Notes of Computational Method

Michael Zhu

2016.6.8

Contents

0 绪论

绝对误差 $e = x^* - x$

绝对误差限 $|e| \le \epsilon$

相对误差 $e_r = \frac{x^* - x}{x^*}$

相对误差限 $|e_r| \le \epsilon_r$

产生误差的主要原因 原始误差，截断误差，舍入误差

有效位数 当 x 的误差限为某一位的半个单位，则这一位到第一个非零位的位数称为 x 的有效位数。

向量范数（L_p） $\|\mathbf{X}\|_p = (\sum_{i=1}^n |x_i|^p)^{1/p}$，$1 \le p \le \infty$.

$p = 1$ $\|\mathbf{X}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$

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

$p = \infty$ $\|\mathbf{X}\|_\infty = \max\limits_{1 \le i \le n} \{|x_i|\}$

矩阵范数 $\|\mathsf{A}\| = \sup\limits_{\substack{x \in \mathbf{R}^n \\ x \ne 0}} \frac{\|\mathsf{A}\mathbf{X}\|}{\|\mathbf{X}\|}$ 或 $\|\mathsf{A}\| = \sup\limits_{\substack{x \in \mathbf{R}^n \\ \|x\| = 1}} \|\mathsf{A}\mathbf{X}\|$

$p = 1$ $\|\mathsf{A}\|_1 = \max\limits_{1 \le j \le n} \sum_{i=1}^n |a_{i\ j}|$

$p = \infty$ $\|\mathsf{A}\|_\infty = \max\limits_{1 \le i \le n} \sum_{j=1}^n |a_{i\ j}|$

$p = 2 \quad \|\mathsf{A}\|_2 = (\rho(\mathsf{A}^T A))^{1/2}$

谱半径　$\rho(\mathsf{A}) = \max_i\{|\lambda_i|\}$

Euclid/Schur　$\|\mathsf{A}\|_E = (\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2)^{1/2}$

特征值与范数　$|\lambda| \le \|\mathsf{A}\|$，$\rho(\mathsf{A}) \le \|\mathsf{A}\|$.

1　插值

1.1　Lagrange 插值

基函数

$$l_i(x) = \prod_{\substack{0 \le j \le n \\ j \ne i}} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

插值多项式

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x) f(x_i)$$

误差

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i), \quad \xi \in [a, b]$$

1.2　Newton 插值

差商

一阶差商　$f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$

k 阶差商　$f[x_0, x_1, \cdots, x_n] = \frac{f[x_1, x_2, \cdots, x_k] - f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}$

差商的性质

(1)

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\sum_{i=0}^{k}\frac{f(x_i)}{\prod\limits_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne i}}(x_i-x_j)}$$

(2) 差商与节点的顺序无关。

插值多项式

$N(x)=f(x_0)+(x-x_0)f[x_0,x_1]+\cdots+(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})f[x_0,x_1,\cdots,x_n]$

$$N(x)=f(x_0)+\sum_{k=1}^{n}f[x_0,\cdots,x_k](x-x_0)\cdots(x-x^{k-1})$$

误差

$$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)=f[x,x_0,\cdots,x_n]\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$$

和 Lagrange 插值多项式的误差完全相等。

1.3 Hermite 插值

构造基函数

利用差商构造

1.4 分段插值

插值函数

$$p_i(x)=\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}f(x_i)+\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}f(x_{i+1}),\quad x_i\le x\le x_{i+1}$$

1.5 三次样条函数

2 数值微分和数值积分

2.1 数值微分

2.1.1 差商和数值微分

差商

向前差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}$$

$$R(x) = -\frac{h}{2}f''(\xi) = O(h)$$

向后差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h}$$

$$R(x) = \frac{h}{2}f''(\xi) = O(h)$$

中心差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}$$

$$R(x) = -\frac{h^2}{6}f'''(\xi) = O(h^2)$$

2.1.2 插值型数值微分

$$f(x) \approx L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i)$$

$$f'(x) \approx L_n'(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i'(x) f(x_i)$$

误差项

$$R(x)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\right)$$

$x=x_j$

$$f'(x_j)=\sum_{i=0}^{n}l_i'(x_j)f(x_i)$$

$$R(x_j)=\prod_{\substack{i=0\\i\neq j}}^{n}(x_j-x_i)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

2.2 数值积分

代数精度

$$E_n(x^k)=I(x^k)-I_n(x^k)=0,\ \ k=0,1,\cdots,m$$

而

$$E_n(x^{m+1})\neq 0,$$

则称 $I_n(f)$ 具有 m 阶代数精度。具有 m 阶代数精度时，对于任意不高于 m 次的多项式 $f(x)$ 都有 $I(f)=I_n(f)$.

2.2.1 插值型数值微分

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx\int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n}\left[\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x\right]f(x_i)$$

误差

$$E_n(f)=\int_a^b f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x]\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\mathrm{d}x$$

2.2.2 Newton-Cotes 积分

取等距节点，亦即对区间做等距剖分。

n 为偶数时具有 $n+1$ 阶代数精度，n 为奇数时具有 n 阶代数精度。

梯形积分

$$T(f) = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$$

$$E_1(x) = -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

具有 1 阶代数精度。

Simpson 积分

$$S(f) = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$

$$E_2(f) = -\frac{f^{(4)}(\eta)}{2880}(b-a)^5$$

具有 3 阶代数精度。

2.3 复化数值积分

2.3.1 复化梯形积分

$$T(h) = T_n(f) = h\left[\frac{1}{2}f(a) + \sum_{i=0}^{n-1} f(a+ih) + \frac{1}{2}f(b)\right]$$

截断误差

$$E_n(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi) \sim O(h^2)$$

2.3.2 复化 Simpson 积分

$$S_n(f) = \frac{h}{3}\left[f(a) + 4\sum_{i=0}^{m-1} f(x_{2i+1}) + 2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i}) + f(b)\right]$$

截断误差

$$E_n(f) = -\frac{(b-a)^5}{180n^4}f^{(4)}(\xi) \sim O(h^4)$$

2.3.3 Romberg 算法

$$R_{k,j} = R_{k,j-1} + \frac{R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}$$

2.4 重积分计算

2.4.1 复化梯形积分

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \approx hk \sum_i \sum_j c_{ij} f(x_i, y_j), \quad c_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{4}, & \text{角点} \\ \frac{1}{2}, & \text{边点} \\ 1, & \text{内点} \end{cases}$$

2.5 Gauss 型积分

$2n-1$ 阶代数精度, n 个节点的最高代数精度。

$$G_n(f) = \frac{(b-a)}{2} \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^{(n)} f\left(\frac{(a+b) + (b-a)x_i^{(n)}}{2} \right)$$

3 曲线拟合的最小二乘法

3.1 线性拟合与二次拟合

3.1.1 线性拟合

$$\begin{pmatrix} m & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix}$$

3.1.2 二次拟合

$$\begin{pmatrix} m & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \sum x_i^2 y_i \end{pmatrix}$$

更高次如法炮制即可。

非多项式可以做代换，但代换后不一定满足平方误差极小。

3.2 解矛盾方程组

求 $\|\mathrm{A}\alpha - Y\|^2$ 的极小问题**等价**于解方程组

$$\mathrm{A}^T\mathrm{A}\alpha = \mathrm{A}^T Y.$$

4 非线性方程求根

4.1 二分法

算法简单，但是有局限：只能算出其中一个、必须要求 $f(a)f(b) < 0$ 、只能计算实根。

4.2 迭代法

基本步骤

(1) 构造等价形式 $f(x) = 0 \Leftrightarrow x = \phi(x)$

(2) 取合适初值 x_0 构造迭代序列 $x_{k+1} = \phi(x_k)$

(3) 若极限不存在，可以考虑更换初值或者迭代格式。

压缩映射定理 $\phi(x) \in C^1[a,b]$ 满足

$$a \le \phi(x) \le b, x \in [a,b]$$

及

$$\exists 0 < L < 1, \forall x \in [a,b], |\phi'(x)| \le L,$$

则 $\phi(x)$ 不动点唯一，且对于 $x_0 \in [a,b]$ 的迭代序列有误差估计

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

4.3 Newton 法

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

对于单重根一定收敛，为二阶方法。

对于 p 重根，为一阶迭代方法，但可取以下格式，则仍为二阶方法

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

4.4 弦截法

用差商代替导数

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

为 1.618 阶迭代方法。

4.5 方程组的 Newton 法

$$\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{X}_k - \mathrm{J}^{-1}(\mathbf{X}_k)F(\mathbf{X}_k)$$

