r

  $\varepsilon_r(x^*) = \dfrac{\varepsilon(x^*)}{|x^*|}$

- **有效数字**

  若近似值 $x^* = \pm 10^m \times 0.a_1a_2\cdots a_n\cdots a_p$

  称 m 为其 **量级**

  使得 $|x^* - x| \le \dfrac{1}{2} \times 10^{m-n}$ 满足的最大整数 n 称为 **有效数字的位数**，若 $n = p$，认为 x^* 为有效数

  因此可以概括出以下结论：

  有效数的末尾数字所在位置的单位一半是绝对误差限

  有效数第一个非零数开始的位数个数是有效数字的位数

- **绝对误差的传播**

  $e(y^*) = \sum\limits_{i=1}^{n} \dfrac{\partial f}{\partial x_i}(x_1^*, x_2^*\cdots, x_n^*) \cdot e(x_i^*)$

- **绝对误差限的传播**

  $$|e(y^*)| = |\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1^*, x_2^*\cdots, x_n^*) \cdot e(x_i^*)|$$

  $$\le \sum_{i=1}^{n} |\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1^*, x_2^*\cdots, x_n^*)| \cdot |e(x_i^*)|$$

  $$\le \sum_{i=1}^{n} |\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1^*, x_2^*\cdots, x_n^*)| \cdot \varepsilon(x_i^*)$$

  $$\implies \varepsilon(y^*) = \sum_{i=1}^{n} |\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1^*, x_2^*\cdots, x_n^*)| \cdot \varepsilon(x_i^*)$$

- **相对误差的传播**

$$e_r(y^*) = \frac{1}{y^*}\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1^*, x_2^* \cdots, x_n^*) \cdot x_i^* \cdot e_r(x_i^*)$$

- **相对误差限的传播**

  $$\varepsilon_r(y^*) = \frac{1}{|y^*|}\sum_{i=1}^{n}|\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1^*, x_2^* \cdots, x_n^*)| \cdot |x_i^*| \cdot \varepsilon_r(x_i^*)$$

  > 这俩误差限的绝对值也太多了吧，我思考了半天才想明白，还是记住绝对误差和相对误差两个公式然后不等式现推吧。

> 现在看来这章考的很少啊，，，

算法设计原则

- **避免 相近数相减**
- **避免 大数加小数**
- **避免 大数除小数**

第二章 非线性方程数值解法

二分法

- **方法**

  这个学过算法里的二分都会吧。

  在区间 $[a_1, b_1]$ 上，$f(a_1)f(b_1) < 0$ ，令 $x_1 = \frac{a_1 + b_1}{2}$ 根据 $f(a_1)f(x_1)$ 的正负性，确定新的区间 $[a_2, b_2]$ 为 $[a_1, x_1]$ 还是 $[x_1, b_1]$ ，显然每次范围缩小一半

- **收敛准则**

  若 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续，且 $f(a)f(b) < 0$ ，由二分法产生的序列收敛于 x^* ，有误差估计
  $|x_k - x^*| \leq \frac{1}{2^k}(b-a)(k = 1, 2, \cdots)$

  若给定绝对误差限为 ε ，要求 $|x_k - x^*| \leq \varepsilon$ ，只需 $\frac{1}{2^k}(b-a) \leq \varepsilon$

  求得 $k \geq \log_2(\frac{b-a}{\varepsilon}) = \frac{\ln(b-a) - \ln(\varepsilon)}{\ln 2}$

简单迭代法

- **方法**

  在 $[a, b]$ 上将方程等价变形为 $x = \varphi(x)$ ，选取 x_0 作为初始近似值，用以下迭代公式：

  $x_{k+1} = \varphi(x_k)(k = 0, 1, 2, \cdots)$

  建立序列 $\{x_k\}_{k=0}^{+\infty}$ ，如果有 $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = x^*$ ，并且迭代函数在 x^* 邻域内连续，对迭代公式取极限，得：

