计算方法复习 第四版

Author: Eslzzyl ShaneYale

Email: eslzzyl@163.com shaneyale@163.com

合肥工业大学

计算机与信息学院 计算机科学与技术

2024 年 12 月 25 日

Knowledge is not free, you have to pay **attention**.

Richard Feynman

第四版序

您好！感谢您选择阅读这份文档。本文档适用于王能超编著的《数值分析简明教程：第二版》这本教材（这本书不过多评价了，写的一言难尽，把防自学做到了极致）。

这份资料最初由 20 级计算机专业的学长精心撰写，旨在为同学们复习提供一个清晰、实用的复习指南。现在他已毕业，成为了一名牛马科研人。我来自 23 级计算机专业。在原作者的基础上，我尝试着加入了额外的学习资源和一些改动，希望这些补充能够帮助大家更好地理解内容，并且激发更多的思考与讨论。

同时，建议大家在学习工科课程时，不要被繁琐无趣的定义概念等缠身，应注重动手能力，把题做做，把代码敲敲，注重解决实际的问题，再回去看那些定义，就会有更深的理解。

再者，英语是打开知识大门的一个无比宝贵的钥匙，不要听信网络上的一些"英语无用论"，一定要好好学习英语，有一个扎实的英语听写说读水平，很多优质的文档和资源都是英文的（例如在文档中我给出的一些视频讲解），如果英语水平到位，相信你会打开一所通往新世界的大门。

如果您在阅读过程中有任何宝贵的意见或建议，欢迎通过我的邮箱 shaneyale@foxmail.com 与我联系。我非常乐意听取您的反馈，并共同探讨如何进一步完善这份资料。

同时，请注意本文件仅供学习交流使用。请不要以任何形式出售本文档，或将它作为任何商业产品的附赠品。由于个人能力有限，尽管我已经尽力确保了内容的准确性，但难免存在疏忽之处。因此，在参考本文档时，如果因为其中的错误导致了不利后果（如考试成绩受影响），本人不承担任何责任。

再次感谢您的理解和支持，希望这份文档能对您的学习之路有所帮助！

ShaneYale

2024 年 12 月 4 日

合肥工业大学宣城校区

目录

I 引论 **5**
1.1 数值计算注意事项 5
1.2 二分法 5
1.3 误差 5
1.3.1 来源（P9） 5
1.3.2 绝对误差限（P10） 5
1.3.3 有效数字（P10） 5
1.3.4 相对误差限（P11） 5

II 第一章 插值方法 **5**
2.1 拉格朗日插值 5
2.1.1 线性插值（P16） 6
2.1.2 一般情形（P18） 6
2.1.3 误差的事后估计（P21） 6
2.2 埃特金插值 *（了解） 6
2.3 牛顿插值（P23） 6
2.3.1 差商（P24） 6
2.3.2 差商形式的牛顿插值公式（P26） 7
2.3.3 差分（P26） 7
2.3.4 差分形式的牛顿插值公式 7
2.4 埃尔米特插值（切触插值）(P28) 7
2.5 分段插值（P30） 7
2.5.1 分段三次插值（P32） 7
2.6 样条函数（P33） 7
2.6.1 三次样条插值 8
2.7 曲线拟合的最小二乘法（P36） 8
2.7.1 直线拟合 8
2.7.2 多项式拟合 8
2.7.3 观察数据的修匀 8

III 第二章 数值积分 **9**
3.1 机械求积 9
3.1.1 数值求积的基本思想 9
3.1.2 代数精度（P59） 9
3.1.3 插值型的求积公式（P60） 9
3.2 牛顿-柯特斯公式（P61） 9
3.2.1 复化求积（P63） 10
3.3 龙贝格算法（P66） 10
3.4 高斯公式（P71） 10
3.4.1 高斯点的基本特性（P72） 11

IV 第三章 常微分方程的差分方法 11
4.1 欧拉方法 11
4.1.1 欧拉格式（P98） 11
4.1.2 隐式欧拉格式（P99） 11
4.1.3 两步欧拉格式（P99） 11
4.2 改进的欧拉方法 11
4.2.1 梯形格式（P100） 11
4.2.2 改进的欧拉格式 11
4.3 龙格-库塔方法 11
4.3.1 设计思想 11
4.3.2 二阶龙格-库塔方法（P103） 11
4.3.3 三阶龙格-库塔方法（P104） 12
4.3.4 四阶龙格-库塔方法（P105） 12
4.4 亚当姆斯方法（P108） 12
4.4.1 亚当姆斯预报-校正系统（P109） 12
4.5 收敛性与稳定性（P112） 12
4.5.1 收敛性定义和结论 12
4.5.2 稳定性定义和结论 12

V 第四章 方程求根的迭代法 12
5.1 迭代过程的收敛性 13
5.1.1 压缩映像原理（P129） 13
5.1.2 局部收敛性 13
5.1.3 收敛速度 13
5.2 迭代过程的加速 13
5.2.1 经典加速方法（P133） 13
5.2.2 埃特金加速方法（P133） 13
5.3 牛顿法（P135） 13
5.3.1 开方公式（P137） 13
5.3.2 牛顿下山法（P138） 14
5.4 弦截法（P139） 14

VI 第五章 线性方程组的迭代法 14
6.1 雅可比迭代 (可能会考)、高斯-塞德尔迭代、超松弛法 14
6.2 向量和矩阵的范数 14
6.2.1 向量的范数（P162） 14
6.2.2 矩阵的范数（P164） 15
6.3 迭代过程的收敛性 15
6.3.1 对角占优方程组 15

