计算方法

1. 插值
   - 多项式插值（唯一性）
     - 拉格朗日（基函数）
     - 牛顿（差分表）
     - > 误差.
   - Hermite插值
     - 类拉格朗日（基函数）
     - 类牛顿（差分表）
     - > 误差
   - 三次样条插值（不考）

拟合
- 多项式拟合：$\varphi = \alpha_1 \varphi_1(x) + \cdots + \alpha_n \varphi_n(x)$ [求解 α_i]
  $\|Y - F\|$ 最小、
- 解矛盾方程组（最小二乘解）：$A\alpha = Y \longrightarrow A^T A \alpha = A^T Y$

2 非线性方程求根.

[收敛速度]（n阶迭代）

- 迭代法
  - 对分法
  - 不动点法
  - Newton迭代（2阶）
    - P重根时
      - 传统：1阶 $\cancel{x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}}$ ~~(1阶)~~
      - $x_{k+1} = x_k - p\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$（2阶）
  - 弦截法（1.618阶）（Newton迭代中差商代替微商）
- 非线性方程组：类Newton公式：$J\Delta = -F$

3. 线性方程组求解
   - 直接法
     - Gauss
       - 顺序消元（$\sim n^3$）
       - 列主元（$\sim n^3$）
     - 直接分解：$Ax = b \Rightarrow LUx = b$ $\begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$
       - Crout
       - Doolittle
       - 三对角方程组（追赶）
       - 对称正定矩阵（LDL^T）
   - 迭代法：$Ax = b \Rightarrow X^{(k+1)} = MX^{(k)} + g$.
     - Jacobi迭代
     - Gauss-Seidel迭代
     - 松弛迭代

※一般的迭代：
- 对M有要求.
- 可估算[收敛快慢].

4. 数值积分：

[代数精度]
[截断误差]

- 插值型（任意选点，但积分系数不固定）
- Newton-Cotes（固定（等距）选点，积分系数固定）
  - 一阶（梯形）
  - 二阶（Simpson）（抛物线）
  - n ≤ 7阶时，此法稳定.
- 复化数值积分（分段积分）
- Gauss型积分（固定（不等距）选点，积分系数固定）

数值微分.

[截断误差]

- Taylor展开法
- 插值型

5. 常微分方程.

基础知识

1. 误差

误差：绝对、相对

产生原因：原始误差（模型误差和数据误差）、截断误差、舍入误差

2. 有效位数.

① 对于未标明误差的数：认为它是经四舍五入得到的，则正常地数位数即可.

② 对于标明误差的数：按定义（见第三版 P3）　例如 5.12 ± 0.1：有效位数为 2

5.12 ± 0.7：有效位数为 1

3. 范数：

(1) 向量范数：

定义：$\|X\|$

- 非负性：$\|X\| \geq 0$（当且仅当 $X=0$ 时取等）
- 齐次性：$\|\alpha X\| = |\alpha| \|X\|$
- 三角不等式：$\|X+Y\| \leq \|X\| + \|Y\|$

1-范数：$\|X\|_1 = \sum |x_i| = |x_1| + \cdots + |x_n|$

2-范数：$\|X\|_2 = \sqrt{\sum |x_i|^2} = \sqrt{x_1^2 + \cdots + x_n^2}$

∞-范数：$\|X\|_\infty = \sqrt[\infty]{\sum |x_i|^\infty} = \max\{|x_1|, \cdots |x_n|\}$

※ $1 \leq \frac{\|X\|_1}{\|X\|_\infty} \leq n$　　$1 \leq \frac{\|X\|_2}{\|X\|_\infty} \leq \sqrt{n}$

$1 \leq \frac{\|X\|}{\|X\|_\infty} \leq \sqrt{n}$

(2) 矩阵范数

定义：$\|A\|$ — 非负性 $\|A\| \geq 0$ （当且仅当 $A=0$ 时取等）
— 齐次性 $\|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|$
— 三角不等式 $\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|$

