数值分析和科学计算引论

- 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
- 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

Lagrange 插值法

- n 次 Lagrange 插值基函数 $l_j(x)$ 满足 $l_j(x_k)=\delta_{kj}$
- $l_k(x)=\prod_{j\neq k}(x-x_j)/\prod_{j\neq k}(x_k-x_j)$
- $\omega_{n+1}(x)=\prod\limits_{j=0}^{n}(x-x_j),\omega'(x_k)=\prod\limits_{j=0,j\neq k}^{n}(x_k-x_j)$
- $l_k(x)=\frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_k)\omega'_{n+1}(x_k)},L_n(x)=\sum y_k l_k(x)$
- $R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\leq\frac{M}{(n+1)!}\max\{\omega_{n+1}\}$ 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：$\sum x_i^k l_i(x)=x^k,\sum(x_i-x)^k l_i(x)=0,\sum l_i(x)=1$
- 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 $\delta f_k=f_{k+\frac{1}{2}}-f_{k-\frac{1}{2}}$
- 位移因子 $Ef_k=f_{k+1},\Delta=E-I,\nabla=I-E^{-1}$，可以二项展开，$(a+b)^n=\sum_{i=0}^{n}a^ib^{n-i}\frac{n!}{i!(n-1)!}$
- Newton 等间隔（前插）公式，下面 h 为插值节点间隔
- $P(x_0+th)=\sum_{i=0}^{n}\frac{\prod_{j=1}^{i}(t-j+1)}{i!}\Delta^i f_0=f_0+t\Delta f_0+\frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f_0+\cdots+\frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f_0$
- 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：$|R_n(x)|\leq\frac{h^2}{8}M_2$。三次埃尔米特插值：$|R_n(x)|\leq\frac{h^4}{384}M_4$（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，$C_0=\frac{5}{384},C_1=\frac{1}{24},C_2=\frac{3}{8}$

函数逼近

- 最小零偏差：函数范数最小
- 向量范数：$\|x\|\geq 0,\|x\|=0\iff x=0,\|\alpha x\|=|\alpha|\|x\|,\|x+y\|\leq\|x\|+\|y\|$ 当且仅当线性相关取等号
- 内积空间:$|(u,v)|^2\leq(u,u)(v,v)$，当且仅当线性相关取等号，$|(u_i,u_j)_{i,j}|\neq 0\iff$ 向量组 u_* 线性无关
- 函数范数 $\|f\|_\infty=\max\{|f|\},\|f\|_1=\int_a^b|f|\mathrm{d}x,\|f\|_2=\sqrt{\int_a^b f^2\mathrm{d}x}$，对应函数逼近分别称为（一致）逼近，平方逼近
- 函数带权内积 $<f,g>=\int_a^b fg\rho\mathrm{d}x,\rho(x)\geq 0$ 且连续

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，$P_0=1;P_n=\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\frac{(x^2-1)^n}{2^n n!}$；$(P_n,P_m)=\frac{2}{2n+1}\delta_{m,n};P_n(-x)=-1^nP_n(x);\widetilde{P_n}=\frac{n!}{(2n)!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n;(n+1)P_{n+1}=(2n+1)xP_n-nP_{n-1}$
- $P_2=\frac{3x^2-1}{2},P_3=\frac{5x^3-3x}{2},P_4=\frac{35x^4-30x^2+3}{8}$
- 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：$T_n(x)=\cos(n\arccos(x)),x\in[-1,1],T_{n+1}=2xT_n-T_{n-1},(T_m,T_n)=\frac{\pi}{2}\delta_{m,n}(m\neq 0)=\pi(m=n=0);P_n(-x)=-1^nP_n(x)$；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}
- $\forall P\in\widetilde{H_n},\|T_n\|_\infty\leq\|P\|_\infty$，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，$\|f-L_n\|_\infty\leq\frac{M_{n+1}}{2^n(n+1)!}$
- 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 $n+1$ 个点上线性无关 $\Rightarrow$ 函数组线性相关

数值积分与数值微分

- 梯形公式：$\int_a^b f\mathrm{d}x\approx\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$，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：$m=1,R[f]\leq\frac{(b-a)^3}{12}M_2$，中矩形公式：$m=1,R[f]\leq\frac{(b-a)^3}{24}M_2$
- 收敛性：h 区间足够小趋近真值。稳定性：f 有误差 $\widetilde{f}$ 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 $S_n=\frac{h}{6}[f(a)+4\sum f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum f(x_k)+f(b)],R_n[f]=-\frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4M_4$
- 梯形公式递推：$T_{2n}=\frac{T_n}{2}+\frac{h}{2}\sum f(x_k+\frac{1}{2})$
- 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。$\int_{-1}^{1}f=2f(0)=f(-\frac{1}{\sqrt{3}})+f(-\frac{1}{\sqrt{3}})=\frac{5}{9}f(-\frac{\sqrt{15}}{5})+\frac{8}{9}f(0)+\frac{5}{9}f(\frac{\sqrt{15}}{5}),R_n[f]=\frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3}M_{2n+2}$
- Gauss-Chebyshev 求积：$\int_{-1}^{1}\frac{f}{\sqrt{1-x^2}}=\frac{\pi}{n}\sum f(x_k),x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi,1\leq k\leq n$