  $x^* = \varphi(x^*)$ ，即为原方程的根。

- **全局收敛定理**

  $\varphi(x)$ 在 $[a, b]$ 上具有一阶连续导函数，且满足：

  1. 对任意 $x \in [a, b], \varphi(x) \in [a, b]$
  2. 存在常数 $L : 0 < L < 1$ ，使得对任意 $x \in [a, b], |\varphi'(x)| \leq L$

则

1. 方程在 $[a,b]$ 上有唯一实根 x^*
2. 对任意 x_0 迭代公式收敛且收敛于 x^*
3. 迭代公式有误差估计

   $$|x_k - x^*| \le \frac{L}{1-L}|x_k - x_{k-1}|$$

   $$|x_k - x^*| \le \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0|$$

   前者为 **后延误差估计** ，后者为 **先验误差估计**
4. $\lim\limits_{k\to+\infty} \dfrac{x_{k+1}-x^*}{x_k - x^*} = \varphi'(x^*)$

> 证明书上有，挺好玩的

- **局部收敛定理**

  设存在方程 $x=\varphi(x)$ 根 x^* 的闭邻域 $U(x^*,\delta)=[x^*-\delta, x^*+\delta]$ 中 $\varphi'(x)$ 连续且 $|\varphi'(x)| \le L < 1$ ，则邻域内任意初值 x_0 迭代公式收敛
- $\mathrm{Steffensen}$ **迭代法**

  简单迭代法为一阶迭代法，$\mathrm{Steffensen}$ 迭代法为二阶迭代法。

  $$x_{k+1} = x_k - \frac{[\varphi(x_k)-x_k]^2}{\varphi[\varphi(x_k)] - 2\varphi(x_k) + x_k}$$

牛顿迭代法

- **方法**

  $$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}(k=0,1,2,\cdots)$$

  即 x 每次变为切线与 x 轴交点的 x 坐标
- **局部收敛定理**

  在 x^* 邻域内 $f''(x)$ 连续且 $f'(x^*) \ne 0$ ，则存在闭邻域 $U(x^*,\delta)=[x^*-\delta,x^*+\delta]$ 内对于任意初值 x_0 收敛且至少二阶收敛
- **全局收敛定理**
  1. $[a,b]$ 内 $f''(x) \ne 0$ 且连续， $f'(x) \ne 0$
  2. 选取初值 $x_0 \in [a,b]$ 使得 $f(x_0)f''(x_0) > 0$ ，则二阶收敛于 x^*

