mode: passage
header : false
footer : false
date: 22-9-23
author: gky
title: Computation-1

计算物理 基础回顾

- Item 1
- Item 2

123123123

计算机表达的整数

机器上能表达的最小正实数：机器精度

$$\epsilon_m = \min\{g \in A | 1 \oplus g > 1, g > 0\}$$

机器精度的数值依赖于我们在一个实数上愿意投入多少内存。
float: 10^{-7}
double: 10^{-16}

浮点数：β, t, L, U

一个一般的浮点数系统F可以用基底β,尾数位数t,指数e的上下限L, U表示：

$$F(\beta, t, L, U) = \{0\} \cup \left[x \in R : x = (-1)^s \beta^e \sum_{k=1}^{t} a_k \beta^{-k} \right]$$

$$F(\beta, t, L, u) = \{0\} + \cup \left[x \in R : x = (-1)^s \beta^e \sum_{k=1}^{t} a_k \beta^{-k} \right]$$

为保证唯一性，一般假设$a_1 != 0$，否则总可移动满足条件。这样的浮点数表示称为规范化的浮点数表达。

特殊字符与存储

$$Inf, NaN$$

big endian与little endian

浮点数范围

$$e = U, \quad x_{max} = \beta^U(1-\beta^{-t})$$

$e = L, \quad x_{min} = \beta^{L-1}$

函数求值误差分析：

$$\text{所求}: f(x)$$
$$\text{实际}: \hat{f}(\hat{x})$$
$$\hat{f}(\hat{x}) - f(x) = [\hat{f}(\hat{x}) - f(\hat{x})] + [f(\hat{x}) - f(x)]$$

- 第一项为输入同时为$\hat{x}$时计算过程的误差。包括截断误差和舍入误差。
- 第二项是数据传递误差。它是由问题敏感性决定的

1. 计算误差

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$
$$f(x+h) = f(x) + h \cdot f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(\xi), \quad \xi \in [x, x+h]$$

设M是$|f''(x)|$上限，阶段误差$\frac{Mh^2}{2}$. 假设计算$f(x)$ 过程中舍入误差ϵ,在差分中被算了两次，所以舍入误差进入$f'(x)$中大小$\frac{2\epsilon}{h}$，总误差

$$\epsilon_{tot} = \frac{Mh^2}{2} + \frac{2\epsilon}{h}$$

敏感性：问题的变态性，一定的输入相对变化下输出的相对变化率。

$$\text{cond} = \left| \frac{[f(\hat{x}) - f(x))]/f(x)}{(\hat{x} - x)/x} \right|$$

$$f(\hat{x}) - f(x) \approx f'(x)(\hat{x} - x)$$

$$\text{cond} \approx \left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right|$$

例子（Wilkinson,1960s）

$$w(x) = \prod_{i=1}^{20}(x-i) = (x-1)(x-2)\cdots(x-20)$$

its roots are $x_i = i \quad i = 1, 2, \cdots, 20$
consider the root of the polynomial $P(x) + Yx^{19} = 0$. Its roots are $x_i = x_i(Y) = i + \epsilon_i$
if $Y \to 0$, $x_i(y) \to x_i(0) = i$
After the addition of Yx^{19}:

$$P(i+\epsilon_i) + Y(i+\epsilon_i)^{19} + P(i) + P'(i)\epsilon_i + Yi^19 = 0$$
$$\text{so} \quad \frac{\epsilon_i}{Y} = -\frac{i^{19}}{P'(i)}$$

for small$i$, i^{19} is way smaller than $P'(i)$. However, as i get bigger, i^{19} grow up quickly. And the solution x_i become unstable as Y varies.

find roots for polynomial

$$C = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -6 & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

$$|C - \lambda i| = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 \\ 0 & -\lambda & 1 \\ -6 & 5 & 2-\lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3 + 2\lambda^2 + 5\lambda - 6 = 0$$

The rootfinding problem is converted to finding the eigenvalues for a specific matrix(companion matrix).
舍入误差与算法的稳定性
既然计算机中的实数都是利用不精确的浮点数来表达的，我们需要讨论算法的稳定性，也就是初始值中可能的误差，随着算法的运行时如何传递到最终的结果中去的。既然每次计算机的操作往往伴随着舍入误差，我们就需要分析这个误差时如何随着算法的发展而传递的。

算法复杂度

> 十把完全相同的钥匙但对应不同的锁，如果对应关系完全未知，只通过试开来配对，最好用多少次？最差要用多少次？平均要开多少次？

解：最好10次，最差45次，期望值为29.571，被定义为**平均计算复杂度**。不是几何平均值或算数平均值20.125

矩阵与线性代数

方阵的trace与determinant

$$\mathrm{tr}(A) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$$
$$\det(A) = \sum_{\pi \in P} \mathrm{sign}(\pi) a_{1\pi 1} a_{2\pi 2} \cdots a_{n\pi n}$$
$$A^{-1} = \frac{1}{\det(A)} \Delta^T$$

方阵的逆存在的充要条件为行列式不为零。

Cramer's rule

$$A\vec{x} = b$$
$$x_j = \Delta_j / det(A), j = 1, \cdots, n$$

其中Δ_j 是将原矩阵第j列换位矢量b所得到矩阵的行列式的值

矩阵的rank与kernel

rank(A):从矩阵A中抽取的非奇异子矩阵的最大阶数。
值域range(A)

$$range(A) = \{y \in K^m | y = A \cdot x, x \in k^n\}$$
$$rank(A) = dim(range(A))$$

kernel:

$$\ker(A) = \{x \in K^n | A \cdot x = 0\}$$

性质

- $rank(A) + dim(ker(A)) = n$

矢量与矩阵的模

矢量空间的模

一个矢量空间V上的模可以定义为满足下列条件的非负函数：

1. non-negative;
2. uniformity;
3. triangular inequality.