数值微分

- 中点方法 $G(h)=\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h},|f'(a)-G(h)|\leq\frac{h^2}{6}M_3$，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，$R=R_n'\leq\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\omega_{n+1}'$，其中一点方法为直接求斜率，余项 $\frac{h}{2}f''$

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 $\exists a,b\forall x\in[a,b].a\leq\phi(x)\leq b,\exists L<1,s.t.|\phi(x)-\phi(y)|\leq L|x-y|,|\phi(x)'|<1$
- 序列误差估计 $x_k-x^*\leq\frac{L^k}{1-L}|x_1-x_0|,e_k=x_k-x*,\lim_{k\to\infty}\frac{e_{k+1}}{e_k^p}=C\neq 0$ 则称 p 阶收敛
- 迭代法局部收敛：存在邻域 R 使得 $|\phi(x)|<1$，需要选取初始点

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，$\psi=x-\frac{f}{mf'},\psi=x-\frac{ff'}{(f')^2-ff''}$ 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 $|y(x,x_0)-y(x,\widetilde{x_0}|\le \exp(L|x_0-\widetilde{x_0}|)|x_0-\widetilde{(}x_0)|$，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

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 A 的特征值组合成为 A 的谱 $\sigma(A)$，特征值绝对值的最大值称为其谱半径 $\rho(A)$
- 矩阵范数：基本要求：$\|A\|\ge0,\|A\|=0\iff A=0,\|cA\|=|c|\|A\|,\|A+B\|=\|A\|+\|B\|,\|AB\|=\|A\|\|B\|$
- 算子范数：结合向量范数给出，$\|A\|_v\triangleq\max\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}$
- $\|A\|_\infty=\max_{1\le i\le n}\sum_j|a_{ij}|$，最大的行的绝对值的和
- $\|A\|_1=\max_{1\le j\le n}\sum_i|a_{ij}|$，最大的列的绝对值的和
- $\|A\|_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)}$，最大的特征值的平方根
- 向量范数连续。$\forall s,t\exists c_1,c_2,c_1\|x\|_s\le\|x\|_t\le c_2\|x\|_s$
- $\rho(A)\le\|A\|.\forall\epsilon,\exists(\|\cdot\|_\epsilon),\|A\|_\epsilon\le\rho(A)+\epsilon$，证明谱半径关系可以通过范数来计算
- $\|Ax\|_v\le\|A\|_v\|x\|_v.A^T=A\Rightarrow\|A\|_2=\rho(A)$
- $\|B\|\le1\Rightarrow|I\pm B|\ne0,(I-B)^{-1}=I+B(I-B)^{-1}\Rightarrow\|(I\pm B)^{-1}\|\le\frac{1}{1-\|B\|}$
- 矩阵条件数：$\mathrm{cond}(A)_v=\|A^{-1}\|_v\|A\|\ge\|I\|_v=1$
- $\mathrm{cond}(cA)_v=\mathrm{cond}(A)_v;A=A^T\to\mathrm{cond}(A)_2=|\lambda_1/\lambda_n|;AA^T=I\to\mathrm{cond}(A)_2=1,\mathrm{cond}(AB)=\mathrm{cond}(BA)=\mathrm{cond}(B)$

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：$A=A^T\Rightarrow A=LDL_T=L_1L_1^T$

误差分析

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

解线性方程组的迭代法

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

Jacobi 和 Gauss-Seidel 迭代法：$A=D-L-U$

- Jacobi 迭代法：$Dx=(L+U)x+b\Rightarrow B=D^{-1}(L+U)=I-D^{-1}A=J$
- Gauss-Seidel 迭代法：$(D-L)x=Ux+b\Rightarrow B=(D-L)^{-1}U=I-(D-L)^{-1}A=G$
- 收敛性：$\rho(J)<1,\rho(G)<1$
- 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
- 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）