第三章 线性代数方程组的解法

$Gauss$ 列主元消去

- **方法**

  将系数矩阵通过初等变换变为上三角矩阵。这样只需要回代很容易求出解。但是每次变换的时候把头上系数绝对值最大的放到最前面来作为减去的行。看眼书就会了。

  原因是这样减的时候 a_{ij} 减去的 $a_{kj} \times \dfrac{a_{ik}}{a_{kk}}$ 的分母最大，误差较小。

矩阵三角分解

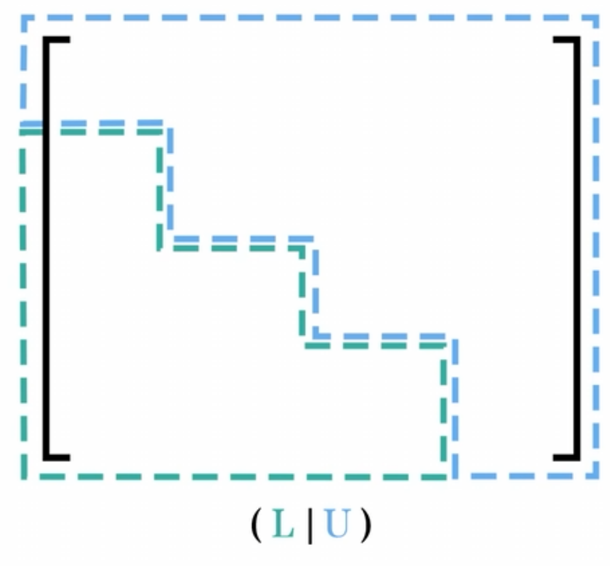
- **大致原理**

  方程 $Ax=b$ 中，将 A 分解成一个 **单位** 下三角型矩阵 L 与上三角形矩阵 U 的乘积。$A=LU$ 。

  此时 $LUx=b$ 。$Ly=b$ 极其好求，$Ux=y$ 也极其好求。

- **方法（$Doolittle$ 分解）**

  紧凑格式：把 LU 上下拼起来， L 对角线上的 1 被盖掉。

  只写结论，证明在书上。计算都用紧凑格式来计算。

  $$\begin{cases} u_{1j}=a_{1j} & (j=1,2,\cdots,n) \\ l_{i1}=\dfrac{a_{i1}}{u_{11}} & (i=2,3\cdots,n) \end{cases}$$

  $$\begin{cases} u_{kj}=a_{kj}-\sum\limits_{m=1}^{k-1} l_{km}u_{mj} & (j=k,k+1,\cdots,n) \\ l_{ik}=\dfrac{1}{u_{kk}}(a_{ik}-\sum\limits_{m=1}^{k-1} l_{im}u_{mk}) & (i=k,k+1,\cdots,n) \end{cases}$$

  完全不说人话啊。但是还是仔细看一下比较能理解。

  总结一下就是。第一行复制 A 第一行 ，第一列为 A 第一列除以 u_{11} ，即第一行第一列对应的对角元。

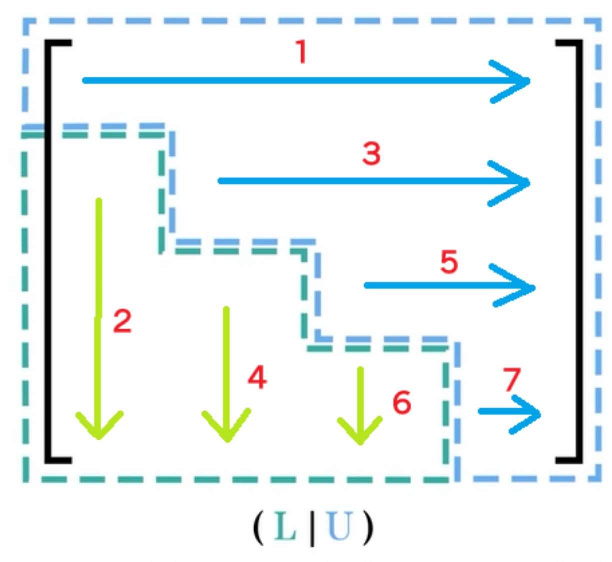
  之后行列交替计算。

  行的计算：A 中对应的值减去上方与左方对应乘积之和。所以减去的乘积个数是上面数的个数。

  列的计算：A 中对应的值减去左方与上方对应乘积之和。所以减去的乘积个数是左边数的个数。最后再除以当前对应列的对角元。

  比较抽象，建议看式子然后自己脑补一下。

所以计算顺序是这样的↓



增广矩阵的话用同样的方法算出来最右边一列是 y 。

迭代法

- **范数**
  - **向量范数**

    1 范数 $\|\mathbf{x}\|_1=\sum_{i=1}^{n}|x_i|$

    2 范数 $\|\mathbf{x}\|_2=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}x_i^2}$

    ∞ 范数 $\|\mathbf{x}\|_\infty=\max_{1\le i\le n}|x_i|$
  - **矩阵范数**

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

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

    谱范数 $\|\mathbf{A}\|_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)}$

    F 范数 $\|\mathbf{A}\|_F=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}^2}$
- **谱半径**

