01 数值计算的误差

**截断误差**（方法误差）：当数学模型不能得到精确解时，通常要用数值方法求它的近似解，其近似解与精确解之间的误差称为截断误差。

**舍入误差**：计算机只能处理有限数位的小数运算，原始数据或中间结果都必须进行四舍五入运算，即原始数据和计算过程可能产生新的误差。

Taylor公式：

+

设x为准确值，x\* 为x的一个近似值，称

为近似值x的绝对误差，简称误差，记为e。

我们把近似值的误差e\* 与准确值x的比值

称为近似值x\* 的相对误差，记作

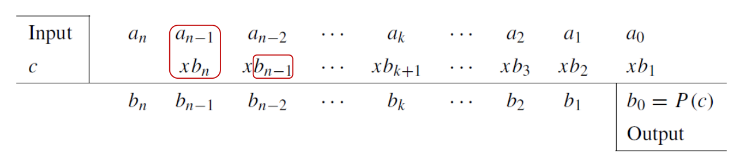
有效数字：如果近似值x\*的误差限是某一位的半个单位，该位到x\*的第一个非零数字共有n位，就说x\*有n位有效数字。

**病态问题与条件数**：计算函数值 f(x) 时，若x有扰动，其相对误差为 ，函数值 的相对误差为 ，利用 ，相对误差比值 称为计算函数值问题的**条件数**。一般 就认为是病态的。

**避免误差危害**：避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法；要避免两相近数相减；要防止“大数”吃掉小数；注意简化计算步骤，减少运算次数和舍入误差。

**霍纳算法**：

n次乘和加



**Big O(h)**：

02插值法

**拉格朗日插值**：

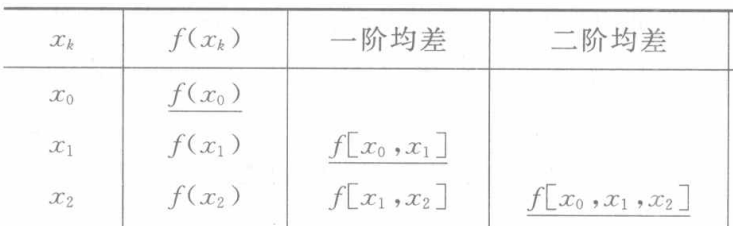
截断误差：

n次插值要**n+1**个点

**牛顿插值**：

k阶：

截断误差： ，4次多项式需要4阶均差



**埃尔米特插值**：**三点三次**：， 用**重节点的均差表**；**待定系数法**

**两点三次**：

**分段线性插值**：每个小区间 可表示为：

其中

M二阶导最大

**分段三次埃尔米特插值**：

M四阶导最大值

**三次样条插值**：

第一种边界条件：

令 则矩阵形式为：

第二种边界条件：

,

03 逼近与拟合

1范数： 2范数：

为X(X是R或C上的线性空间)上的**内积**：

**柯西-施瓦茨不等式**：

**带权内积与范数**：

Gram 矩阵，非奇异的充要条件是 线性无关

最佳一致逼近多项式：

最佳平方逼近多项式：

最小二乘拟合：

**最佳平方逼近函数**：最小化 的问题

**误差**：

例题：

已知 设所求 ，法方程：

**希尔伯特矩阵**：

求n次最佳平方逼近多项式： 此时

称 H 为希尔伯特(Hilbert)矩阵，

**曲线拟合的最小二乘法**：

总结：最佳平方逼近是**求积分**，最小二乘法是**求加权和**。

**Schemite 正交化**： 线性无关

,

则g为正交多项式

其中f为 区间[-1,1]，, Legendre

**正交多项式**的性质：

勒让德多项式：

…

切比雪夫1：

切比雪夫2：

拉盖尔：

埃尔米特：,

最佳平方逼近：

误差：

**勒让德逼近**：，按展开

系数：

平方逼近误差：

04a 数值积分

如果某个求积公式对于次数不超过 m的多项式均能准确地成立，但对于m+1次的多项式就不准确成立，则称该求积公式具有 **m次代数精度**。

左边等于右边 四个未知数四个方程

，Ln为拉格朗日插值。,

积分中值定理：

牛顿-柯特斯公式：[a,b] n等分,步长

等距节点 ,

令

梯形公式(n=1)：

辛普森公式(n=2)：

牛顿-柯特斯公式(n=4)：

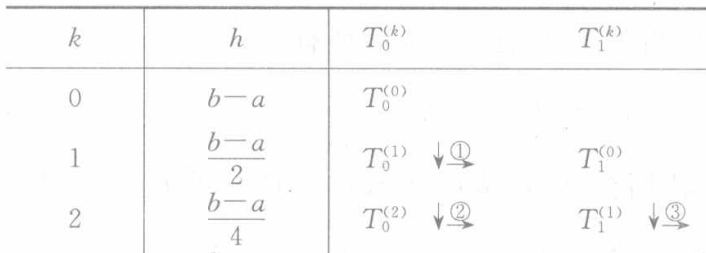
|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| n/k | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| 1 |  |  |  |  |  |  |  |
| 2 |  |  |  |  |  |  |  |
| 3 |  |  |  |  |  |  |  |
| 4 |  |  |  |  |  |  |  |
| 5 |  |  |  |  |  |  |  |
| 6 |  |  |  |  |  |  |  |