VII 第六章 线性方程组的直接法 15
7.1 消去法 15
7.1.1 约当消去法（P172） 15
7.1.2 高斯消去法（P176） 15
7.1.3 选主元素（P179） 15

7.2 追赶法 16
7.2.1 追赶法的计算公式（P182） 16
7.2.2 追赶法的代数基础（P183） 16
7.3 平方根法 16
7.3.1 平方根法 16
7.3.2 改进的平方根法 16
7.3.3 一维压缩存储 17
7.4 误差分析 17
7.4.1 方程组的病态 17
7.4.2 精度分析 17

请勿以任何形式出售本文档，或将本文档作为出售资料的赠品。因笔者水平有限，错漏在所难免，因参考本文档的错漏部分而导致考试丢分的，笔者概不负责。

I 引论

1.1 数值计算注意事项

- 选择数值稳定的计算公式
- 避免两个相近的数相减
- 绝对值太小（接近零）的数不能作除数
- 避免大数吃掉小数
  - 求和时，从小数加到大数，而不是反过来。
- 简化计算步骤，减少运算次数，避免误差积累
- 控制舍入误差的累积和传播

有效的算法：运算量少，应用范围广，需用存储单元少，逻辑结构简单，便于编写计算机程序，而且计算结果可靠。

1.2 二分法

想要二分法达到误差不超过 10^{-m}，则应该二分 k 次，且有

$$2^{-k} < 10^{-m}, \quad k\text{取可能的最大值}$$

1.3 误差

1.3.1 来源（P9）

- 计算误差
  - 截断误差：求解方法本身的限制，如果是近似的数值解法，则不可能完全精确。
  - 舍入误差：计算机字长有限，数据存储时不可能无穷精确。
- 固有误差
  - 模型误差（本课程不考虑）
  - 测量误差（同上）

1.3.2 绝对误差限（P10）

绝对误差限/误差限/精度 ϵ：满足 $|x - x^*| \le \epsilon$

四舍五入得到的结果，其误差限为最末一位的半个单位。

1.3.3 有效数字（P10）

对 x^* 的规格化表示

$$x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m \tag{1.1}$$

若

$$|x - x^*| \le \frac{1}{2} \times 10^{m-l}, 1 \le l \le n \tag{1.2}$$

则称近似值 x 有 l 位有效数字。

准确值可认为有无穷位有效数字。

有效数字相同，误差限不一定相同。如 12345 和 0.12345 都有 5 位有效数字，但前者误差限为 0.5，后者为 0.000005。

1.3.4 相对误差限（P11）

若

$$\frac{|x - x^*|}{x} \le \epsilon \tag{1.3}$$

则 ϵ 是 x 的相对误差限。

II 第一章 插值方法

内插：插值点在插值区间内的插值。

外推：插值点在插值区间外的插值。不可靠。

2.1 拉格朗日插值

前言： 在学习此处时，可以联想到我们在学习线性代数时的一些概念

在线性代数中，我们有线性组合和基向量两个重要的概念。例如，在一个 n 维空间中，我们可以使用单位正交向量组的线性组合来表示此空间中的任何一个向量。

考虑一个 n 维向量 $\mathbf{v}$：

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^{n} a_i \mathbf{e}_i$$

其中，$\mathbf{e}_i$ 是第 i 个单位正交向量，a_i 是对应的系数。

而拉格朗日插值的

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) y_k$$

难道不正是基函数的线性组合吗？这样我们对拉格朗日插值有了更进一步的理解。

此处有两个可视化动画讲解十分清楚，详细请看如下（嵌入了链接，直接点击即可）：

1. 【拉格朗日插值】：思想、计算与误差
2. 【拉格朗日插值法的本质】拉格朗日，孙子，与每个人都能推出来的插值法

2.1.1 线性插值（P16）

点斜式：

$$p_1(x) = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0) \tag{2.1}$$

2.1.2 一般情形（P18）

插值基函数

$$l_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \tag{2.2}$$

拉格朗日插值公式

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) y_k = \sum_{k=0}^{n} \left(\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \right) y_k \tag{2.3}$$

$p_n(x)$ 也可表为 $L_n(x)$，注意 $L_n(x)$ 和 $l_k(x)$ 不是同一回事。

拉格朗日插值余项（即截断误差）

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n}(x - x_k) \tag{2.4}$$

其中 $\xi \in [a, b]$

2.1.3 误差的事后估计（P21）

直接用计算结果估计误差的方法称为**事后估计法**。

公式：

$$y - y_1 \approx \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}(y_2 - y_1) \tag{2.5}$$

通过公式计算出估计误差后，可以将结果加上误差得到更精确的修正值。

2.2 埃特金插值 *（了解）

先规定一个 $f_k(x_i)$，这个记号十分抽象，我们来看具体的例子理解即可。

例如，$f_1(x_i)$ 表示取 x_0，x_i 进行线性插值，即

$$f_1(x_i) = \frac{x - x_i}{x_0 - x_i} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_i - x_0} f(x_i), \quad i \geq 1$$

特别地

$$f_1(x_1) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)$$

$$f_1(x_2) = \frac{x - x_2}{x_0 - x_2} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_2 - x_0} f(x_2)$$

又如 $f_2(x_i)$ 表示取 x_0，x_1，x_i 为节点进行抛物插值的结果，特别有

$$\begin{aligned} f_2(x_2) = &\frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) \\ &+ \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) \\ &+ \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2) \end{aligned}$$

