第一章 绪论

误差的概念

1. **绝对误差**
    - 定义：实际值 x 与近似值 $\tilde{x}$ 的差。
    - 公式：
    $$\text{绝对误差} = |x - \tilde{x}|$$
    - 直观意义：误差越小，近似值越接近实际值。
2. **相对误差**
    - 定义：绝对误差与实际值的比值，用于反映误差相对实际值的大小。
    - 公式：
    $$\text{相对误差} = \frac{|x - \tilde{x}|}{|x|}$$
3. **误差限**
    - 定义：误差的最大可能值，用 Δ 表示。
    - 公式：
    $$|\text{实际值} - \text{近似值}| \leq \Delta$$

有效数字的计算

1. **有效数字的定义**
   - 表示数值的准确程度，从第一个非零数字开始算起，直到最后一个可信数字。
   - 小数点的位置不影响有效数字的位数。
2. **两种方法计算有效数字：**
   - **方法一：根据误差限确定有效数字**
     若误差限为 Δ，则有效数字的最后一位应不小于 Δ 对应的位数。例如：
     - $\tilde{x} = 123.45$，误差限 $\Delta = 0.01$，则有效数字为 5 位。
   - **方法二：将近似值写成标准形式**
     - 将数值改写为 $a \times 10^n$，其中 $1 \leq |a| < 10$。a 的所有位数即为有效数字。例如：
       - $0.00567 = 5.67 \times 10^{-3}$，有效数字为 3 位。
3. **四舍五入得到的近似值和有效数字确定**
   - 规则：从最高有效位开始计算，保留 n 位有效数字。超出的部分根据四舍五入处理。
   - 示例：
     - $x = 3.14159$，保留 4 位有效数字，结果为 3.142。

数据误差对函数值的影响

对于常见的四则运算，误差传递公式如下：

1. **加减运算**

$$\Delta(z)=\Delta(x)+\Delta(y)$$

   - $z=x+y$ 或 $z=x-y$，误差为两数误差之和。

2. **乘除运算**

$$\frac{\Delta(z)}{|z|}=\frac{\Delta(x)}{|x|}+\frac{\Delta(y)}{|y|}$$

   - $z=x\cdot y$ 或 $z=x/y$，相对误差为两数相对误差之和。

3. **实例**

   - 已知 $x=2.0\pm0.1$，$y=3.0\pm0.1$：
     - $z=x+y=2.0+3.0=5.0$，误差 $\Delta(z)=0.1+0.1=0.2$。
     - $z=x\cdot y=2.0\cdot3.0=6.0$，相对误差为 $0.1/2.0+0.1/3.0=0.0833$，故 $\Delta(z)=6.0\cdot0.0833\approx0.5$。

数值计算的若干原则

1. **避免相近数相减**
   - 原因：相近数相减会放大舍入误差，导致结果不准确。
   - 解决：尝试重新整理公式，避免直接减法。
2. **避免“大数吃小数”**
   - 原因：大数和小数直接相加时，小数可能被舍入到零。
   - 示例：$1.0\times10^6+1.0$ 在有限精度计算中可能为 1.0×10^6。
   - 解决：避免在精度要求高的计算中使用不同数量级的数直接计算。
3. **避免小数做分母**
   - 原因：分母接近零时会导致结果剧烈变化。
   - 示例：$x=1/(0.001)=1000$，对分母的微小扰动影响很大。

第二章 矩阵与线性方程组

矩阵与线性方程组是线性代数的核心内容。矩阵不仅是表示线性方程组的工具，还在变换、求解和数学建模中发挥关键作用。本章将重点探讨矩阵的基础知识、运算性质以及其在线性方程组求解中的应用。

---

1. 矩阵的基本概念

1. **矩阵的定义**
   矩阵是一个由数或变量排列成的二维数组，形式为：
   $$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix},$$
   其中 a_{ij} 表示矩阵第 i 行第 j 列的元素。
2. **矩阵的类型**
   - **方阵**：行数等于列数的矩阵（例如 3×3 矩阵）。
   - **零矩阵**：所有元素为零的矩阵。
   - **对角矩阵**：只有主对角线上的元素非零的矩阵。
   - **单位矩阵** I：对角线元素为 1，其他元素为 0 的方阵。
   - **转置矩阵** A^T：将矩阵的行与列互换。

3. **矩阵的表示线性方程组**
   一个线性方程组可以用矩阵的形式表示。例如，方程组：

$$2x_1 + 3x_2 = 5,$$
$$4x_1 - x_2 = 6,$$

   表示为：

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 4 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \end{bmatrix}.$$

   记作 $Ax = b$。

---

2. 矩阵的基本运算

1. **加法与减法**
   两个维度相同的矩阵可以按对应元素相加或相减。例如：

$$A + B = \left[a_{ij} + b_{ij} \right].$$

2. **数乘**
   矩阵的每个元素乘以同一个数（标量）：

$$kA = \left[k \cdot a_{ij} \right].$$

3. **矩阵乘法**
   若 A 是 $m \times n$ 矩阵，B 是 $n \times p$ 矩阵，则其乘积 $C = AB$ 是 $m \times p$ 矩阵，元素为：

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} b_{kj}.$$

4. **转置**
   矩阵 A 的转置 A^T 将 A 的第 i 行变为 A^T 的第 i 列。例如：
   $$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}, \quad A^T = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}.$$
5. **逆矩阵**
   若 A 是 $n \times n$ 的非奇异矩阵，则存在唯一的矩阵 A^{-1}，满足：
   $$AA^{-1} = A^{-1}A = I.$$

---

3. 行列式与矩阵性质

1. **行列式的定义**
   方阵 A 的行列式是一个标量，用于刻画矩阵的性质，记作 $\det(A)$。例如，2阶矩阵的行列式为：
   $$\det(A) = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}.$$
2. **行列式的性质**
   - $\det(A^T) = \det(A)$
   - 若 A 是非奇异矩阵，则 $\det(A) \neq 0$。
   - 若 A, B 为方阵，则 $\det(AB) = \det(A) \cdot \det(B)$。
3. **矩阵可逆的条件**
   矩阵 A 可逆的充要条件是 $\det(A) \neq 0$。

---

4. 矩阵分解

矩阵分解将复杂的矩阵问题简化为更易处理的形式，是求解线性方程组和计算的基础。

1. **LU 分解**
   将方阵 A 分解为下三角矩阵 L 和上三角矩阵 U，即：

$$A = LU.$$

   适用于直接解线性方程组。

2. **QR 分解**
   将矩阵 A 分解为正交矩阵 Q 和上三角矩阵 R，即：

$$A = QR.$$

   主要用于最小二乘问题。

3. **特征值分解**
   若 A 是方阵，则存在非零向量 x 和标量 λ，使得：

$$Ax = \lambda x.$$

   其中 λ 是 A 的特征值，x 是对应的特征向量。

---

5. 线性方程组的求解

1. **直接法**
   - **高斯消元法**：通过消去未知量，将矩阵变为上三角形式，再用回代法求解。
   - **LU 分解法**：分解后高效地求解多个方程组。
2. **迭代法**
   - 雅可比法、高斯-赛德尔法等，适合稀疏矩阵或大规模问题，详见第三章。
3. **逆矩阵法**
   通过求 A^{-1} 得到解：

$$x = A^{-1}b.$$

   但计算量较大，通常不用于实际求解。

6. 应用与实例

实例：解方程组

$$
\begin{aligned}
x_1 + x_2 + x_3 &= 6, \\
2x_1 + 3x_2 + x_3 &= 14, \\
x_1 - x_2 + 2x_3 &= 8.
\end{aligned}
$$

- 矩阵形式：
$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \\ 1 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 6 \\ 14 \\ 8 \end{bmatrix}.$$
- 解法：使用高斯消元或 LU 分解快速得到解。

第三章 线性方程组的迭代法

线性方程组的迭代法是一种逐步逼近解的数值方法，适合大规模稀疏矩阵或需要在精度和计算量之间权衡的情况。常见的迭代方法包括雅可比迭代法、高斯-赛德尔迭代法，以及迭代法的收敛性条件。

---

1. 雅可比迭代法

1. **基本思想**
   将线性方程组 $Ax = b$ 转化为迭代公式，通过逐步更新解向量 x 来逼近真实解。
2. **分解矩阵 A**
   矩阵 A 被分解为对角矩阵 D 和剩余部分 R：
   $$A = D + R$$
   其中，
   D 是 A 的对角线部分，
   R 是 A 的非对角线部分。
3. **迭代公式**
   雅可比迭代公式为：
   $$x^{(k+1)} = D^{-1}\left(b - Rx^{(k)}\right)$$
   进一步展开：
   $$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)}\right) \quad (\text{分量形式})$$
   其中 $x^{(k)}$ 表示第 k 次迭代的解。

4. **实现步骤**
   - 初始化：选择初始解 $x^{(0)}$。
   - 迭代：根据公式逐步计算 $x^{(k+1)}$。
   - 停止条件：当 $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|$ 小于设定的阈值 ϵ 时停止。

---

2. 高斯-赛德尔迭代法

1. **基本思想**
   与雅可比迭代类似，但每次迭代时，直接利用更新后的分量来计算新的解。
2. **迭代公式**
   高斯-赛德尔迭代公式为：

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right)$$

   - 使用已更新的 $x_j^{(k+1)}$ 和未更新的 $x_j^{(k)}$。
3. **优点**
   高斯-赛德尔方法相比雅可比方法收敛更快，计算效率更高。

---

3. 迭代法的收敛性条件

1. **收敛必要条件**
   迭代法的收敛依赖于迭代矩阵 M 的性质。对于雅可比方法和高斯-赛德尔方法，迭代矩阵分别为：

   - 雅可比方法：
     $$M_{\text{Jacobi}} = D^{-1}R$$
   - 高斯-赛德尔方法：
     $$M_{\text{GS}} = (D+L)^{-1}U$$
     其中 L 和 U 分别为 A 的下三角和上三角部分。

2. **谱半径条件**
   若迭代矩阵 M 的谱半径满足：

   $$\rho(M) = \max|\lambda_i| < 1$$

   则迭代法收敛。

3. **充分条件**

   - 若矩阵 A 对角占优（严格对角占优）：
     $$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$$
     则雅可比和高斯-赛德尔迭代均收敛。

   - 若 A 是正定矩阵，则高斯-赛德尔迭代一定收敛。

---

4. 误差分析

1. **误差传播公式**
   设真实解为 x^*，迭代误差为 $e^{(k)} = x^{(k)} - x^*$。
   则有：

$$e^{(k+1)} = Me^{(k)}$$

   误差逐步衰减的速率由 $\rho(M)$ 控制。

2. **收敛速率**
   若 $\rho(M)$ 越小，迭代方法的收敛速度越快。

---

5. 雅可比法与高斯-赛德尔法的比较

特性	雅可比法	高斯-赛德尔法
更新策略	同步更新	异步更新
收敛速度	较慢	较快
实现复杂度	简单	较复杂
适用条件	对角占优或正定	对角占优或正定

---

6. 实例解析

例子：解方程组

$$4x_1 + x_2 + x_3 = 7$$
$$x_1 + 3x_2 + 2x_3 = -8$$
$$x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 6$$

1. **雅可比法**
    - 分解矩阵 $A = D + R$:

$$D = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

    - 迭代公式:

$$x_1^{(k+1)} = \frac{1}{4}(7 - x_2^{(k)} - x_3^{(k)})$$

$$x_2^{(k+1)} = \frac{1}{3}(-8 - x_1^{(k)} - 2x_3^{(k)})$$

$$x_3^{(k+1)} = \frac{1}{5}(6 - x_1^{(k)} - 2x_2^{(k)})$$

2. **高斯-赛德尔法**
    - 迭代公式:

$$x_1^{(k+1)} = \frac{1}{4}(7 - x_2^{(k)} - x_3^{(k)})$$

$$x_2^{(k+1)} = \frac{1}{3}(-8 - x_1^{(k+1)} - 2x_3^{(k)})$$

$$x_3^{(k+1)} = \frac{1}{5}(6 - x_1^{(k+1)} - 2x_2^{(k+1)})$$

第二章 线性方程组的直接法

高斯消去法能进行到底的条件

高斯消去法是一种通过消元操作将线性方程组化为上三角形式的方法，从而便于求解。

- **条件**：高斯消去法能进行到底的条件是“各阶顺序主子式不为零”。
- **顺序主子式**：若矩阵 A 是 $n \times n$ 阶的方阵，其顺序主子式 D_k 为 A 的前 k 行、前 k 列的子矩阵的行列式。
  若任意阶的顺序主子式不为零，则高斯消去法可以成功进行，矩阵是非奇异的。