  $\rho(\mathbf{A})=\max_{1\le i\le n}|\lambda_i|$
- **简单迭代法**
  - **方法**

    将 $Ax=b$ 等价变形为 $x=Bx+g$

    $x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+g$
  - **充分条件**

    某种矩阵范数 < 1 。实际中常取 $\|B\|_1,\|B\|_\infty$

- **充要条件**
    1. $\lim_{k \to +\infty} B^k = O$
    2. 迭代矩阵 B 谱半径 < 1 。

- $Jacobi$ **迭代法**
  - **方法**

    取系数矩阵 A 的对角为 D ，下半三角为 L ，上半三角为 U

    则迭代矩阵 $B_J = -D^{-1}(L+U)$ ，常数向量 $g_J = D^{-1}b$ ，证明在书上。

    运用 $x^{(k+1)} = B_J x^{(k)} + g_J$ 迭代
  - **充分条件**
    1. 系数矩阵 A 严格对角占优。（对角元绝对值大于本行/列其他所有元素绝对值之和）
    2. 迭代矩阵 B_J 任一种矩阵范数系数 < 1 。
  - **充要条件**

    迭代矩阵 B_J 谱半径 < 1 。

- $Gauss-Seidel$ **迭代法**
  - **方法**

    将简单迭代矩阵 B 分解为 $B_1 + B_2$ 一个为下三角一个为上三角，上三角包含对角线。

    则迭代矩阵 $B_{GS} = (I - B_1)^{-1}B_2$ ，常数向量 $g_{GS} = (I - B_1)^{-1}$
  - **充分条件**

    设简单迭代法的迭代矩阵满足 $\|B\|_1 < 1$或 $\|B\|_\infty < 1$ ，则相应的 $Gauss-Seidel$ 迭代法也收敛。
  - **充要条件**

    迭代矩阵 B_{GS} 谱半径 < 1 。

- JGS **迭代法**
  - **方法**

    取系数矩阵 A 的对角为 D ，下半三角为 L ，上半三角为 U

    则迭代矩阵 $B_{JGS} = -(D+L)^{-1}U$ ，常数向量 $g_{JGS} = (D+L)^{-1}b$ ，证明在书上。

    运用 $x^{(k+1)} = B_{JGS} x^{(k)} + g_J$ 迭代
  - **充分条件**
    1. 系数矩阵 A 严格对角占优。（对角元绝对值大于本行/列其他所有元素绝对值之和）
    2. 系数矩阵 A 对称正定。
    3. 迭代矩阵 B_{JGS} 任一种矩阵范数系数 < 1 。
  - **充要条件**

    迭代矩阵 B_{JGS} 谱半径 < 1 。

  > 不是任何时候 JGS 迭代法都比 $Jacobi$ 迭代法收敛快，
  >
  > **甚至有 $Jacobi$ 迭代法收敛而 JGS 迭代法不收敛的例子**

- **逐次超松弛迭代法（SOR）**
  - **方法**

取系数矩阵 A 的对角为 D ，下半三角为 L ，上半三角为 U

则迭代矩阵 $B_\omega = (D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D-\omega U]$ ，常数向量 $g_\omega = \omega(D+\omega L)^{-1}b$ ，证明在书上。

运用 $x^{(k+1)} = B_{JGS}x^{(k)} + g_J$ 迭代

- **充分条件**
  1. 系数矩阵 A 严格对角占优且 $0<\omega\le 1$ 。
  2. 系数矩阵 A 对称正定且 $0<\omega<2$ 。
  3. 迭代矩阵 B_ω 任一种矩阵范数系数 < 1 。
- **充要条件**

  迭代矩阵 B_ω 谱半径 < 1 。
- **必要条件**

  $0<\omega<2$

第四章 函数插值

用未知函数 $f(x)$ 的一系列点对 $\{(x_i,y_i)\}_{i=0}^n$ 求出一个近似原函数的函数 $\phi(x)$ 。

插值余项

- $R_n(x) = f(x)-\phi(x) = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$ ，其中 $\xi \in (a,b),\ \omega_{n+1}(x) = \prod\limits_{i=0}^{n}(x-x_i)$