Holder 模：$||\vec{x}||_p = (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{1/p}$

模的等价性

两个模$||\cdot||_p, ||\cdot||_q$的等价：

$\exists$不依赖x的$c, C > 0 \quad \text{such that} \quad c||\vec{x}||_q \le ||\vec{x}||_p \le C||\vec{x}||_q, \forall \vec{x} \in V$

证明

introduce a unit circle:

$$S = \{\vec{x} | ||\vec{x}||_\infty = 1\}$$

S是一个有界闭集。由于$f(x) = ||\vec{x}||_p$ is continuous function, f(x) can get maximum and minimum values on S. Let the minimum be c, maximum be C, then $c \le f(x) \le C$.

On the other hand, $\forall \vec{x} \in K^n$ and $\vec{x} \ne 0$,$\vec{x}/||\vec{x}||_\infty \in S$, so

$$c \le ||\frac{\vec{x}}{||\vec{x}||_\infty}||_p \le C \quad \Rightarrow \quad c \le \frac{||\vec{x}||_p}{||\vec{x}||_\infty} \le C$$
$$\Rightarrow \quad ||\vec{x}||_p = ||\vec{x}||_\infty$$

得证

可以证明，有限维矢量空间中的任何模都是等价的。

Norm of a matrix

对于$K^{m\times n}$上矩阵，模定义满足性质:

矩阵模

1. non-negative:

$$||A|| \geq 0, \forall A \in K^{m\times n},$$
$$||A|| = 0 \iff A = 0$$

2. uniformity:

$$||\alpha A|| = |\alpha| \cdot ||A|| \forall \alpha \in K, \forall A \in K^{m\times n}$$

3. triangular inequality:

$$||A+B|| \leq ||A|| + ||B||$$

兼容的模

如果矩阵模和矢量模满足关系：

$$||A\vec{x}|| \leq ||A|| \cdot ||\vec{x}||, \forall \vec{x} \in K^n, \forall A \in K^{m\times n}$$

服从乘法模

服从乘法模

如果模满足

$$||AB|| \leq ||A|| \cdot ||B||$$

不是所有矩阵模都是服从乘法的模。例：最大模

$$||A||_\Delta = max(|a_{ij}|)$$

矢量模诱导的矩阵模

$$||A|| \equiv \sup_{\vec{x}\neq 0} \frac{||A\vec{x}||}{||\vec{x}||}$$

- 是与原来矢量模兼容的，是服从乘法的
- 存在$\vec{y} \neq 0$,

$$||Ay|| = ||A|| \cdot ||y||$$

矢量诱导的矩阵模

矢量的p-模诱导的矩阵模

$$||A||_p \equiv \sup_{\vec{x}\neq 0} \frac{||A\vec{x}||_p}{||\vec{x}||_p}, \quad \forall \vec{x} \in V, \quad \vec{x} \neq 0$$

1-模和∞-模有性质：

$$||A||_1 = \max_j \sum_i |a_{ij}|, \quad ||A||_\infty = \max_i \sum_j |a_{ij}|$$

so

$$||A||_1 = ||A^T||_\infty$$

note

spectral radius

$$\rho(A) \equiv \max_i |\lambda_i|$$

- 矩阵的诱导矩阵模一定大于谱半径：

$$||A|| > \rho(A)$$

- 厄米矩阵的2-诱导矩阵模等于该矩阵的最大本征值。

矩阵条件数

$$K(A) \equiv ||A|| \cdot ||A^{-1}||$$
$$= \max_x \frac{||Ax||}{||x||} \cdot 1/\min_x \frac{||Ax||}{||x||}$$

矩阵条件数描述了矩阵对向量的拉伸能力和压缩能力。
对于服从乘法的矩阵模，总有$K(A) \geq 1$

欧式模定义的$K_2(A)$:

$$K_2(A)=\frac{\sigma_1(A)}{\sigma_n(A)}$$

即最大和最小奇异值之比

定义：上梯形矩阵，下梯形矩阵，上/下三角矩阵（方阵）
特殊形状的矩阵：带型矩阵
上带p:$a_{ij}=0,\quad i>j+p$
下带q:$a_{ij}=0,\quad j>i+q$
三对角矩阵：p=q=1
对角矩阵：p=q=0
上三角/上梯形矩阵：p=0,
...

二次型，正定矩阵

复厄米正定矩阵

A是厄米矩阵，则以下条件等价：

- A是正定矩阵;
- $(A\vec{x},\vec{x})>0,\quad \forall\vec{x}\neq 0,\vec{x}\in\mathbb{C}^n$
- A的主子矩阵本征值都是正的
- A主子矩阵行列式都正
- $\exists H\in\mathbb{R}^{n\times n}\quad \text{such that}\quad A=H^\dagger H$