**复合梯形公式**：,

**复合辛普森公式：**,

龙贝格求积公式：对复合公式做四则运算

h=(b-a)/n



高斯求积公式：选取高斯点有2n+1次代数精度

插值节点是高斯点与任何不超过n次的多项式P(x) 带权正交：

定理：权函数为 的积分 区间 [a,b] 上权函数为的正交多项式的n个零点恰为Gauss点。一般选

计算积分系数：

Schemite正交化：

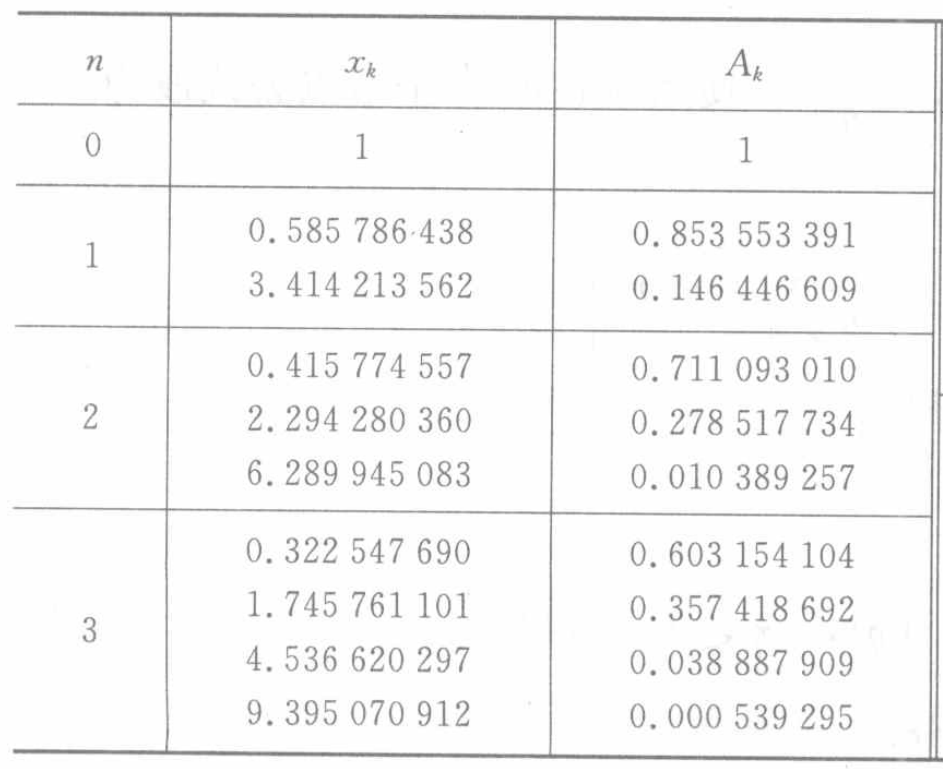
Gauss-Legendre求积公式：[-1,1]，

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| n | xk | Ak | n | xk | Ak |
| 0 |  |  | 3 |  |  |
| 1 |  |  | 4 |  |  |
| 2 |  |  | 5 |  |  |