逐次超松弛迭代法（SOR）

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

矩阵的特征值计算

- A 的每个特征值必然在下面的某个圆盘之中：$|\lambda-a_{ii}|\le r_i=\sum_{i\ne j}a_{ij}$。换言之，$A$ 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
- $\mu=\lambda(A+\delta(A))\in\mathbb{R}^{n\times n},P^{-1}AP=D$ 则 $\min_{\lambda\in\sigma(A)}|\lambda-\mu|\le\mathrm{cond}(P)_p\|\delta(A)\|_p$

幂法和反幂法

- 幂法：迭代 $v^{k+1}=Av^k$ 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 $v_1=Au_0,u_1=\frac{v_1}{\max(v_1)}$ 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 $A'=A-cI$ 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 $\frac{(Au_k,u_k)}{(u_k,u_k)}$ 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，$v_k=A^{-1}u_{k-1},u_k=\frac{v_k}{\max v_k}$ $\frac{1}{\lambda_n}=\lim_{k\to\infty}\max v_k$
- 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 ALU 分解方便之后求方程

正交变换和矩阵分解，QR 方法

- Householder 变换：$\omega^T\omega=1,H(\omega)=I-2\omega\omega^T$ 构成反射矩阵，正交对称，$H=H^T=H^{-1},A=A^T\to HAH$ 对称
- $\|x\|_2=\|y\|_2\Rightarrow\exists H,Hx=y$，可以将任意一个向量约化到坐标轴上，其中 $u=x-y,H=I-2\frac{uu^T}{(u,u)}$
- 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：$A=QR,Q^TAQ=U_R$ 其中一阶 R_{ii} 是一阶特征值，二阶 R_{ii} 特征值 A 共轭特征值
- QR 方法：迭代过程：$A_k=Q_kR_k,A_{k+1}=R_kQ_k\Rightarrow A_kQ_k=Q_kA_{k+1}\Rightarrow A_{k+1}=Q_k^TA_kQ_k$
- 收敛：若 A 特征值满足 $|\lambda_1|>|\lambda_2|>\cdots>|\lambda_n|$，可以对角化成标准型 $A=XDX^{-1}$，X 可以 LU 分解，则 $\{A_k\}$ 本质上收敛于上三角矩阵，$\lim_{k\to\infty}a_{ii}^k=\lambda_i,a_{ij,i\ne j}=0$
- 原点位移法：$A_k-s_kI=Q_kR_k,A_{k+1}=R_kQ_k+s_kI$，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 $e_{n+1}\le\psi'(x)e_n+\Delta$，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 $\frac{M_2}{2}|e_{n+1}|\le\frac{M_2|e_n|}{2}^2\le[\frac{M_2}{2}|e_0|]^{2^{n+1}}$ 这里 n 不足够大因此 $e_{n+1}\ne0$。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 $I=\sum A_kf_k'$ 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 $M\ge|\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)|,L\ge y^{(2)}(\xi)$，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 $\Delta_{n+1}+\frac{Lh^2}{2hM}\le(1+hM)(\Delta_n+\frac{Lh^2}{2hM})\le(1+hM)^{n+1}\frac{Lh^2}{2hM}$

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 $\delta_{n+1}\le(1+hM)\delta_n+\Delta$。变换得到 $\delta_{n+1}+\frac{10^{-m}}{2hM}\le(1+hM)(\delta_n+\frac{10^{-m}}{2hM})\le(1+hM)^{n+1}\frac{10^{-m}}{2hM}$。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 $\overline{\Delta_{n+1}}\le(1+hM)\Delta_n+\frac{Lh^2}{2},\Delta_{n+1}\le\Delta_n+\frac{hM\Delta_n}{2}+\frac{hM\overline{\Delta_{n+1}}}{2}+\frac{Th^3}{12}$，其中 $T\ge y^{(3)}$

$\Rightarrow\Delta_{n+1}\le(1+hM+\frac{h^2M^2}{2})\Delta_n+(\frac{LM}{4}+\frac{T}{12})h^3$

舍入累计误差：$\overline{\delta_{n+1}}\le(1+hM)\delta_n+\Delta,\delta_{n+1}\le\delta_n+\frac{hM\delta_n}{2}+\frac{hM\overline{\delta_{n+1}}}{2}+\Delta$

$\Rightarrow\delta_{n+1}\le(1+hM+\frac{h^2M^2}{2})\delta_n+(1+\frac{hM}{2}\Delta)$

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 $|b_1|>|c_1|>0,|b_n|>|a_n|>0,|b_i|\ge|a_i|+|c_i|$
- 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：$x_n=y_n,x_i=y_i-\beta_ix_{i+1}$
- $\begin{pmatrix}b_1&c_1&\\a_1&b_2&c_2\\&a_2&b_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha_1&&\\r_2&\alpha_2&\\&r_3&\alpha_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&\beta_1&\\&1&\beta_2\\&&1\end{pmatrix}$