$Lagrange$ 插值

- $Lagrange$ **插值函数**

  $L(x) = \sum\limits_{i=0}^{n} l_i(x)y_i$

  其中 $l_i(x) = \prod\limits_{j\ne i}\dfrac{x-x_j}{x_i-x_j}$ ，显然该式有性质 $l_i(x_j) = \begin{cases}1 & i=j\\ 0 & i\ne j\end{cases}$

$Newton$ 插值

- **差商**

  一阶差商 $f[x_i,x_j] = \dfrac{y_j-y_i}{x_j-x_i}$

  二阶差商 $f[x_i,x_j,x_k] = \dfrac{f[x_j,x_k]-f[x_i,x_j]}{x_k-x_i}$

  k 阶差商 $f[x_i,x_{i+1},\cdots x_{i+k}] = \dfrac{f[x_{i+1},x_{i+2},\cdots+x_{i+k}]-f[x_i,x_{i+1},\cdots+x_{i+k-1}]}{x_{i+k}-x_i}$

  差商表

		一阶差商	二阶差商	三阶差商
x_0	$f(x_0)$			
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0,x_1]$		

x	$f(x)$	一阶差商 $f[x_i, x_{i+1}]$	二阶差商 $f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$	三阶差商 $f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}]$
x_2	$f(x_2)$	$f[x_1, x_2]$	$f[x_0, x_1, x_2]$	
x_3	$f(x_3)$	$f[x_2, x_3]$	$f[x_1, x_2, x_3]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$

- $Newton$ **插值函数**

  $$N_k(x) = N_{k-1}(x) + f[x_0, x_1, \cdots, x_k] \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_i)$$

第五章 曲线拟合的最小二乘法

最小二乘解

- **正规方程组**

  矛盾方程组 $Ax = b$ 对应的正规方程组为 $(A^T A)x = A^T b$，

  其解为该矛盾方程组的最小二乘解。

曲线最小二乘拟合

- **最小二乘多项式拟合**

  $$A = \begin{pmatrix} \phi_0(x_0) & \phi_1(x_0) & \cdots & \phi_m(x_0) \\ \phi_0(x_1) & \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_m(x_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_0(x_n) & \phi_1(x_n) & \cdots & \phi_m(x_n) \end{pmatrix}$$

  $x = (c_0, c_1, \cdots, c_m)^{\mathrm{T}}$

  $b = (y_0, y_1, \cdots, y_n)^{\mathrm{T}}$

  非线性转化成线性求解：

  $y = ae^{bx}$ 可以转化成 $\ln y = \ln a + bx$

  $y = \dfrac{ax}{b+x}$ 可以转化成 $\dfrac{1}{y} = \dfrac{1}{a} + \dfrac{b}{a}\dfrac{1}{x}$

> 送送送

第六章 数值微分与数值积分

常用数值微分公式

- **一阶两点公式**

  $$f'(x_0) = f'(x_1) \approx \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)]$$

  $$R_1(x_0) = -\frac{h}{2} f''(\xi_0),\ \xi_0 \in (x_0, x_1)$$

  $$R_1(x_1) = \frac{h}{2} f''(\xi_1),\ \xi_1 \in (x_0, x_1)$$

- **一阶三点公式**

  $$f'(x_0) \approx \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)]$$

  $$f'(x_1) \approx \frac{1}{2h}[f(x_2) - f(x_0)]$$

  $$f'(x_2) \approx \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)]$$

  $$R_2(x_0) = \frac{1}{3}h^2 f'''(\xi_0),\ \xi_0 \in (x_0, x_2)$$

  $$R_2(x_1) = -\frac{1}{6}h^2 f'''(\xi_1),\ \xi_1 \in (x_0, x_2)$$

  $$R_2(x_2) = \frac{1}{3}h^2 f'''(\xi_2),\ \xi_2 \in (x_0, x_2)$$

$Newton-Cotes$ 求积公式

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + E[f]$$

- **常用 $Newton-Cotes$ 数值积分公式**
  - 中点求积公式

    $$M(f) = \int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)f(\frac{a+b}{2})$$