$\|A\|_1 = \max\limits_{1\leq j\leq n} \left\{ \sum\limits_{i=1}^{n} |a_{ij}| \right.$ 列和取最大

$\|A\|_2 = \sqrt{\max\{|\lambda_i|\}}$ （λ_i 是 A^TA 的特征值）

（一列 无穷行
二找 特征值
全是绝对值
全是取最大）

$\|A\|_\infty = \max\limits_{1\leq i\leq n} \left\{ \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}| \right\}$ 行和取最大

$(\|A\|_F = \sqrt{\sum a_{ij}^2})$

※谱半径：$\rho(A) = \max\{|\lambda_i|\}$ $\quad (\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^TA)})$

※ $|\lambda_i| \leq \|A\|$ $\quad (|\lambda| \|x\| = \|\lambda x\| = \|Ax\| \leq \|A\| \|x\|)$

※ $\rho(A) \leq \|A\|$

※ $\rho(A) < 1 \iff \lim\limits_{k\to\infty} A^k = 0$

(3) 条件数：

定义：$Cond_p(A) = \|A\|_p \|A^{-1}\|_p \geq \|AA^{-1}\| = 1$

① 由 $A\delta x = \delta b$ 可得：$\dfrac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq Cond(A) \dfrac{\|\delta b\|}{\|b\|}$

② 由 $(A+\delta A)(x+\delta x) = b$ 可得：

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{Cond(A)\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1 - Cond(A)\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}$$

※条件数越大，表明解对 A.b 的敏感性越大，误差越可能大。

插值

1. 多项式插值.

① 唯一性：用待定系数法，解出的系数唯一.

② 拉格朗日: $L_n(x)=\sum_i l_i(x)\cdot f(x_i)$ $\quad l_i(x)=\dfrac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_n)}$

③ 牛顿法: $N(x)=\sum_i t_i(x)\,f[x_0,\cdots,x_i]$

$$=f(x_0)+(x-x_0)f[x_0,x_1]+(x-x_0)(x-x_1)f[x_0,x_1,x_2]+\cdots$$

④ 截断误差（余项） $R(x)=f[x,x_0,\cdots x_n]\cdot\prod(x-x_i)$

$$=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod(x-x_i)\qquad(\xi\in[x_0,x_n])$$

2. Hermite 插值:

① 类拉格朗日: 设基函数 $h_i(x)$, $g_i(x)$ ，均为 $N-1$ 阶. 有

$h_1(x_1)=1$	$h_1(x_2)=0$	$h_1'(x_1)=0$	$h_1'(x_2)=0$
$h_2(x_1)=0$	$h_2(x_2)=1$	$h_2'(x_1)=0$	$h_2'(x_2)=0$
$g_1(x_1)=0$	$g_1(x_2)=0$	$g_1'(x_1)=1$	$g_1'(x_2)=0$
$g_2(x_1)=0$	$g_2(x_2)=0$	$g_2'(x_1)=0$	$g_2'(x_2)=1$

($h_1(x_1)=1$; $h_2(x_2)=1$; $g_1'(x_1)=1$; $g_2'(x_2)=1$)

② 类牛顿：差分表.

③ 截断误差: $R(x)=\dfrac{f^{(N)}(\xi)}{N!}\prod(x-x_i)$ (N为待定系数的个数)
(N-1为方程阶数)

拟合

1. 多项式拟合： $\varphi = \alpha_1\varphi_1(x) + \alpha_2\varphi_2(x) + \cdots + \alpha_n\varphi_n(x)$.

$$\Rightarrow \begin{cases} \alpha_1\varphi_1(x_1) + \cdots + \alpha_n\varphi_n(x_1) = \varphi(x_1) \\ \alpha_1\varphi_1(x_2) + \cdots + \alpha_n\varphi_n(x_2) = \varphi(x_2) \\ \vdots \\ \alpha_1\varphi_1(x_m) + \cdots + \alpha_n\varphi_n(x_m) = \varphi(x_m) \end{cases}$$

n个未知数.
m个方程
$m \geq n$.