列主元消去法

列主元消去法是在高斯消去法的基础上，每一步消元时选择绝对值最大的元素作为主元，以增强数值稳定性。

- **步骤**：
  1. 对于每一列，找到绝对值最大的元素，将其所在的行交换到当前行。
  2. 使用该主元进行消元操作，消去当前列下方所有元素。
  3. 重复此过程直到矩阵变为上三角矩阵。
- **优点**：提高了算法的数值稳定性，避免了数值不稳定的情况。

三角分解

三角分解是一种将矩阵分解成上三角和下三角矩阵的过程，常用于求解线性方程组。

1. **杜利特尔分解**：
   - 将矩阵 A 分解为两个矩阵 L 和 U，其中 L 是下三角矩阵，U 是上三角矩阵。
   - $A = LU$
   - 适用条件：矩阵 A 必须是非奇异的。

2. **列主元杜利特尔分解**:
   - 在进行分解时，首先通过列主元的方式交换行，然后进行三角分解。
3. **克劳特分解**:
   - 另一种形式的LU分解，通过选择主元进行消元，特别适用于稀疏矩阵。
4. **改进的平方根法**:
   - 适用于对称正定矩阵，矩阵 A 被分解为 $A = LL^T$，其中 L 是下三角矩阵。

矩阵和向量的范数

1. **1-范数**（列和范数）：

   $$\|A\|_1 = \max_j \sum_i |a_{ij}|$$

   1-范数是矩阵各列元素绝对值之和的最大值。
2. **2-范数**（谱范数）：

   $$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$$

   2-范数是矩阵 A 的最大奇异值，也可以理解为矩阵的特征值的平方根。
3. **∞-范数**（行和范数）：

   $$\|A\|_\infty = \max_i \sum_j |a_{ij}|$$

   ∞-范数是矩阵各行元素绝对值之和的最大值。

矩阵的谱半径

矩阵 A 的谱半径是其特征值的绝对值中的最大值。

- **定义**：

$$\rho(A) = \max_i |\lambda_i|$$

  其中 λ_i 是矩阵 A 的特征值。

矩阵的条件数

矩阵的条件数描述了矩阵的数值稳定性，特别是在求解线性方程组时的稳定性。

- **2-条件数**：

$$\kappa_2(A) = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2$$

  2-条件数越大，表示矩阵在计算中的数值误差越大。

- **∞-条件数**：

$$\kappa_\infty(A) = \|A\|_\infty \cdot \|A^{-1}\|_\infty$$

第三章 线性方程组的迭代法

雅可比迭代法

雅可比迭代法通过将方程组的每个方程重新表示为一个关于变量的迭代形式来逼近解。

- **分量形式**： 对于线性方程组 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$，其中 A 是 $n \times n$ 的矩阵，$\mathbf{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^T$ 是未知量，$\mathbf{b}$ 是常数向量，雅可比迭代法的迭代公式为：

$$x_i^{(k+1)} = \frac{b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}}$$

  其中 k 表示迭代次数，$x_i^{(k)}$ 是第 i 个未知量在第 k 次迭代中的值。

- **收敛性判断**： 雅可比迭代法收敛的充分条件是矩阵 A 为**严格对角占优**，即对于任意 i，有：

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$$

  这确保了每个未知量的更新主要依赖于当前行的主对角元素。

高斯-赛德尔迭代法

高斯-赛德尔迭代法是雅可比迭代法的一种改进，它在每次迭代中使用更新后的值。

- **分量形式**： 与雅可比法类似，方程组的迭代公式为：

$$x_i^{(k+1)} = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}}$$

- **收敛性判断**： 高斯-赛德尔迭代法收敛的条件是矩阵 A 必须满足**严格对角占优**或者矩阵的**谱半径**小于1。

迭代法收敛的条件

1. **迭代矩阵的谱半径小于1**： 迭代矩阵的谱半径小于1时，迭代法收敛。对于雅可比法和高斯-赛德尔法，迭代矩阵 T 的谱半径 $\rho(T)$ 必须满足：

$$\rho(T) < 1$$

2. **迭代矩阵的范数小于1**： 迭代矩阵的范数（如2-范数或∞-范数）小于1时，迭代法收敛。
3. **系数矩阵严格对角占优**： 如果系数矩阵 A 满足严格对角占优条件，则迭代法一般收敛。