    $$E_M(f) = \frac{(b-a)^3}{24}f''(\xi)$$

  - 梯形求积公式

    $$T(f) = \int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$$

    $$E_T(f) = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)$$

  - $Simpson$ 求积公式

    $$S(f) = \int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$

    $$E_S(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi)$$

  - $Cotes$ 求积公式

    $$C(f) = \int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{90}[7f(a) + 32f(\frac{3a+b}{2}) + 12f(\frac{a+b}{2}) + 32f(\frac{a+3b}{2}) + 7f(b)]$$

    $$E_C(f) = -\frac{(b-a)^7}{1935360}f^{(6)}(\xi)$$

- **代数精确度**

  m 次代数精确度：对于任意不高于 m 次多项式均能精确成立。

  充要条件：对于 $f(x) = 1, x, x^2, \cdots, x^m$ 都精确成立，而对于 $f(x) = x^{m+1}$ 不成立 。

  拥有奇数 $n+1$ 个节点的求积公式，其代数精确度也至少为 $n+1$ 。

复化求积法

- **复化梯形求积**

  $T_n = \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum\limits_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)]$

  $E_{T_n} = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)\,(a \le \eta \le b)$

- **复化 $Simpson$ 求积**

  $S_n = \frac{h}{6}[f(a) + 2\sum\limits_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4\sum\limits_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) + f(b)]$

  > 翻译成人话就是 $[a,b]$ 分成多个区间，ab 端点取一次，中间的端点取两次，端点的中点取四次

  $E_{S_n} = -\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta)\,(a \le \eta \le b)$

第七章 常微分方程初值问题的数值解法

求解 $\begin{cases} \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x,y), & a < x \le b \\ y(a) = y_0 \end{cases}$ 在 $[a,b]$ 上的解。

$Euler$ 方法及其改进

- **显式 $Euler$ 公式**

  $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)\,(n = 0,1,2,\cdots,N-1)$

- **$Euler$ - 梯形预估校正公式**

  $\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left[f(x_n, y_n) + f\left(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)}\right)\right] \end{cases}$

  第一式称为 **预估算式**， 第二式称为 **矫正算式** 。

$Taylor$ 级数展开法

- **$Taylor$ 级数展开**

  $y(x_{n+1}) = y(x_n) + \frac{h}{1!}y'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \cdots + \frac{h^k}{k!}y^{(k)}(x_n) + O(h^{k+1})$

单步法的截断误差与阶

- **记忆以下方法的阶**

  $Euler$ 显式方法、隐式方法：一阶

  梯形方法、$Euler$ - 梯形预估矫正方法：二阶

  $Taylor$ 展开法（k 次）：k 阶

单步法的数值稳定性

- **记下来就好**

  $Euler$ 公式满足 $|1+\lambda h|\le 1$ 时，方法稳定。

  梯形公式对于任意的步长 h 都稳定。

  $Euler$ - 梯形预估校正公式满足 $|1+\lambda h+\dfrac{1}{2}(\lambda h)^2|\le 1$ 时，方法稳定。

第八章 矩阵特征值和特征向量的计算

乘幂法计算主特征值

- **具体操作**

  取初始向量 $V^0\in\mathbb{R}^n$ ，且取 $\lambda_1^{(k)}=\dfrac{V_1^{(k)}}{V_1^{(k-1)}}$

  每次令 $V^{(k+1)}=AV^{(k)}$ ，计算直到 $|\lambda_1^{(k+1)}-\lambda_1^{(k)}|$ 符合要求