数值微分

- 数值微分就是用函数值的线性组合近似函数在某点的导数值，由导数的定义，差商近似导数，得到数值微分公式

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a)}{h}$$

$$f'(a) \approx \frac{f(a)-f(a-h)}{h}$$

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h} \quad \text{(中点公式)}$$

数值微分

$$f(a \pm h) = f(a) \pm hf'(a) + \frac{h^2}{2!} f''(a) \pm \frac{h^3}{3!} f'''(a) + \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(a)$$

$$\pm \frac{h^5}{5!} f^{(5)}(a) + \cdots,$$

$$G(h) \overset{\Delta}{=} \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} = f'(a) + \frac{h^2}{3!} f'''(a) + \frac{h^4}{5!} f^{(5)}(a) + \cdots.$$

误差估计 $|G(h) - f'(a)| \le \frac{h^2}{6} M,$

其中$M \ge \max\limits_{|x-a| \le h} |f'''(x)|$

误差估计由于舍入误差的影响，h**不是越小越好**

数值微分

设计算$f(a+h)$和$f(a-h)$分别有舍入误差ε_1和ε_2, 记$\varepsilon = \max$ $\{|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2|\}$，则计算$G(h)$的舍入误差$\le \dfrac{|\varepsilon_1|+|\varepsilon_2|}{2h} = \dfrac{\varepsilon}{h}$.

计算$f'(a)$的误差上界为 $$E(h) \le \frac{h^2}{6}M + \frac{\varepsilon}{h}.$$

最优步长$h = \sqrt[3]{3\varepsilon / M}$.

设$f(x) = \sqrt{x}$, 四位数字计算$f'(2)$，$h=$?

$$h = \sqrt[3]{3\times 0.5\times 10^{-4}\times 4\times (2+h)^{3/2}} < \sqrt[3]{24\times 10^{-4}} = 0.1339.$$

插值型求导公式

已知函数$y = f(x)$的节点上的函数值$y_i = f(x_i)\ (i = 0,1,\cdots,n)$,

建立插值多项式$P(x)$.

取 $$f'(x) \approx P'(x),$$

统称为**插值型求导公式**

余项

$$f'(x) - P_n'(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x) + \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f^{(n+1)}(\xi),$$

其中$\xi \in (a,b), \omega_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n}(x - x_j)$.

$$\Rightarrow \qquad f'(x_k) - P_n'(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k).$$

插值型求导公式

下面考虑在等距节点时节点上的导数值.

1. 两点公式

$$P_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1),$$

$$P_1'(x)=\frac{1}{h}[-f(x_0)+f(x_1)],$$

$$P_1'(x_0)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)],\ P_1'(x_1)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)].$$

$$f'(x_0)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]-\frac{h}{2}f''(\xi),$$

$$f'(x_1)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]+\frac{h}{2}f''(\xi).$$

插值型求导公式

2. 三点公式

$$P_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)$$
$$+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2).$$

$$P_2(x_0+th)=\frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0)-t(t-2)f(x_1)+\frac{1}{2}t(t-1)f(x_2).$$

$$P_2'(x_0+th)=\frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)].$$

$$P_2'(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)],$$

$$P_2'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)],$$

$$P_2'(x_2)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)].$$

插值型求导公式

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

$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]-\frac{h^2}{6}f'''(\xi),$$

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

高阶导数公式

$$f^{(k)}(x)\approx P_n^{(k)}(x),\quad k=1,2,\cdots.$$

如： $P_2''(x_0+th)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]$, 误差为$-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)$

数值微分

- 插值函数的微商作为函数微商的近似
- 常用的等距节点的数值微分公式
  - 一阶导数$f'(x_0)=\frac{y_1-y_0}{h}-\frac{h}{2}f''(\xi)$
  - $f'(x_1)=\frac{y_1-y_0}{h}+\frac{h}{2}f''(\xi)$
  - $f'(x_0)=\frac{-y_2+4y_1-3y_0}{2h}+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$
  - $f'(x_1)=\frac{y_2-y_0}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$
  - 二阶导数$f'(x_2)=\frac{3y_2-4y_1+y_0}{2h}+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$
  - $f''(x_1)=\frac{y_2-2y_1+y_0}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)$
- 步长越小截断误差越小，但舍入误差越大

第六章 解线性方程组的直接法

- Gauss消去法
- 主元素法
- LU分解
- LL^T分解和LDL^T分解
- 误差分析

引言

- 解线性代数方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

- 矩阵方程 $Ax = b$

  常用增广矩阵表示 $(A \mid b)$
- 解法
  - **直接法:用有限步计算得到准确解**
  - **迭代法:给出一个近似解序列**

直接法

- Crame法则
  计算量太大,以$(n+1)!$计,不实用
  $$(11! = 39916800)$$
- 高斯消去法
  计算量以n^3计 .
- 直接法
  - 解线性代数方程组
  - 求行列式
  - 求逆矩阵

三角方程组

- 例1:向前代入消去法

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & & & 3 \\ 2 & 1 & & 1 \\ -1 & 2 & 1 & -7 \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & & & 3 \\ & 1 & & -5 \\ & & 1 & 6 \end{array}\right]$$

- 例2:向后代入消去法(回代)

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 2 & 3 & 3 \\ & 3 & 1 & -5 \\ & & 6 & 6 \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & & & 2 \\ & 1 & & -2 \\ & & 1 & 1 \end{array}\right]$$

三角方程组

- 一般情况

$$
\begin{aligned}
u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n &= g_1 \\
u_{22}x_2 + \cdots + u_{2n}x_n &= g_2 \\
\cdots\cdots \\
u_{nn}x_n &= g_n
\end{aligned}
$$

- 算法:当$u_{11}u_{22}\cdots u_{nn} \neq 0$时,可解出

$x_n = \dfrac{g_n}{u_{nn}}$

for $\quad k = n-1:1$

$\quad x_k = \dfrac{g_k - u_{k,k+1}x_{k+1} - \cdots - u_{kn}x_n}{u_{kk}}$

end

三角方程组

- 算法注记
  - 程序实现时x, g可共用一组单元,即回代就地完成
  - 回代加法和乘法运算各$\frac{n(n-1)}{2}$,除法n次
  - 亦可解出一未知数即代入其它方程,消去该未知数
  - 其它形式三角方程组可类似计算

Gauss消去法算例

- 例1：
- $$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 3 & 3 & 7 \\ 4 & 7 & 7 & 1 & 18 \\ -2 & 4 & 5 & -7 & 7 \end{bmatrix}$$

  $k = 1$:
  2行减1行2倍
  3行减1行(–1)倍

  $k = 2$:
  3行减2行2倍

  回代

2	2	3	3	7
4	7	7	1	18
-2	4	5	-7	7
2	2	3	3	7
2	3	1	-5	4
-1	6	8	-4	14
2	2	3	3	7
2	3	1	-5	4
-1	2	6	6	6
1			2	1
	1		-2	1
		1	1	1

（1）消元过程

第一步：若 $a_{11}^{(1)} \neq 0$，用 $m_{i1} = -a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)}$ 乘第一行加到第i行中，得到

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix}.$$

其中

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} + m_{i1} \cdot a_{1j}^{(1)},\ (i, j = 2,3,\cdots,n)$$

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} + m_{i1} \cdot b_1^{(1)},\ (i = 2,3,\cdots,n)$$

第二步：若 $a_{22}^{(2)} \neq 0$，用… ….

… …

第k步：若 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 用 $m_{ik} = -a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$ 乘第k行加到第i行中，得到

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & a_{1k+1}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & a_{kk+1}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & 0 & a_{k+1k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k+1n}^{(k+1)} \\ & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & 0 & a_{nk+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{nn}^{(k+1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_k \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ b_{k+1}^{(k+1)} \\ \vdots \\ b_n^{(k+1)} \end{bmatrix}.$$

其中

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} + m_{ik} \cdot a_{kj}^{(k)}, \ (i, j = k+1, \cdots, n)$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} + m_{ik} \cdot b_k^{(k)}, \ (i = k+1, \cdots, n)$$

第n−1步：　⋯ ⋯

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}.$$

（2）回代过程

若 $a_{nn}^{(n)} \neq 0,$　则

$$x_n = b_n^{(n)} \Big/ a_{nn}^{(n)}$$

$$x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) \Big/ a_{kk}^{(k)},\ (k = n-1, \cdots, 1)$$

顺序消元

- 算法

for $k = 1:n-1$

    if $a_{kk} \neq 0$

        for $i = k+1:n$

            $m_{ik} = a_{ik}/a_{kk}$ $\{m_{ik}$可置于$a_{ik}\}$

            i行$=$ i行$-$ k行$\times$ m_{ik} {前k列元素不在内}

        end

    else stop

    end

end

Gauss消去法运算量

乘除法运算工作量

$$\boxed{\text{第}k\text{步消元：}\ m_{ik}: n-k\text{次除法}, a_{ij}^{(k+1)}: (n-k)^2\text{次乘法}, b_i^{(k+1)}: n-k\text{次乘法}, (i,j=k+1,\cdots,n).}$$

