数值分析

Xiaozhou Li@2024

最小二乘拟合

$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)$

- 正规方程组（内积）
  - $A^TAx = A^Tb$
  - $$\begin{pmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\varphi_0,f) \\ (\varphi_1,f) \\ \vdots \\ (\varphi_n,f) \end{pmatrix}$$
- 函数逼近（内积）
  - 正交多项式（对角系数矩阵）
    - 正交化
    - Legendre多项式
    - Chebyshev多项式（极性）
- 数据拟合（连续形式）
  - 超定方程组的最小二乘解 $Ax = b$
  - 二次函数求极值

数据的插值方法

- 多项式插值
  - 误差余项
    - $R_n(x) = f[x_0,\ldots,x_n,x]\,\omega_{n+1}(x)$
    - $\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)\cdots(x-x_n)$
  - Lagrange插值
    - 基函数 $\ell_j(x) = \prod_{i\neq j}\frac{x-x_i}{x_j-x_i}$
    - $L_n(x) = \ell_0(x)y_0 + \ell_1(x)y_1 + \cdots + \ell_n(x)y_n$
  - Newton插值
    - $P(x) = f[x_0] + f[x_0,x_1](x-x_0) + \cdots + f[x_0,x_1,\ldots,x_n](x-x_0)\cdots(x-x_{n-1})$
    - Newton差商的计算
  - 存在唯一性
  - Runge现象
  - 误差控制
- 分段插值 $[x_j, x_{j+1}]$
  - 分段线性插值
  - 两点三次Hermit插值
  - 三次样条

数值微分和积分

- 数值微分
  - 有限差分格式
  - 收敛阶 $\mathcal{O}(h^n)$
  - 外推
- 数值积分
  - 复合积分
  - 基于插值的积分公式
    - 梯形法制 $\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}(f(a)+f(b)) - \frac{h^3}{12}f''(c)$
    - Simpson法则 $\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)$
    - Newton–Cotes公式
  - 代数精度
  - Gauss积分（最优精度）

常微分方程的数值解

$y'(t) = f(t, y(t))$

- 线性多步法
  - $\sum_{j=0}^{k}\alpha_j y_{n+j} = h\sum_{j=0}^{k}\beta_j f(t_{n+j}, y_{n+j})$
  - Euler法
    - 一阶：$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n)$
    - 一阶：$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1})$
    - 二阶：$\bar{y}_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n)$，$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f(t_n,y_n) + f(t_{n+1},\bar{y}_{n+1}))$
  - 局部截断误差与精度
  - 稳定性
- 单步法（二阶）
  - $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f(t_n,y_n) + f(t_{n+1},y_{n+1}))$
  - Runge–Kutta方法
    - Runge–Kutta方法（二阶显式）
      - $k_1 = f(t_n, y_n)$
      - $k_2 = f(t_n + ah, y_n + ahk_1)$
      - $y_{n+1} = y_n + h(b_1k_1 + b_2k_2)$
- 常微分方程组
- 高阶常微分方程

非线性方程 $f(x) = 0$

- 二分法
- 不动点迭代法 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$
  - 局部收敛性
    - 初值的要求
    - $|\varphi'(x^*)| < 1$
  - 全局收敛性
    - 任意初值
    - $\exists 0 \le L < 1,\ \text{s.t.}\ |\varphi(x) - \varphi(y)| \le L|x-y|$
  - 收敛速度
    - 至少线性收敛
    - 收敛速度的判断 $\varphi'(x^*) = 0, \varphi''(x^*) = 0, \ldots$
- Newton迭代（二次收敛） $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$
  - 重根情形 $x_{k+1} = x_k - m\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$
  - 弦截法 $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}(x_k - x_{k-1})$
- 非线性方程组 $F(x) = 0$
  - $x^{(k+1)} = x^{(k)} - (JF(x^{(k)}))^{-1}F(x^{(k)})$

方程求解

线性方程组 $Ax = b$

- 直接法
  - Gaussian消元法 （LU分解）
  - 列主元消元法（PA=LU分解）
  - 计算复杂度 $\mathcal{O}(n^3)$
  - 误差（范数、条件数）
- 迭代法
  - 不动点迭代法 $x^{(k+1)} = (I - CA)x^{(k)} + Cb$
    - 最速下降法
    - Krylov子空间法（共轭梯度法等）
  - 收敛条件
    - $\exists\|\cdot\|,\ \text{s.t.}\ \|I - CA\| < 1$
    - $\rho(I - CA) < 1$
  - 矩阵严格对角占优
  - Jacobi迭代
    - $C = D^{-1}$, $x^{(k+1)} = D^{-1}(L+U)x^{(k)} + D^{-1}b$
    - 收敛条件 $\rho(B_J) = \rho(D^{-1}(L+U) < 1$
  - Gauss–Seidel迭代
    - $C = (D-L)^{-1}$, $x^{(k+1)} = (D-L)^{-1}Ux^{(k)} + (D-L)^{-1}b$
    - 收敛条件 $\rho(B_{GS}) = \rho((D-L)^{-1}U)$
    - SOR方法

矩阵的特征值 $Ax = \lambda x$

- Gerschgorin圆盘定理
  - $\lambda \in \bigcup_{i=1}^{n} G_i$, where $G_i = \left\{z \in \mathbb{C} : |z - a_{ii}| \le \sum_{j\neq i}|a_{ij}|\right\}$
- 幂迭代
  - 按模最大的特征值对应的特征向量
  - 归一化
  - 如何求特征值
  - 收敛性
- 反幂法（幂迭代的逆）
  - 按模最小的特征值对应的特征向量
  - 平移反幂法
- 加速方法