一般地，利用两个 $k-1$ 次插值 $f_{k-1}(x_{k-1})$ 与 $f_{k-1}(x_i)$ 再做线性插值，结果得到 k 次插值 $f_k(x_i)$。说白了，就是两个低阶的，合成一下，变成一个高阶的。

$$f_k(x_i) = \frac{x - x_i}{x_{k-1} - x_i} f_{k-1}(x_{k-1}) + \frac{x - x_{k-1}}{x_i - x_{k-1}} f_{k-1}(x_i), \quad i \geq k$$

如果约定 $f_0(x_i) = f(x_i)$。对 $k = 1, 2, \cdots, n$ 和 $i = k, k+1, \cdots, n$ 反复执行这一算式，可以逐列构造出下面的插值表——所谓埃特金插值表：

$$\begin{array}{lllll}
f(x_0) & & & & \\
 & f_1(x_1) & & & \\
f(x_1) & & f_2(x_2) & & \\
 & f_1(x_2) & & f_3(x_3) & \\
f(x_2) & & f_2(x_3) & & f_4(x_4) \\
 & f_1(x_3) & & f_3(x_4) & \\
f(x_3) & & f_2(x_4) & & \\
 & f_1(x_4) & & & \\
f(x_4) & & & &
\end{array}$$

2.3 牛顿插值（P23）

前言：牛顿插值较为简单，公式很优美，其差商形式较为简单，差分的定义有点抽象，需要花时间理解。

2.3.1 差商（P24）

一阶差商

$$f(x_0, x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \tag{2.6}$$

二阶差商：即一阶差商的差商

$$f(x_0, x_1, x_2) = \frac{f(x_1, x_2) - f(x_0, x_1)}{x_2 - x_0} \tag{2.7}$$

推广到 n 阶差商：

$$\begin{aligned} &f(x_0, x_1, \cdots, x_n) = \\ &\frac{f(x_1, x_2, \cdots, x_n) - f(x_0, x_1, \cdots, x_{n-1})}{x_n - x_0} \end{aligned} \tag{2.8}$$

差商的值与节点的排列顺序无关，即差商的**对称性**。

定理 2.1 在 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 所界定的范围 Δ : $\left[\underset{0\le i\le n}{min}\, x_i,\ \underset{0\le i\le n}{max}\, x_i\right]$ 内存在一点 ξ，使成立

$$f(x_0, x_1, \cdots, x_n) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$$

2.3.2 差商形式的牛顿插值公式（P26）

公式

$$\begin{aligned} p_n(x) = & f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + \\ & f(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + \\ & f(x_0, x_1, \cdots, x_n)(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1}) \end{aligned} \tag{2.9}$$

余项（截断误差）

$$R(x) = f(x_0, x_1, \cdots, x_n, x)(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n) \tag{2.10}$$

2.3.3 差分（P26）

关于函数值 $f(x_i) = y_i$ 的**一阶差分**定义为

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$$

二阶差分定义为一阶差分的差分

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i$$

n 阶差分定义为

$$\Delta^w y_i = \Delta^{n-1} y_{i+1} - \Delta^{n-1} y_i$$

节点等距的情况下，差商可用差分来表示。设步长 $h = x_{i+1} - x_i$，有

$$f(x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+k}) = \frac{1}{k! h^k} \Delta^k y_i$$

2.3.4 差分形式的牛顿插值公式

令 $x = x_0 + th$，则有

$$\begin{aligned} p_n(x_0 + th) = & y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t(t-1)}{2}\Delta^2 y_0 + \cdots + \\ & \frac{t(t-1)(t-2)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n y_0 \end{aligned}$$

这一公式称为函数插值的**有限差公式**。

2.4 埃尔米特插值（切触插值）(P28)

前言： 埃尔米特插值其实就是把泰勒插值的导数相同和拉格朗日插值的函数值相同这两个特点结合了起来。

这部分的原理对于数学水平要求较高，因此课本上只讲了怎么去做。

2.5 分段插值（P30）

前言： 当拉格朗日插值的插值次数 n 增大时，插值函数 $p_n(x)$ 会在插值区间的两端发生激烈的震荡，称为**龙格现象**。

龙格现象说明，在大范围内使用高次插值，逼近的效果往往是不理想的。有一个可视化的动画讲解龙格现象比较直观，如下

1. 【龙格现象】：多项式近似和点电荷有什么关系？

分段插值其实就是先把区间分成几段，然后挨个计算插值，这个概念还是十分容易理解的。

分段插值的优缺点：

- 优点：显式算法，方法简单，收敛性好，有局部性，不易受到其他区间的影响。
- 缺点：需要各个节点的导数值，要求高；光滑性差。

2.5.1 分段三次插值（P32）

公式：

$$\begin{aligned} S_3(x) = & \varphi_0\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right) y_i + \varphi_1\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right) y_{i+1} \\ & + h_i \psi_0\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right) y_i' + h_i \psi_1\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right) y_{i+1}' \end{aligned} \tag{2.11}$$

其中 $h_i = x_{i+1} - x_i$，而 $\varphi_0, \varphi_1, \psi_0, \psi_1$ 由式 (2.17) 给出（看右边）。

误差

$$|f(x) - S_3(x)| \le \frac{h^4}{384} \max_{a\le x\le b} |f^{(4)}(x)| \tag{2.12}$$