消元过程乘除法次数：$\sum\limits_{k=1}^{n-1}(n-k)^2+2\sum\limits_{k=1}^{n-1}(n-k)=\frac{1}{3}n^3+\frac{1}{2}n^2-\frac{5}{6}n$

$$\boxed{\sum_{k=1}^{n}k=\frac{n(n+1)}{2}}$$

回代过程乘除法次数：$\sum\limits_{k=1}^{n}k=\frac{1}{2}n(n+1)$

总的乘除法运算次数：$\frac{1}{3}n^3+n^2-\frac{1}{3}n$

$$\boxed{\sum_{k=1}^{n}k^2=\frac{n(n+1)(2n+1)}{6}}$$

Gauss消去法

- 如果矩阵A本身是三对角矩阵，则计算量可以进一步降低到O(n)，此时消去法也称为追赶法

Gauss消去法求行列式

- 行列式
  - $\boldsymbol{det}(\boldsymbol{A_k}) = \boldsymbol{det}(\boldsymbol{U_k}) = u_{11}u_{22}\cdots u_{kk}, k = 1,2,\cdots,n$
    U是顺序消元过程结束时的上三角矩阵. A_k和U_k分别是A和U的k阶主子阵
  - 例1中系数矩阵的行列式等于2×3×6=36.

定理 约化的主元素$a_{ii}^{(i)} \neq 0(i=1,2,\cdots,k) \Leftrightarrow A$的顺序主子式$D_i \neq 0(i=1,2,\cdots,k)$，即

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0,\ (i=1,2,\cdots,k).$$

Gauss消去法求逆矩阵

- 逆矩阵
  - 解n个方程组$(A|I)$,其中I是单位矩阵.
  - 需加法乘法各为$\mathrm{n}^3+O(n^2)$
  - 例中系数矩阵的逆,写出增广矩阵,消元得

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 7 & 7 & 0 & 1 & 0 \\ -2 & 4 & 5 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 2 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 5 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

最后解出

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 7/36 & 1/18 & -7/36 \\ 0 & 1 & 0 & -17/18 & -4/9 & -1/18 \\ 0 & 0 & 1 & 5/6 & -1/3 & 1/6 \end{pmatrix}$$

Gauss消去法矩阵解释

- 消去法矩阵解释
  - 消第k个元,(2),相当于左乘矩阵$M_k = I - m_k e_k^T$

    $m_k = \left(0,\cdots,0,m_{k+1,k,\ldots,}m_{nk}\right)^{\mathrm{T}}$, e_k单位向量
  - 消元结果得上三角方程组
    - $M(A|b) = (U|g), M = M_{n-1}M_{n-2}\cdots M_1$
    - $MA = U, Mb = g$
    - $A = LU, L = M^{-1} =$

      $= M_1^{-1}\cdots M_{n-2}^{-1}\ M_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$

消去法实现LU分解

- 例1(续)
- $$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 3 \\ 4 & 7 & 7 \\ -2 & 4 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ -1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 3 \\ & 3 & 1 \\ & & 6 \end{bmatrix}$$
- LU分解:顺序主子式非零, $det(A_k) \neq 0, k = 1,2,\cdots,n-1$则可唯一分解$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU}$,单位下三角阵与上三角阵之积

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ & & & \ddots & \\ & & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

LU分解

- 方法
  - 消去法实现LU分解
  - 直接LU分解(紧凑Gauss消去法)
    - 解方程$A = LU$确定I_{il}, u_{ki}
    - 追踪顺序消元所得L, U元素的历史确定I_{il}, u_{ki}
- 直接LU分解公式

$$u_{ki} = a_{kj} - m_{k1}u_{1j} - m_{k2}u_{2j} - \cdots - m_{k,k-1}u_{k-1,j},$$

$$j = k, k+1, \cdots, n$$

$$m_{ik} = \frac{a_{ik} - m_{i1}u_{1k} - m_{i2}u_{2k} - \cdots - m_{i,k-1}u_{k-1,k}}{u_{kk}}$$

$$i = k, k+1, \cdots, n$$

直接LU分解

- 算法:

for $k = 1{:}n-1$

for $\quad j = k{:}n$

$u_{kj} = a_{kj} - I_{k1}u_{1j} - I_{k2}u_{2j} - \cdots - I_{k,k-1}u_{k-1,j}$

end

for $\quad \mathrm{i} = k+1{:}n$

$$I_{ik} = \frac{a_{ik} - I_{i1}u_{1k} - I_{i2}u_{2k} - \cdots - I_{i,k-1}u_{k-1,k}}{u_{kk}}$$

end

end

u_{kj}, I_i可置A中.