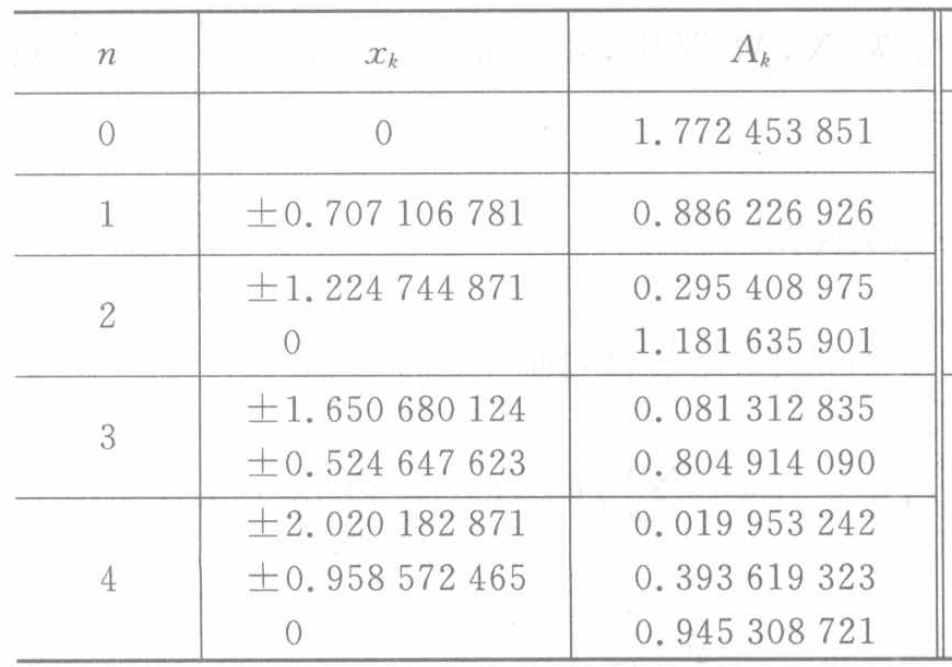
当区间为[a,b]时，做变换

可将[a,b]化为[-1,1]，此时

Gauss-Laguerre：



Gauss-Hermite：



04b数值微分

向前差商公式：

向后差商公式：

中心差商公式：

所以h不能太小

插值型的求导公式：

则

例：拉格朗日插值三点式

代入 可得

Forward:

Centered:

Backward:

05 解线性方程组的直接法

列主元消去法：选择绝对值最大的元素作为主元

直接三角分解法：L 的元素是下行减去上行的系数

Ax=b等价于

**平方根法**：设A为对称正定矩阵，Cholesky分解：

**追赶法**：矩阵须满足对角占优条件，

解 ：

解 ：

**向量范数**：正定(；齐次()；三角不等式。无穷范数：

P范数： **谱半径**

**矩阵范数**：

矩阵的F-范数

06 解线性方程组的迭代法

**雅可比迭代法**：

**高斯-赛德尔迭代法**：

或

**超松驰(Successive Over-Relaxation)迭代法**：

收敛

**迭代法的收敛性**： 初值取全1或全0

雅可比迭代法：

高斯-赛德尔迭代法： SOR 迭代法：

**严格对角占优**： 则高斯/雅可比收敛

若A为对称正定矩阵且 ，则SOR收敛

若A严格对角占优且 ，则SOR收敛

07 非线性方程（组）求根

**方程求根与二分法：**

二分法表格表头：

**迭代法**：

存在唯一的不动点：

条件(2)可变为

**局部收敛性与收敛阶**: 误差

若 , 则p阶收敛

p=1线性，p>1超线性，p=2平方收敛

p阶收敛

Aitken迭代法：

Steffenson迭代法：

**牛顿法**：

法二：令

,

简化牛顿法：

下山法：

**割线法**：

解非线性方程组：

***09常微分方程初值问题的数值解法***

一阶常微分方程初值问题

则常微分方程初值问题存在唯一的连续可微解y(x)

**前向欧拉法**：

**后向欧拉法（隐式,一阶）**：

(迭代法)

hL<1收敛

**梯形方法（隐式,二阶）**： (迭代法)

**改进欧拉法/Heun法**：

显式单步法的**局部截断误差**：

**p阶精度**：

二阶显式R-K方法:

令

中点公式：

也可写为

三阶龙格-库塔（库塔格式）：

四阶显式R-K方法：

**单步法的收敛性**：假设单步法具有p阶精度，且增量函数满足利普西茨条件 ；如果

**单步法的稳定性**：

当方法稳定时要求变量 的取值范围称为方法的绝对稳定域, 它与实轴的交集称为绝对稳定区间. 即迭代系数绝对值小于1

Euler 方法(1), (-2,0)；梯形法(2), ；Heun法(2), (-2,0)

二阶R-K(2), (-2,0)；三阶R-K(3), (-2.51, 0)；四阶R-K(4), (-2.78, 0)

1）收敛性是反映差分公式本身的**截断误差**对数值解的影响；

2）稳定性是反映计算过程中**舍入误差**对数值解的影响；

3）只有即收敛又稳定的差分公式才有实用价值；

**线性多步法**：r+1步线性多步方法,

**r+1步Adams显式公式**：

**Adams隐式公式**：

**四阶Adams预估-校正公式**：

预测：

校正：

用4阶R-K公式启动，即提供初始值，注意 已知

**一阶ODE方程组**：预测：

（Heun法）

校正：

**R-K 方法解方程组**：

高阶方程：

令 则有 令 ,

Taylor: