第1章 数值计算中的误差

§1.1 误差的来源与分类

1.1.1 误差的来源与分类

1. **误差的来源**
    - **模型误差**：由于现实问题简化为数学模型所引起。
    - **截断误差**：由于有限步骤计算引起，例如泰勒级数截断。
    - **舍入误差**：计算机中有限精度表示数字引起。
2. **误差分类**
    - **绝对误差**：$E_{\text{abs}} = |x - \tilde{x}|$，真实值 x，近似值 $\tilde{x}$。
    - **相对误差**：$E_{\text{rel}} = \frac{|x-\tilde{x}|}{|x|}$，真实值非零。

1.1.2 误差的基本概念

- **有效数字**：从第一个非零数字开始的所有数字。
- 示例：$\tilde{x} = 1.234 \times 10^3$，有4位有效数字。

1.1.3 误差的分析方法

- **误差传播公式**：若 $y = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$，则

$$\Delta y \approx \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \Delta x_i \right|.$$

---

§1.2 数值运算时误差的传播

1.2.1 一元函数计算的误差传播

- 若 $y = f(x)$，

$$\Delta y \approx |f'(x)|\,\Delta x.$$

- 示例：计算 $y = x^2$ 时 $x = 2, \Delta x = 0.01$：

$$\Delta y \approx 2 \cdot 2 \cdot 0.01 = 0.04.$$

1.2.2 多元函数计算的误差传播

- 对 $y = f(x_1, x_2)$，

$$\Delta y \approx \left|\frac{\partial f}{\partial x_1}\Delta x_1\right| + \left|\frac{\partial f}{\partial x_2}\Delta x_2\right|.$$

1.2.3 四则运算中的误差传播

- **加减法**：$z = x + y$，$\Delta z = \Delta x + \Delta y$。
- **乘法**：$z = xy$，$\frac{\Delta z}{z} = \frac{\Delta x}{x} + \frac{\Delta y}{y}$。
- **除法**：$z = \frac{x}{y}$，$\frac{\Delta z}{z} = \frac{\Delta x}{x} + \frac{\Delta y}{y}$。

---

§1.3 数值计算时应注意的问题

1.3.1 避免相近数作减法

- **问题**：减法放大误差。
- 示例：$x = 1.0001, y = 1.0000$，则

$$z = x - y = 0.0001,$$

  舍入误差占主导。

1.3.2 避免分母远小于分子

- **问题**：计算 $z = \frac{x}{y}$，当 $|y| \ll |x|$ 时，舍入误差放大。
- **方法**：重构表达式。

1.3.3 防止大数“吃”小数

- **问题**：计算 $z = x + y$，若 $|x| \gg |y|$，则 y 的贡献可能被舍入。
- 示例：$x = 10^8, y = 1, z = x + y = 10^8$。

第2章 线性方程组的直接解法

§2.2 Gauss 消去法

2.2.1 Gauss 消去法的基本思想

1. **目的**：通过初等行变换，将线性方程组化为上三角矩阵。
2. 方程组：
$$Ax = b,$$
其中 A 是系数矩阵，b 是常数向量。

2.2.2 Gauss 消去法计算公式

- **步骤**：
  1. 消元：逐列消去，构造上三角矩阵。
  2. 回代：从最后一行回溯解出所有变量。
- 示例： 解以下方程组：
$$\begin{cases} 2x + y - z = 8, \\ -3x - y + 2z = -11, \\ -2x + y + 2z = -3. \end{cases}$$
步骤：
  1. 消元，化为上三角矩阵。
  2. 回代，逐一解出 x, y, z。

第2章 线性方程组的直接解法

§2.2 Gauss 消去法

2.2.1 Gauss 消去法的基本思想

通过消元逐步将系数矩阵化为上三角矩阵，再通过回代求解线性方程组。

例题：用Gauss消去法解方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 - x_3 = 1 \\ 4x_1 + 3x_2 - x_3 = 6 \\ -2x_1 + x_2 + 2x_3 = -3 \end{cases}$$

步骤：

1. 写出增广矩阵：

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 & 1 \\ 4 & 3 & -1 & 6 \\ -2 & 1 & 2 & -3 \end{bmatrix}$$

2. **第1列消元**（让第2、3行第1列为0）：

   - 第2行减去第1行的2倍：
   $$R_2 \to R_2 - 2R_1 = [0, 1, 1, 4]$$
   - 第3行加上第1行：
   $$R_3 \to R_3 + R_1 = [0, 2, 1, -2]$$

   增广矩阵变为：

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & 2 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

3. **第2列消元**（让第3行第2列为0）：

   - 第3行减去第2行的2倍：
   $$R_3 \to R_3 - 2R_2 = [0, 0, -1, -10]$$

增广矩阵变为：

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & -1 & -10 \end{bmatrix}$$

4. **回代求解**：
   - 从最后一行得：
     $$-x_3 = -10 \implies x_3 = 10$$
   - 第二行：
     $$x_2 + x_3 = 4 \implies x_2 = 4 - 10 = -6$$
   - 第一行：
     $$2x_1 + x_2 - x_3 = 1 \implies 2x_1 - 6 - 10 = 1 \implies x_1 = 8.5$$

最终解：

$$x_1 = 8.5,\ x_2 = -6,\ x_3 = 10$$

---

§2.3 Gauss-Jordan 消去法

基本思想

在 Gauss 消去法的基础上，通过行变换将矩阵化为单位矩阵，从而直接得到解。

例题：用 Gauss-Jordan 消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - x_3 = 3 \\ 2x_1 + 3x_2 + x_3 = 7 \\ 3x_1 + 5x_2 + 2x_3 = 10 \end{cases}$$

步骤：

1. **写出增广矩阵**：

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 & 3 \\ 2 & 3 & 1 & 7 \\ 3 & 5 & 2 & 10 \end{bmatrix}$$

2. **化第1列对角元为1**：
   保持第1行不变，用第2行减去2倍的第1行，第3行减去3倍的第1行：

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 & 3 \\ 0 & -1 & 3 & 1 \\ 0 & -1 & 5 & 1 \end{bmatrix}$$

3. **化第2列对角元为1**：
   使第2行第2列为1，直接将第2行乘以 -1：

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 & 3 \\ 0 & 1 & -3 & -1 \\ 0 & -1 & 5 & 1 \end{bmatrix}$$

   然后用第3行加上第2行，第1行减去2倍的第2行：

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 5 & 5 \\ 0 & 1 & -3 & -1 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

4. **化第3列对角元为1**：
   使第3行第3列为1，直接将第3行除以2：

$$\begin{bmatrix}1 & 0 & 5 & 5\\0 & 1 & -3 & -1\\0 & 0 & 1 & 0\end{bmatrix}$$

   然后用第1行减去5倍的第3行，第2行加上3倍的第3行：

$$\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 5\\0 & 1 & 0 & -1\\0 & 0 & 1 & 0\end{bmatrix}$$

5. **解为**：

$$x_1 = 5,\ x_2 = -1,\ x_3 = 0$$

§2.5 矩阵的LU分解

2.5.1 矩阵的LU分解

将矩阵 A 分解为 $A = LU$，其中 L 是单位下三角矩阵，U 是上三角矩阵。

例题：求矩阵的LU分解

$$A = \begin{bmatrix}2 & 1 & 1\\4 & 3 & 3\\8 & 7 & 9\end{bmatrix}$$

步骤：

1. 初始矩阵 A：

$$A = \begin{bmatrix}2 & 1 & 1\\4 & 3 & 3\\8 & 7 & 9\end{bmatrix}$$

2. **第1列操作**（确定 l_{21}, l_{31}）：
   - $l_{21} = a_{21}/a_{11} = 4/2 = 2$
   - $l_{31} = a_{31}/a_{11} = 8/2 = 4$
     更新矩阵：

$$A = \begin{bmatrix}2 & 1 & 1\\0 & 1 & 1\\0 & 3 & 5\end{bmatrix},\ L = \begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\2 & 1 & 0\\4 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

3. **第2列操作**（确定 l_{32}）：
   - $l_{32} = a_{32}/a_{22} = 3/1 = 3$
     更新矩阵：

$$A = \begin{bmatrix}2 & 1 & 1\\0 & 1 & 1\\0 & 0 & 2\end{bmatrix},\ L = \begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\2 & 1 & 0\\4 & 3 & 1\end{bmatrix}$$

4. **分解完成**：

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 1 \end{bmatrix}, \; U = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

---

§2.6 平方根法（Cholesky分解）

适用于对称正定矩阵，将矩阵 $A = LL^T$。

例题：求矩阵的Cholesky分解

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 12 & -16 \\ 12 & 37 & -43 \\ -16 & -43 & 98 \end{bmatrix}$$

步骤：

1. 初始矩阵 A：

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 12 & -16 \\ 12 & 37 & -43 \\ -16 & -43 & 98 \end{bmatrix}$$

2. **计算** L_{11}, L_{21}, L_{31}：
   - $L_{11} = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{4} = 2$
   - $L_{21} = a_{21}/L_{11} = 12/2 = 6$
   - $L_{31} = a_{31}/L_{11} = -16/2 = -8$
3. **计算** L_{22}, L_{32}：
   - $L_{22} = \sqrt{a_{22} - L_{21}^2} = \sqrt{37 - 6^2} = \sqrt{1} = 1$
   - $L_{32} = (a_{32} - L_{31}L_{21})/L_{22} = (-43 - (-8)(6))/1 = -5$
4. **计算** L_{33}：
   - $L_{33} = \sqrt{a_{33} - L_{31}^2 - L_{32}^2} = \sqrt{98 - (-8)^2 - (-5)^2} = 3$
5. **最终分解结果**：

$$L = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 6 & 1 & 0 \\ -8 & -5 & 3 \end{bmatrix}$$

第3章 线性方程组的迭代解法

§3.2 几种常用的迭代公式

3.2.1 Jacobi 方法

- **公式**:

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

基本思想

Jacobi 方法用于计算对称矩阵的特征值。它通过反复的旋转操作将矩阵转换为对角矩阵，矩阵的对角元素即为特征值。

例题：用 Jacobi 方法计算矩阵的特征值

给定矩阵：

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 0 \\ 2 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

步骤：

1. **初始化**： 计算矩阵 A 的初始矩阵和特征向量（可以用单位矩阵作为特征向量的初始值）：

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 0 \\ 2 & 0 & 3 \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

2. **选择最大非对角元素**： 在矩阵 A 中选择最大非对角元素。这里选择 $A_{12} = 1$ 和 $A_{21} = 1$。
3. **构造旋转矩阵**： 计算旋转角度 θ：

$$\theta = \frac{1}{2}\arctan\left(\frac{2A_{12}}{A_{11} - A_{22}}\right) = \frac{1}{2}\arctan\left(\frac{2\times 1}{4-3}\right) = \frac{1}{2}\arctan(2)$$

   计算旋转矩阵：

$$R = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

   通过旋转矩阵 R 进行矩阵变换，得到新的矩阵：

$$A' = R^T A R$$

   通过这些旋转步骤重复迭代，直到矩阵 A' 变为对角矩阵。

4. **最终结果**： 最终矩阵将收敛为对角矩阵，其对角线上的元素即为矩阵的特征值。

第4章 方阵特征值和特征向量的计算

§4.1 乘幂法

4.1.1 基本原理

- 用迭代方法逐步逼近最大特征值。
- **公式**：

$$x^{(k+1)} = \frac{Ax^{(k)}}{\|Ax^{(k)}\|}.$$

给定矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 2 & 3 \end{bmatrix}, \quad \text{初始向量} \quad x^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

步骤：

1. **初始向量归一化**： 初始向量 $x^{(0)}$：

$$x^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \|x^{(0)}\| = \sqrt{1^2 + 1^2} = \sqrt{2}, \quad x^{(0)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

2. **第1次迭代**： 计算 $y^{(1)} = Ax^{(0)}$：

$$y^{(1)} = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{5}{\sqrt{2}} \\ \frac{5}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

   计算特征值的近似值：

$$\lambda^{(1)} = \frac{y_1^{(1)}}{x_1^{(0)}} = 5$$

3. **第2次迭代**： 对 $y^{(1)}$ 进行归一化：

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

   再进行一次迭代：

$$y^{(2)} = Ax^{(1)} = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{5}{\sqrt{2}} \\ \frac{5}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

4. **继续迭代直到收敛**，可以看到矩阵的特征值逼近 5，对应特征向量为 $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$。

§4.4 QR分解与特征值求解

基本思想

通过迭代 $A = QR$ 不断更新 $A_k = RQ$ 形式，逐步逼近对角矩阵。

QR分解法通过反复进行QR分解 $A = QR$ 迭代得到矩阵的特征值。QR分解将矩阵 A 分解成一个正交矩阵 Q 和一个上三角矩阵 R。反复迭代这一过程，直到矩阵收敛为对角矩阵。

例题：用 QR 方法求矩阵的特征值

给定矩阵：

$$A = \begin{bmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix}$$

步骤：

1. **第一次QR分解**： 对矩阵 A 进行 QR 分解。假设 $A = QR$，其中 Q 是正交矩阵，R 是上三角矩阵。使用 Gram-Schmidt 方法对 A 进行分解，得到：

$$Q = \begin{bmatrix} 0.9487 & 0.3162 \\ 0.3162 & -0.9487 \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} 6.3246 & 3.1623 \\ 0 & 0.3162 \end{bmatrix}$$

2. **更新矩阵**： 计算新的矩阵 $A_1 = RQ$：

$$A_1 = \begin{bmatrix} 6.3246 & 3.1623 \\ 0 & 0.3162 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.9487 & 0.3162 \\ 0.3162 & -0.9487 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.0 & 2.0 \\ 0.0 & 0.5 \end{bmatrix}$$

3. **第二次QR分解**： 对更新后的矩阵 A_1 进行QR分解，得到新的矩阵：

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 0.985 & 0.174 \\ 0.174 & -0.985 \end{bmatrix}, \quad R_1 = \begin{bmatrix} 7.071 & 2.121 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}$$

4. **继续迭代**： 重复进行QR分解并更新矩阵 $A_k = R_k Q_k$，直到 A_k 收敛为对角矩阵。经过若干次迭代后，最终结果为：

$$A_k = \begin{bmatrix} 7.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.5 \end{bmatrix}$$

5. **特征值**： 对角元素 7 和 0.5 即为矩阵 A 的特征值。