$$\Rightarrow \underset{(m\times n)}{A} \quad \underset{(n\times 1)}{\alpha} = \underset{(m\times 1)}{Y}.$$

2. 解超定方程组：

$A\alpha = Y$ 最小二乘解为： $\underset{(n\times m)}{A^T}\underset{(m\times n)}{A}\underset{(n\times 1)}{\alpha} = \underset{(n\times m)}{A^T}\underset{(m\times 1)}{Y}$

$(n\times n)\ (n\times 1) \sim (n\times 1)$

非线性方程求根

※ 收敛速度： 设真实根为 x^*

误差为 $e_k = |x_k - x^*|$

则若有 $\lim\limits_{k\to\infty} \dfrac{|e_{k+1}|}{|e_k|^n} = M$ ，

则迭代格式收敛的阶为 n . （详细内容见第三版 P_{66} ）

1. 迭代法：

① 对分法 .

② 不动点法： $x_{k+1} = \varphi(x_k)$

条件：在 $[a,b]$ 上， $\varphi(a) > a$ ， $\varphi'(x) \le L < 1$ ， $\varphi(b) < b$

误差： $e_k \le \dfrac{L^k}{1-L} |x_1 - x_0|$

[可证，若 $\varphi(x^*) = \cdots = \varphi^{(p-1)}(x^*) = 0$ ， $\varphi^{(p)}(x^*) \ne 0$ ，则收敛阶为 p]

③ Newton法：

$$x_{k+1} = -\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (2阶)$$

↓ 差分代替微分：

弦截法：

$$x_{k+1} = -\frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})} \quad (1.618阶)$$

2. 解非线性方程组：

类Newton法： $J_k \cdot \Delta = -F_k$

$$J = \underbrace{\begin{pmatrix} \partial f/\partial x & \partial f/\partial y & \cdots \\ \partial g/\partial x & \partial g/\partial y & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}}_{n\times n} \qquad F = \underbrace{\begin{pmatrix} f(\vec{x}) \\ g(\vec{x}) \\ \cdots \end{pmatrix}}_{n\times 1} \qquad \Delta = \underbrace{\begin{pmatrix} x_{k+1} - x_k \\ \cdots \end{pmatrix}}_{n\times 1}$$