若

$$\|\mathrm{J}(\mathbf{X})\|_\infty \le L < 1,$$

则迭代收敛。

5 线性方程组–直接法

5.1 消元法

5.1.1 Gauss 消元法

系数矩阵化为上三角，然后回代求解。

运算量为 $O(n^3)$

可行的充要条件是 A 的各阶顺序主子式不为零。

对角元很小会导致舍入误差的扩散。

5.1.2 列主元消元法

将第 k 列第 k 到 n 个元素绝对值最大的元素放在对角位置，然后进行消元。

相较于 Gauss 消元法只增加了选列主元和交换两行元素的过程。

5.1.3 Gauss-Jordan 消元法

将系数矩阵进一步化为对角矩阵。

但是化为对角阵的工作量略大于回代求解。

5.2 直接分解法

5.2.1 Dolittle 分解

L 为单位下三角阵（对角元为 1 ）， U 为上三角阵。

计算步骤 U 第一行，L 第一列，U 第二行，L 第二列……

5.2.2 Courant 分解

L 为下三角阵， U 为单位上三角阵。

计算步骤 L 第一列， U 第一行，L 第二列， U 第二行……

5.2.3 追赶法

6 线性方程组–迭代法

6.1 Jacobi 迭代

6.2 Gauss-Seidel 迭代

6.3 松弛迭代

6.4 逆矩阵计算

7 矩阵的特征值与特征向量

7.1 幂法

求解按模最大特征值。

7.1.1 幂法的计算

选取初值 $\mathbf{X}^{(0)}$, 构造向量序列

$$\mathbf{X}^{(k)} = \mathrm{A}\mathbf{X}^{(k-1)}$$

若相邻两个向量各个分量比趋于一个常数，则

$$\lambda_1 \approx x_i^{(k+1)}/x_i^{(k)},\ \ \mathbf{v}_1 \approx \mathbf{X}^{(k)}$$

若奇偶序列各个分量比分别趋向于常数，则

$$\lambda_1 \approx \sqrt{x_i^{(k+1)}/x_i^{(k-1)}},\ \ \mathbf{v}_{1,2} \approx \mathbf{X}^{(k+1)} \pm \lambda_1 \mathbf{X}^{(k)}$$

7.1.2 幂法的规范运算

避免计算溢出、归零。

$$\mathbf{Y}^{(k)} = \mathbf{X}^{(k)}/\|\mathbf{X}^{(k)}\|_\infty,\ \ \mathbf{X}^{(k+1)} = \mathrm{A}\mathbf{Y}^{(k)}\ \ (k = 0, 1, \cdots)$$

7.2 反幂法

求解按模最小特征值。

7.3 实对称矩阵的 Jacobi 法

7.4 QR 方法

8 常微分方程数值解

基本步骤

(1) 对区间做分割

(2) 建立求格点函数的差分方程（递推关系式）：微分、积分、 Taylor 展开

(3) 解差分方程，求出格点函数

8.1 Euler 公式

8.1.1 基于数值差商

向前差商

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

是一步显式格式。

向后差商

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$$

是一步隐式格式，需要用迭代求解。

Picard 迭代格式

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)})$$

中心差商

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

是二步二阶格式，因为该格式不稳定，故不采用。

8.1.2 基于数值积分

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

矩形近似 可得到向前/向后差分公式。

梯形近似

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}))$$

此为隐式格式。

一般先用其他较为粗糙的显式公式预估初始值，再用隐式公式迭代一次进行修正，称为**预估-校正过程**。

改进后的 Eular 公式

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n)))$$

8.2 Runge-Kutta 法

8.3 线性多步法

8.4 常微分方程组的数值解法