$$\left(X_{k+1} = X_k - J^{-1}(X_k) F(X_k) \right)$$

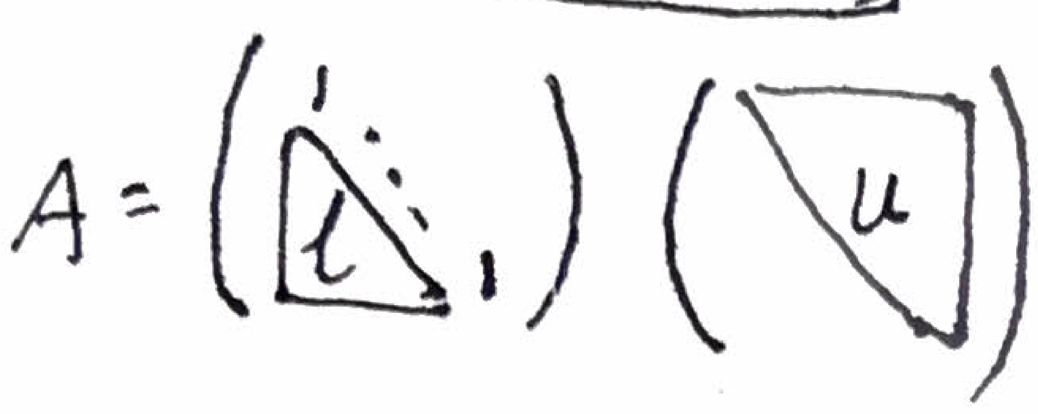
线性方程组求解-1

1. 直接法：

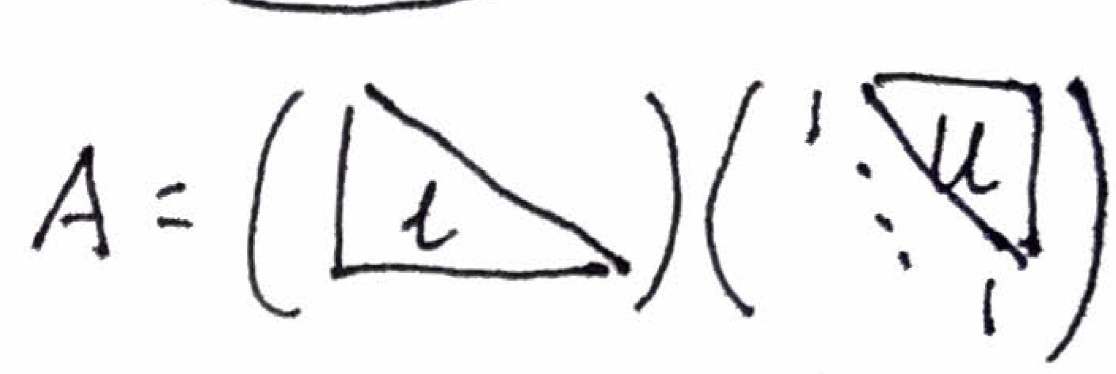
① Gauss消元（求解的运算量 $\sim n^3$）
- 顺序消元
- 列主元

② 直接分解： $LUx=b$ （在已分解出 $A=LU$ 的前提下，运算量 $\sim n^2$）

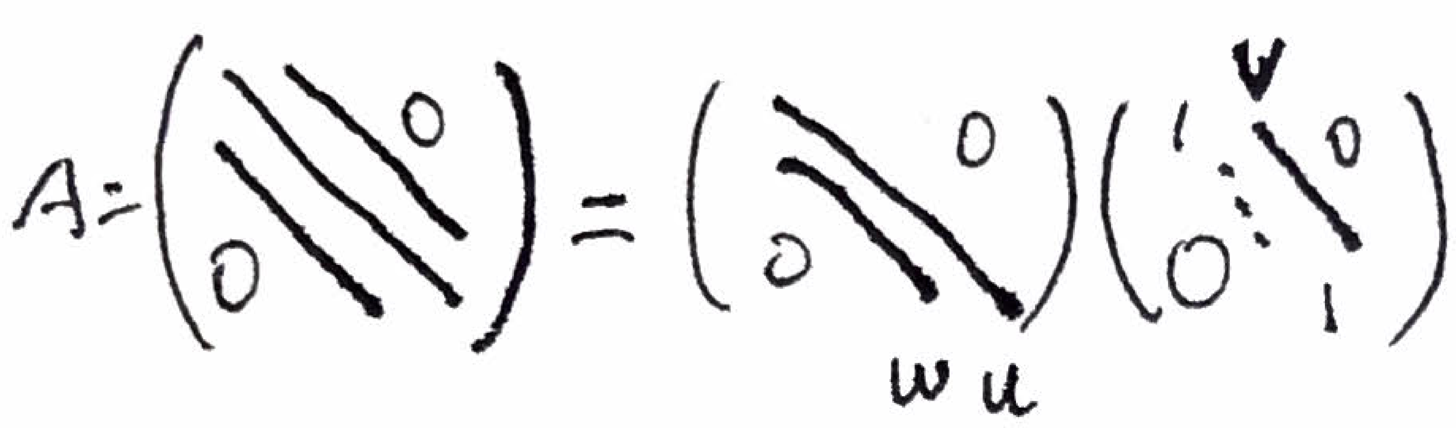
Doolittle



Crout

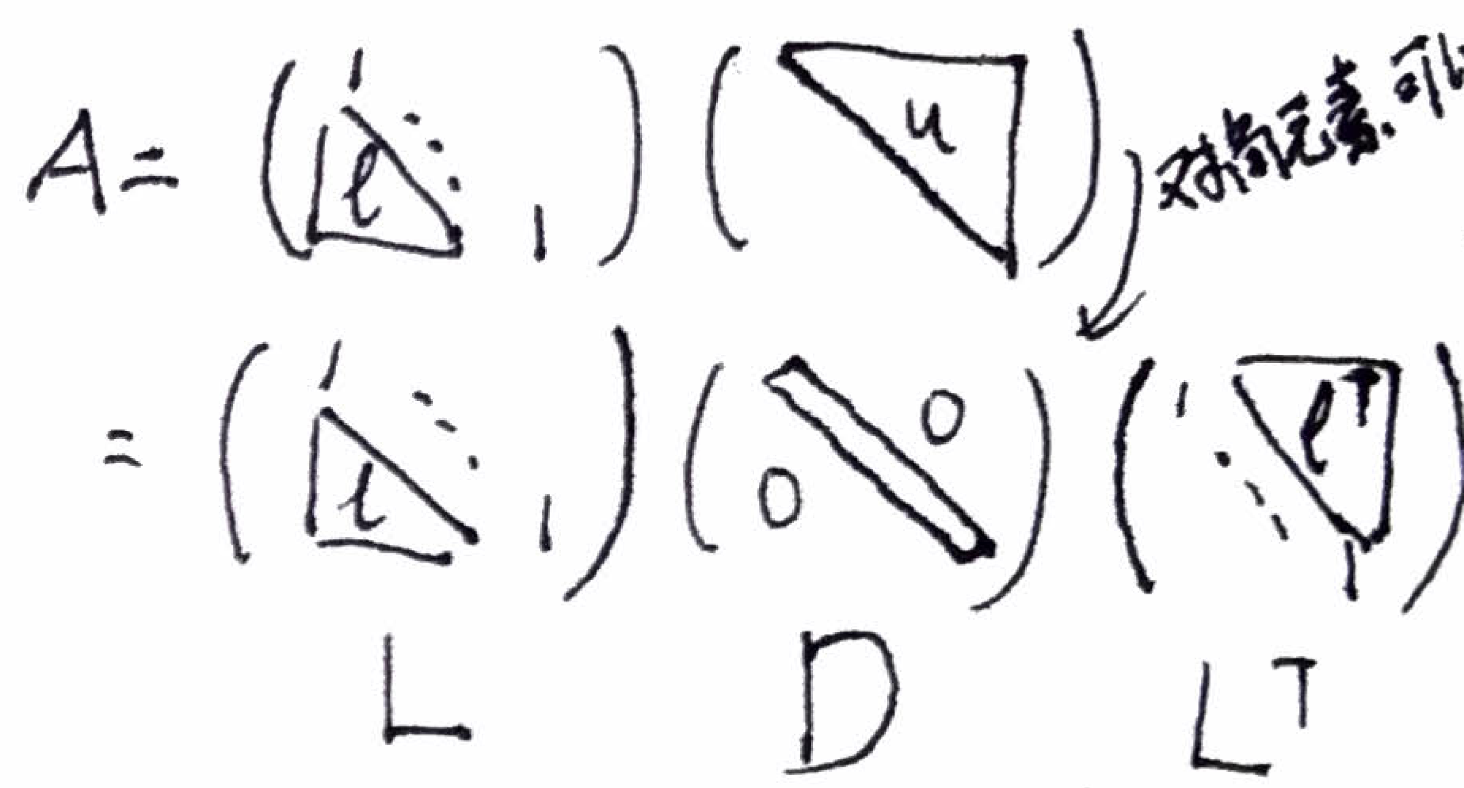


※ 三对角方程组



（先求出所有w，再依次求各个u、v、u、v…）

对称正定矩阵



对角元素可以照抄

2 迭代法

① 一般格式.

$$A = D + L + U$$

(P102)

$$Ax = b \Rightarrow (N-P)x = b$$

$$\Rightarrow x = N^{-1}Px + N^{-1}b = Mx + g$$

M: 迭代矩阵.

*对迭代收敛的充要条件: $\rho(M) < 1$ (充分: $\|M\| < 1$).

② 经典迭代: 设 $C = N^{-1}$, 则 $x = C(C^{-1} - A)x + Cb$

$$= (I - CA)x + Cb.$$

(P106)

<1>	Jacobi迭代:	$C = D^{-1}$
<2>	G-S 迭代:	$C = (D+L)^{-1}$
<3>	松弛 (SOR):	$C = (w^{-1}D + L)^{-1}$

Gauss-Seidel

③ 一些收敛判别的结论:

* (严格)行对角优: 每一行中, 对角元素(严格)大于其它元素之和.
(列) (列)

~~<1> 若M为严格对角~~ *对角优: 行 --- 或列 --- 统称 ...

<1> 若M为严格对角优, 则M可逆.

<2> 若A为 —— 则 Jacobi 迭代收敛

<3> 若A —— 则 G-S ——

<4> 若A正定, 则 G-S ——

数值积分与微分-1

※代数精度与截断误差：

<1> 对于直接选点的积分，代数精度指：此积分方法对 $\leq n$ 阶的多项式结果准确。

<2> 对于复化（分段）积分，截断误差指：$O\left(\frac{1}{n^k}\right)$，$n$ 为选点数。

<3> 对于数值微分，截断误差指：$O(h^k)$，h 为求微分时的点间距。

1. 数值积分：

① 插值型积分：任意选点，但积分系数不固定。

② Newton-Cotes 积分：

<1> 一阶（梯形积分）［1阶代数精度］ $I = h\left(\frac{1}{2}f(a) + \frac{1}{2}f(b)\right)$

<2> 二阶（Simpson 积分）［3阶代数精度］ $I = h\left(\frac{1}{6}f(a) + \frac{4}{6}f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{6}f(b)\right)$

<3> n 阶：$\begin{bmatrix} n\text{为奇：}n\text{阶代数精度} \\ n\text{为偶：}n+1\text{阶代数精度} \end{bmatrix}$ ※ $n \leq 7$ 时，Newton-Cotes 积分稳定。

※如何计算代数精度：

$$I = \int f(x)dx \approx \underbrace{\int L(x)\,dx}_{\text{插值公式}} + \underbrace{\int R(x)\,dx}_{\text{余项公式}}$$

通过算截断误差 $\int R(x)dx$，即可得到代数精度。

③ 复化数值积分：

<1> 分段梯形积分 T_n ： $\frac{1}{2}$ 1 1 … 1 1 $\frac{1}{2}$ ，截断误差 $O\left(\frac{1}{n^2}\right)$

<2> 分段 Simpson 积分 S_n ： $\frac{1}{6}$ $\frac{4}{6}$ $\frac{1}{6}$ … $\frac{1}{6}$ $\frac{4}{6}$ $\frac{1}{6}$ ，截断误差 $O\left(\frac{1}{n^4}\right)$

<3> Cotes 积分 C_n 和 Romberg 积分 R_n：

由于 $I - T_{2n} \approx \frac{1}{4}(I - T_n) \Rightarrow I \approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$ 刚好为 S_{2n}

截断误差由 $\frac{1}{(2n)^2}$ 降为 $\frac{1}{(2n)^4}$

所以进一步组合，

$$I - S_{2n} \approx \frac{1}{2^4}(I - S_n) \longrightarrow C_n$$

$$I - C_{2n} \approx \frac{1}{2^6}(I - C_n) \longrightarrow R_n$$

数值积分与微分-2

实际计算中：

$$
\begin{array}{cccc}
T_n & T_{2n} & T_{4n} & T_{8n} \\
 & S_{2n} & S_{4n} & S_{8n} \\
 & & C_{4n} & C_{8n} \\
 & & & R_{8n}
\end{array}
\quad \cdots\cdots
$$

④ Gauss型积分：

对 $I(f)=\int_{-1}^{1} f(x)\,dx$，取 Legendre 多项式 $L_n(x)$ 的 n 个零点作为积分节点。

取 $\alpha_j=\int_{-1}^{1}\frac{(x-x_1)\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_1)\cdots(x_j-x_n)}dx$ 为积分系数。

则代数精度可达 $2n-1$ 阶。

⑤ 重积分：

梯形：$\frac{1}{4}\times\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix} \longrightarrow \frac{1}{4}\begin{pmatrix}1&2&\cdots&2&1\\2&4&\cdots&4&2\\\vdots&\vdots&&\vdots&\vdots\\2&4&\cdots&4&2\\1&2&\cdots&2&1\end{pmatrix}\times$ 某系数

Simpson：$\frac{1}{36}\times\begin{pmatrix}1&4&1\\4&16&4\\1&4&1\end{pmatrix} \longrightarrow \frac{1}{36}\begin{pmatrix}1&4&2&\cdots&2&4&1\\4&16&8&\cdots&8&16&4\\2&8&4&\cdots&4&8&2\\\vdots&\vdots&\vdots&&\vdots&\vdots&\vdots\\2&8&4&\cdots&4&8&2\\4&16&8&\cdots&8&16&4\\1&4&2&\cdots&2&4&1\end{pmatrix}\times$ 某系数。

2. 数值微分：

① 依赖于 Taylor 展开：

※截断误差：按照展开式计算即可，例如，截断误差为 $O(h^n)$

※向前差商：利用 $f(x_0+h)$、$f(x_0)$ 算，截断误差为 $O(h)$

向后差商：利用 $f(x_0)$，$f(x_0-h)$ 算，截断误差为 $O(h)$

中心差商：利用 $f(x_0-h)$，$f(x_0+h)$ 算，截断误差为 $O(h^2)$

② 插值型.

数值求解常微分方程：

1. 基本概念：

① 计算形式：$y_{n+1} = \sum_{i=n-a+1}^{n} \alpha_i y_i + \sum_{i=n-a+1}^{n+1} \beta_i f_i$

其中 $f_i = f(x_i, y_i)$，α_i, β_i 为常参数。

② a 为步数，表示：为了计算 y_{n+1}，需要用到前面第 a 个 x_i 以后的信息，

即，从 x_{n-a+1} 到 x_n，共 a 步。

③ $\beta_{n+1} = 0$ 时，y_{n+1} 由右式直接求出，称为"显性"公式。

$\beta_{n+1} \neq 0$ 时，称为"隐性"公式。

④ 上式可用Taylor展开来证明，等式左右的偏差 $T = O(h^{k+1})$ 称为局部截断误差，称 k 为阶数。

⑤ 整体截断误差：

设 $|e_n| = |y(x_{n+1}) - y_{n+1}|$

$|T_n| = |R_n|$，T 为 $|T_n|$ 的上界。

则由Taylor展开可以求得 $|e_n|$ 的递推式，最终求得 $|e_n|$ 与 $|e_0|$、T 的关系。

2. 示例：Euler公式

① 基于数值微商：向前差商 $y'(x_n) \approx \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h}$ $\Rightarrow$ $y_{n+1}\cancel{(x_{n+1})} = y_n\cancel{(x_n)} + \cancel{hy'(x_n)}\ hf_n$

中心差商：2阶 ~~梯形差商~~

向后差商：$y'(x_{n+1}) \approx \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h}$ $\Rightarrow$ $y_{n+1}\cancel{(x_{n+1})} = y_n\cancel{(x_n)} + \cancel{hy'(x_{n+1})}\ hf_{n+1}$

※隐式：

② 基于数值积分：

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))\,dx$$

$$\Rightarrow y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h(f_n + f_{n+1})$$

3. 积分方法.

① $y(x_{n+1}) = y(x_{n-p}) + \int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} f(x,y)\,dx$

p: 积分范围.

用 $\{y_n, y_{n-1} \cdots y_{n-q}\}$ 计算积分式.

q: 积分节点 (节点数 $= q+1$)

※. 若用 $\{y_{n+1}, y_n, \cdots y_{n-q+1}\}$, 则为隐式.

② 具体计算过程: (以显式为例)

~~设: $y(x_{n+1}) = y(x_{n-p}) + h[a_0 f_n + a_1 f_{n-1} + \cdots + a_p f_{n-p}]$~~

则

在 $\{x_n, x_{n-1} \cdots x_{n-q}\}$ 处构造插值公式:

$$L(x) = l_0 f(x_n) + l_1 f(x_{n-1}) + \cdots + l_q f(x_{n-q})$$

则 $$y_{n+1} = y_{n-p} + \int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} L(x)\,dx$$

$$= y_{n-p} + \left(\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} l_0\,dx\right)\cdot f(x_n) + \cdots + \left(\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} l_q\,dx\right) f(x_{n-q})$$

※. $p=0$, 则称为Adam公式.

※ 对于隐式的初值计算, 可用其它方法. K阶精度的线性多步法中的起步

但是为了不影响整体截断误差,

运算至少应为K-1阶.

~~8~~ 4

① ~~基于数值~~微分方法，二 Runge-Kutta方法。

①

Taylor展 $y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2}y''(x_n) + \cdots$

其中 $y(x_n) = y(x_n)$

$y'(x_n) = f(x_n, y(x_n))$

$y''(x_n) = f_x(x_n, y(x_n)) + f_y(x_n, y(x_n)) \cdot f(x_n, y(x_n))$

$\cdots\cdots$

则取最高p阶导，余项为 $\frac{h^{(p+1)}}{(p+1)!} y^{(p+1)}(x_n + \theta h) = O(h^{p+1})$

<u>阶数为p.</u>

② Runge-Kutta方法，用点值代替偏导数，其p阶公式为：

$$
\begin{cases}
y_{n+1} = y_n + \alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2 + \cdots + \alpha_p k_p \\
\alpha_1 = f(x_n, y_n) = F(x_n; y_n) \\
\alpha_2 = f(x_n + \beta_{21} h, y_n + \beta_{22} h k_1) = F(x_n, h; y_n, hk_1) \\
\alpha_3 = f(x_n + \beta_{31} h, y_n + \beta_{32} h k_1 + \beta_{33} h k_2) = F(x_n, h; y_n, hk_1, hk_2) \\
\cdots \\
\alpha_p = F(x_n, h; y_n, hk_1, \cdots, hk_{p-1})
\end{cases}
$$

4. ~~[illegible]~~：线性多步法.

矩阵的特征值&特征向量

幂法， ~~A 按模最大的~~ $\mathrm{Max}|\lambda|$

原点位移法　$A-pI$　$\mathrm{Max}|\lambda-p|$

反幂法　A^{-1}　$\mathrm{Min}|\lambda|$

原点位移反幂法　$A^{-1}-pI$　$\mathrm{Min}|\lambda-p|$

以幂法为例

① 若 $\max|\lambda|$ 只有一个(实根)

$$X^{(k+1)} = A X^{(k)}$$

$X^{(k+1)} \longrightarrow$ 归1

归一

$X^{k} \longrightarrow A X^{(k)}$

② 若 $\max|\lambda|$ 为互为相反数的两实根 (···)