2.6 样条函数（P33）

前言： 又是分段插值又是样条插值，十分令人迷惑，我们来比较下两者的异同。

1. 样条插值是分段插值的一个特例或更精确的形式，样条插值更高级。
2. 分段插值一般只保证插值函数在节点处的值相等，而样条插值则进一步保证了一定阶数的导数连续，提供了更好的光滑性。
3. 样条插值由于其高阶多项式的使用，能够更好地拟合复杂形状的曲线，同时保持良好的稳定性，而分段插值则更加简单直观，计算成本较低。

称具有分划

$$\Delta : a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

的分段 k 次式 $S_k(x)$ 为 k **次样条函数**：如果它在每个内节点 $x_i (1 \le i \le n-1)$ 上具有直到 $k-1$ 阶连续导数。点 x_i 称作样条函数的**节点**。

样条函数简称样条，其特点是，既是充分光滑的，又保留有一定的间断性。

样条插值其实是一种改进的分段插值。一次样条插值和一次分段插值是同一回事。（P33 底部）

2.6.1 三次样条插值

原理比较复杂，只给出求解过程：

首先计算 α_i 和 β_i

$$\alpha_i = \frac{h_{i-1}}{h_{i-1} + h_i} \tag{2.13}$$

$$\beta_i = 3\left[(1-\alpha_i)\frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}} + \alpha_i \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i}\right] \tag{2.14}$$

其中 $h_i = x_{i+1} - x_i$（所以 α_i 的 i 是从 1 开始取的）。

然后列出如下关于 m_i 的方程组

$$\begin{cases} 2m_1 + \alpha_1 m_2 = \beta_1 - (1-\alpha_1)y_0' \\ (1-\alpha_2)m_1 + 2m_2 + \alpha_2 m_3 = \beta_2 \\ \cdots\cdots \\ (1-\alpha_{n-1})m_{n-3} + 2m_{n-2} + \alpha_{n-2} m_{n-1} = \beta_{n-2} \\ (1-\alpha_{n-1})m_{n-2} + 2m_{n-1} = \beta_{n-1} - \alpha_{n-1} y_n' \end{cases} \tag{2.15}$$

用追赶法（7.2）解方程组，得到 $m_1, m_2, \cdots, m_{n-1}$

然后判断 x 所在区间 $[x_i, x_{i+1}]$，最后用下式

$$\begin{aligned} S_3(x) =& \varphi_0\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right) y_i + \varphi_1\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right) y_{i+1} \\ &+ h_i \psi_0\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right) m_i + h_i \psi_1\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right) m_{i+1} \end{aligned} \tag{2.16}$$

插出 $y = S_3(x)$，得到结果。其中

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = (x-1)^2(2x+1) \\ \varphi_1(x) = x^2(-2x+3) \\ \psi_0(x) = x(x-1)^2 \\ \psi_1(x) = x^2(x-1) \end{cases} \tag{2.17}$$

2.7 曲线拟合的最小二乘法（P36）

前言： 最小二乘法较为重要，在我们后期对于回归等的学习中占有重要地位。直线拟合较为简单，多项式拟合稍微有点抽象，可能会有帮助理解的视频如下：

1. 【五分钟机器学习】机器学习的起点：线性回归 Linear Regression
2. [manim] 最小二乘法的线性代数证明

预测值 $\widehat{y_i}$ 和实测值 y_i 的差称为**残差**：

$$e_i = y_i - \widehat{y_i} \tag{2.18}$$

构造拟合曲线可选用如下三种准则之一：

(1). 使残差的最大绝对值最小：$\max_i |e_i| = min$

(2). 使残差的绝对值之和最小：$\sum_i |e_i| = min$

(3). 使残差的平方和最小：$\sum_i e_i^2 = min$

其中使用 (3) 的方法称为最小二乘法。

2.7.1 直线拟合

$$\begin{cases} aN + b\sum x_i = \sum y_i \\ a\sum x_i + b\sum x_i^2 = \sum x_i y_i \end{cases} \tag{2.19}$$

2.7.2 多项式拟合

拟合对象是 m 次多项式

$$y = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j \tag{2.20}$$

待定系数 $a_0, a_1, \cdots, a_m$

拟合的正则方程组如下：

$$\begin{cases} a_0 N + a_1 \sum x_i + \cdots + a_m \sum x_i^m = \sum y_i \\ a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 + \cdots + a_m \sum x_i^{m+1} = \sum x_i y_i \\ \cdots \\ a_0 \sum x_i^m + a_1 \sum x_i^{m+1} + \cdots + a_m \sum x_i^{2m} = \sum x_i^m y_i \end{cases} \tag{2.21}$$

2.7.3 观察数据的修匀

提高拟合多项式的次数并不一定能改善逼近效果。实际上，在实际计算中，常用不同的低次多项式去拟合不同的数据分段，这种方法称为**分段拟合**。

设已给一批实测数据 $(x_i, y_i)\,(i = 1, 2, \cdots, N)$，由于测量方法和实验环境的影响，不可避免地会产生随机干扰和误差。我们自然希望根据数据分布的总趋势去剔除观察数据中的偶然误差，这就是所谓**数据修匀**（或称**数据平滑**）问题。

III 第二章 数值积分

3.1 机械求积

3.1.1 数值求积的基本思想

根据积分中值定理，存在一点 $\xi \in [a,b]$，使得

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)f(\xi) \tag{3.1}$$

其中 $f(\xi)$ 称为区间 $[a,b]$ 上的平均高度，根据这个平均高度的估计方法的不同，可以得到一些公式。

梯形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \tag{3.2}$$

中矩形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \tag{3.3}$$

辛甫生公式 (注意辛甫生公式是把一个大区间分成 n 个小区间，其中 n 必须是**偶数**)

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \tag{3.4}$$

更一般地，取 $[a,b]$ 内若干个点 x_k 处的高度 $f(x_k)$，加权平均得到平均高度 $f(\xi)$，这类公式的一般形式是

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{3.5}$$

其中 x_k 称为**求积节点**，A_k 称为**求积系数**。

3.1.2 代数精度（P59）

若公式 (3.5) 对于一切次数 $\leq m$ 的多项式是准确的，但对于 $m+1$ 次多项式（指 x 的次数）不准确，就称它具有 m **次代数精度**。

梯形公式和中矩形公式有一**次**代数精度，辛甫生公式有三**次**代数精度。

求给定插值公式的代数精度：令其对 $f(x) = 1, f(x) = x, f(x) = x^2, \cdots, f(x) = x^n$ 准确成立，找到使得对 $f(x) = x^i$ 准确成立而对 $f(x) = x^{i+1}$ 不准确成立的 i 值，即为所求值。

3.1.3 插值型的求积公式（P60）

对于式 (3.5)，如果其所有 A_k 均满足

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx \tag{3.6}$$

其中 $l_k(x)$ 有如下形式

$$l_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}$$

则这样的求积公式是**插值型**的。

定理 3.1 *形如（3.5）的求积公式至少具有 n 次代数精度的充要条件是：它是插值型的。*

3.2 牛顿-柯特斯公式（P61）

设分 $[a,b]$ 为 n 等分，步长 $h = \frac{b-a}{n}$，取等分点 $x_k = a+kh$ $(k = 0,1,\cdots,n)$ 构造出的插值型求积公式

$$I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k f(x_k) \tag{3.7}$$

称作**牛顿-柯特斯公式**，其中 C_k 称为**柯特斯系数**。

一阶牛顿-柯特斯公式就是梯形公式。

二阶牛顿-柯特斯公式就是辛甫生公式。

四阶牛顿-柯特斯公式

$$\begin{aligned} C = &\frac{b-a}{90}\Big[7f(x_0)+32f(x_1) \\ &+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)\Big] \end{aligned} \tag{3.8}$$

称为**柯特斯公式**。

更高阶的牛顿-柯特斯公式不稳定，一般不用。**一般令** $n \leq 7$。

由定理3.1知，n 阶牛顿-柯特斯公式**至少**具有 n 次代数精度。实际上辛甫生公式（二阶）和柯特斯公式（四阶）分别具有 3 次和 5 次代数精度。

附：常用的柯特斯系数，方便查阅 (课本表 2-1)

- $n=1$
  - ◇ $C_0=\frac{1}{2}$
  - ◇ $C_1=\frac{1}{2}$
- $n=2$
  - ◇ $C_0=\frac{1}{6}$
  - ◇ $C_1=\frac{2}{3}$
  - ◇ $C_2=\frac{1}{6}$
- $n=3$
  - ◇ $C_0=\frac{1}{8}$
  - ◇ $C_1=\frac{3}{8}$
  - ◇ $C_2=\frac{3}{8}$
  - ◇ $C_3=\frac{1}{8}$
- $n=4$
  - ◇ $C_0=\frac{7}{90}$
  - ◇ $C_1=\frac{16}{45}$
  - ◇ $C_2=\frac{2}{15}$
  - ◇ $C_3=\frac{16}{45}$
  - ◇ $C_4=\frac{7}{90}$
- $n=5$
  - ◇ $C_0=\frac{19}{288}$
  - ◇ $C_1=\frac{25}{96}$
  - ◇ $C_2=\frac{25}{144}$
  - ◇ $C_3=\frac{25}{144}$
  - ◇ $C_4=\frac{25}{96}$
  - ◇ $C_5=\frac{19}{288}$

3.2.1 复化求积（P63）

复化求积法是指，先用低阶的求积公式求得每个子段 $[x_k, x_{k+1}]$ 上的积分值 I_k，然后将它们累加求和，用 $\sum_{k=0}^{n-1} I_k$ 作为积分 I 的近似值。

在下面的一系列式子中，都有 $h=x_{k+1}-x_k$。

复化梯形公式

$$T_n=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right] \tag{3.9}$$

误差

$$I-T_n\approx-\frac{h^2}{12}\left[f'(b)-f'(a)\right] \tag{3.10}$$

复化辛甫生公式

$$S_n=\frac{h}{6}\left[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right] \tag{3.11}$$

误差

$$I-S_n\approx-\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4\left[f'''(b)-f'''(a)\right] \tag{3.12}$$

复化柯特斯公式

$$\begin{aligned}C_n=&\frac{h}{90}\Bigg[7f(a)+32\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{4}})\\&+12\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})+32\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{3}{4}})\\&+14\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+7f(b)\Bigg]\end{aligned} \tag{3.13}$$

误差

$$I-C_n\approx-\frac{2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6\left[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right] \tag{3.14}$$

3.3 龙贝格算法（P66）

根据事后误差估计法修正上节的公式（过程见 P68），可以得到如下迭代加速公式：

$$S_n=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n \tag{3.15}$$

$$C_n=\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n \tag{3.16}$$

$$R_n=\frac{64}{63}C_{2n}-\frac{1}{63}C_n \tag{3.17}$$

于是，根据 $T_1, T_2, T_4, T_8, T_{16}, \cdots$，可以得到 $S_1, S_2, S_4, S_8, \cdots$，可以得到 $C_1, C_2, C_4, \cdots$，可以得到 $R_1, R_2, \cdots$。这种加速方法称为**龙贝格算法**。注意它已经不属于牛顿-柯特斯公式。

3.4 高斯公式（P71）

牛顿-柯特斯公式的求积节点是等分的，如果能够适当地选取这些节点，可以使求积公式具有 $2n-1$ 次代数精度。这种公式称为**高斯公式**，相应的求积节点 x_k 称为**高斯点**。通式如下：

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx\sum_{k=1}^{n}A_kf(x_k) \tag{3.18}$$

高斯公式也是插值型求积公式。（课本 P71 指出“本章所考察的求积公式都是插值型的”）

一点高斯公式就是中矩形公式（$2\times1-1=1$ 次代数精度）：

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx2f(0) \tag{3.19}$$

其高斯点 $x_1=0$。

两点高斯公式（$2\times2-1=3$ 次代数精度）：

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)+f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \tag{3.20}$$

其高斯点 $x_1=-\frac{1}{\sqrt{3}}, x_2=\frac{1}{\sqrt{3}}$。

对上式 (3.20) 做变换，可以得到 $[a,b]$ 上的高斯公式：

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx&\frac{b-a}{2}\left[f\left(-\frac{b-a}{2\sqrt{3}}+\frac{a+b}{2}\right)\right.\\&\left.+f\left(\frac{b-a}{2\sqrt{3}}+\frac{a+b}{2}\right)\right]\end{aligned} \tag{3.21}$$

三点高斯公式（$2\times3-1=5$ 次代数精度）：

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx\frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)+\frac{8}{9}f(0)+\frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right) \tag{3.22}$$

3.4.1 高斯点的基本特性（P72）

定理 3.2 节点 x_k $(k=1,2,\cdots,n)$ 是高斯点的充要条件是，多项式

$$\omega(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)$$

满足

$$\int_{-1}^{1} x^k\omega(x)dx=0,\quad k=0,1,\cdots,n-1$$

IV 第三章 常微分方程的差分方法

4.1 欧拉方法

4.1.1 欧拉格式（P98）

微分方程的数值解法首先就是要消除导数项，这一步称为**离散化**。

微分方程可以写成

$$y'=f(x,y) \tag{4.1}$$

的形式。用差商代替导数，整理可得**欧拉 (Euler) 格式**：

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n),\quad n=0,1,2,\cdots \tag{4.2}$$

在 y_n 为准确（即 $y_n=y(x_n)$）的前提下估计误差 $y(x_{n+1})-y_{n+1}$。这种误差称为**局部截断误差**。

称一种数值方法的精度是 p 阶的，如果其局部截断误差为 $O(h^{p+1})$。

欧拉格式为一阶方法。

4.1.2 隐式欧拉格式（P99）

若将微分方程 $y'(x_{n+1})=f(x_{n+1},y(x_{n+1}))$ 中的导数项用向后差商替代，则可得到

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_{n+1},y_{n+1}) \tag{4.3}$$

称为隐式欧拉格式。也是一阶方法。

4.1.3 两步欧拉格式（P99）

用中心差商替代导数项，可以得到两步欧拉格式

$$y_{n+1}=y_{n-1}+2hf(x_n,y_n) \tag{4.4}$$

这是一种二阶方法。

4.2 改进的欧拉方法

思路是通过两端积分，将微分方程的导数项转换为积分项，然后采用数值求积方法解决。

4.2.1 梯形格式（P100）

公式如下：

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}\left[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})\right] \tag{4.5}$$

梯形格式是显式欧拉格式 (4.2) 和隐式欧拉格式 (4.3) 的算术平均。这是一种隐式格式。

梯形格式具有二阶精度（存疑）。

4.2.2 改进的欧拉格式

先用欧拉方法求一个 y_{n+1} 的近似值，然后代替式4.5右端的 y_{n+1}，得到校正值，合起来写是

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}\left[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_n+hf(x_n,y_n))\right] \tag{4.6}$$

称为改进的欧拉格式。这是一种一步显式格式。

4.3 龙格-库塔方法

4.3.1 设计思想

如果设法在 $[x_n,x_{n+1}]$ 内多预报几个点的斜率值，然后将它们加权平均作为区间上的平均斜率 K^*，则可能得到更高精度的方法。

4.3.2 二阶龙格-库塔方法（P103）

二阶龙格-库塔方法有两种常见形式（解释见课本）。第一种形式就是改进的欧拉格式。第二种格式又称**中点格式**：

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+hK_2 \\ K_1=f(x_n,y_n) \\ K_2=f\left(x_{n+\frac{1}{2}},y_n+\frac{h}{2}K_1\right) \end{cases} \tag{4.7}$$

4.3.3 三阶龙格-库塔方法（P104）

其中的一种：

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_n + \frac{h}{2}K_1\right) \\ K_3 = f\left(x_{n+1}, y_n + h(-K_1 + 2K_2)\right) \end{cases} \tag{4.8}$$

4.3.4 四阶龙格-库塔方法（P105）

其中的一种：

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n = \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_n + \frac{h}{2}K_1\right) \\ K_3 = f\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_n + \frac{h}{2}K_2\right) \\ K_4 = f\left(x_{n+1}, y_n + hK_3\right) \end{cases} \tag{4.9}$$

龙格-库塔方法要求解具有良好的光滑性。如果光滑性差，那么龙格-库塔方法可能不如改进的欧拉方法。

4.4 亚当姆斯方法（P108）

记 $y'_{n-k} = f(x_{n-k}, y_{n-k})$ (差商)，则有如下显式格式：
二阶显式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3y'_n - y'_{n-1}) \tag{4.10}$$

三阶显式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(23y'_n - 16y'_{n-1} + 5y'_{n-2}) \tag{4.11}$$

四阶显式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55y'_n - 59y'_{n-1} + 37y'_{n-2} - 9y'_{n-3}) \tag{4.12}$$

此外还有如下隐式格式：
二阶隐式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(y'_{n+1} + y'_n) \tag{4.13}$$

三阶隐式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5y'_{n+1} + 8y'_n - y'_{n-1}) \tag{4.14}$$

四阶隐式亚当姆斯格式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9y'_{n+1} + 19y'_n - 5y'_{n-1} + y'_{n-2}) \tag{4.15}$$

4.4.1 亚当姆斯预报-校正系统（P109）

类似改进的欧拉方法，通过显式、隐式亚当姆斯格式可以得到**亚当姆斯预报-校正系统**，下面是四阶的情况：
预报

$$\begin{aligned} \overline{y}_{n+1} &= y_n + \frac{h}{24}(55y'_n - 59y'_{n-1} + 37y'_{n-2} - 9y'_{n-3}) \\ \overline{y}'_{n+1} &= f(x_{n+1}, y_{n+1}) \end{aligned}$$

校正

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{24}(9\overline{y}'_{n+1} + 19y'_n - 5y'_{n-1} + y'_{n-2}) \\ y'_{n+1} &= f(x_{n+1}, y_{n+1}) \end{aligned}$$

使用时，y_{n+1} 是输出的结果，y'_{n+1} 用于为后续插值点提供数据。

此预报-校正系统的事后误差估计与补偿公式请见课本 P111。

4.5 收敛性与稳定性（P112）

可能会出考题。

前言：差分方法的基本思想是通过离散化手续，将微分方程转化为差分方程 (代数方程) 来求解。

4.5.1 收敛性定义和结论

收敛性定义：对于任意固定的 $x_n = x_0 + nh$，如果数值解 y_n 当 $h \to 0$（同时 $n \to \infty$）时趋向于准确解 $y(x_n)$，则称该方法是**收敛**的。

结论：欧拉方法是收敛的。

4.5.2 稳定性定义和结论

稳定性定义：如果一种差分方法在节点值 y_n 上大小为 δ 的扰动，于以后各节点值 y_m $(m > n)$ 上产生的偏差均不超过 δ，则称该方法是稳定的。

结论：

稳定性问题比较复杂，为简化讨论，我们仅考虑零初值情形。

显式欧拉方法是条件稳定的。

隐式欧拉格式是恒稳定（无条件稳定）的。

V 第四章 方程求根的迭代法

5.1 迭代过程的收敛性

对一般方程 $f(x)=0$，为了使用迭代法，需要将其改写成 $x=\varphi(x)$ 的格式，其中 $\varphi(x)$ 成为迭代函数。

迭代公式：$x_{k+1}=\varphi(x_k),\quad k=0,1,2,\cdots$

如果 x_k 有极限，则称**迭代收敛**。

几何意义：求根问题在几何上就是确定曲线 $y=\varphi(x)$ 与直线 $y=x$ 的交点。

5.1.1 压缩映像原理（P129）

定理 5.1 设 $\varphi(x)$ 在 $[a,b]$ 上具有连续的一阶导数，且满足下列两项条件：
(1). 对于任意 $x\in[a,b]$，总有 $\varphi\in[a,b]$；
(2). 存在 $0\le L\le 1$，使对于任意 $x\in[a,b]$ 成立

$$|\varphi'(x)|\le L \tag{5.1}$$

则迭代过程 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 对任意初值 $x_0\in[a,b]$ 均收敛于方程 $x=\varphi(x)$ 的根 x^*，且有下列误差估计式

$$|x^*-x_k|\le\frac{1}{1-L}|x_{k+1}-x_k| \tag{5.2}$$

$$|x^*-x_k|\le\frac{L^k}{1-L}|x_1-x_0| \tag{5.3}$$

5.1.2 局部收敛性

称一种迭代过程在根 x^* **邻近收敛**，如果存在邻域 $\varDelta$：$|x-x^*|\le\delta$，使迭代过程对于任意初值 $x_0\in\varDelta$ 均收敛。这种在根的邻近所具有的收敛性称为**局部收敛性**。

定理 5.2 设 $\varphi(x)$ 在 $x\varphi(x)$ 的根 x^* 邻近有连续一阶导数，且成立

$$|\varphi'(x^*)|\le 1$$

则迭代过程 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 在 x^* 邻近具有局部收敛性。

5.1.3 收敛速度

如果迭代误差 $e_k=x^*-x_k$ 当 $k\to\infty$ 时成立

$$\frac{e_{k+1}}{e_k^p}\to c\quad(c\ne 0\ \text{常数})$$

则称迭代过程是 p **阶收敛的**。$p=1$ 时称**线性收敛**，$p=2$ 时称平方收敛。

定理 5.3 设 $\varphi(x)$ 在 $x=\varphi(x)$ 的根 x^* 邻近有连续二阶导数，且

$$|\varphi'(x^*)|\le 1$$

则 $\varphi'(x^*)\ne 0$ 时迭代过程为线性收敛；而当 $\varphi'(x^*)=0$，$\varphi''(x^*)\ne 0$ 时为平方收敛。

5.2 迭代过程的加速

5.2.1 经典加速方法（P133）

加速迭代公式（P133）

$$x_{k+1}=\frac{1}{1-L}\left[\varphi(x_k)-Lx_k\right] \tag{5.4}$$

其中 $L=\varphi'(x_0)$。

5.2.2 埃特金加速方法（P133）

经典方法的 L 需要求导得到，此法的好处是不需要求导。

迭代 $\overline{x}_{k+1}=\varphi(x_k)$

迭代 $\widetilde{x}_{k+1}=\varphi\left(\overline{x}_{k+1}\right)$

改进 $x_{k=1}=\widetilde{x}_{k+1}-\frac{(\widetilde{x}_{k+1}-\overline{x}_{k+1})^2}{\widetilde{x}_{k+1}-2\overline{x}_{k+1}+x_k}$

5.3 牛顿法（P135）

牛顿公式：

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{5.5}$$

几何解释：P136

定理 5.4 牛顿法在 $f(x)=0$ 的单根 x^* 附近二阶 *(平方)* 收敛。

5.3.1 开方公式（P137）

使用牛顿法解二次方程 $x^2-c=0$ 即得开方公式：

$$x_{k+1}=\frac{1}{2}\left(x_k+\frac{c}{x_k}\right) \tag{5.6}$$

定理 5.5 开方公式对于任意初值 $x_0>0$ 均平方收敛。

计算开方优先选择牛顿迭代法。

5.3.2 牛顿下山法（P138）

若初值 x_0 偏离 x^* 较远，则牛顿法可能发散。为了防止发散，需要额外保证函数值单调下降：

$$|f(x_{k=1})| < |f(x_k)| \tag{5.7}$$

因此采用下列迭代公式

$$x_{k+1} = x_k - \lambda \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{5.8}$$

其中 $0 < \lambda \leq 1$ 称为**下山因子**。

操作方法：从 $\lambda = 1$ 开始反复将 λ 的值减半试算，一旦上面的单调性条件成立，则认为“下山成功”。反之若找不到合适的下山因子，则认为“下山失败”，此时需重选 x_0 再下山。

5.4 弦截法（P139）

弦截法的思想是，用差商 $\frac{f(x_k)-f(x_0)}{x_k-x_0}$ 代替牛顿法中的导数项。

公式：

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k)-f(x_0)}(x_k - x_0) \tag{5.9}$$

弦截法为线性收敛。

如果使用差商 $\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}$ 替代牛顿公式中的导数项，则得到**快速弦截法**：

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k)-f(x_{k-1})}(x_k - x_{k-1}) \tag{5.10}$$

这是一种两步方法，使用时需要先提供两个开始值 x_0, x_1。

VI 第五章 线性方程组的迭代法

6.1 雅可比迭代 (可能会考)、高斯-塞德尔迭代、超松弛法

这部分参考课本 P156-161，结合例子容易理解。

松弛法：

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)x_i^{(k)} + \omega \times \text{G-S 迭代值} \tag{6.1}$$

其中 $1 < \omega < 2$ 的松弛法称为**超松弛法（SOR 方法）**。

6.2 向量和矩阵的范数

6.2.1 向量的范数（P162）

任给向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$，其**范数**记 $\|x\|$，它是一个实数，且满足下列三项条件：

(1) 对于任意向量 $\mathbf{x}$，$\|\mathbf{x}\| \geq 0$，当且仅当 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 时 $\|\mathbf{x}\| = 0$。

(2) 对于任意实数 λ 及任意向量 $\mathbf{x}$

$$\|\lambda\mathbf{x}\| = |\lambda| \cdot \|\mathbf{x}\|$$

(3) 对于任意向量 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$，有

$$\|\mathbf{x}+\mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$$

其中，性质(3)称作向量范数的**三角不等式**。

p - 范数通式：

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \tag{6.2}$$

常用范数：

(1) 2 - 范数（长度）

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

(2) 1 - 范数

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

(3) ∞ - 范数

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1\leq i\leq n} |x_i|$$

定理 6.1 对于任意向量 $\mathbf{x}$，有

$$\lim_{p\to\infty} \|\mathbf{x}\|_p = \|\mathbf{x}\|_\infty \tag{6.3}$$

如果存在正数 c_1, c_2，使对于任意向量 $\mathbf{x}$ 均有

$$\|\mathbf{x}\|_p \leq c_1\|\mathbf{x}\|_p, \quad \|\mathbf{x}\|_q \leq c_2\|\mathbf{x}\|_p$$

则称范数 $\|\cdot\|_p$ 与 $\|\cdot\|_q$ 等价。范数的等价关系有**传递性**。

定理 6.2 任何范数 $\|\mathbf{x}\|_p$ $(p < \infty)$ 均与 $\|\mathbf{x}\|_\infty$ 等价，因而任何两种 p - 范数彼此都是等价的。

定理 6.3 在空间 $\mathbb{R}^n$ 中，向量序列 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ 收敛于向量 $\mathbf{x}$ 的充要条件是对 $\mathbf{x}$ 的任意范数 $\|\cdot\|$，有：

$$\lim_{k\to\infty} \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_p = 0$$

6.2.2 矩阵的范数（P164）

设 $\mathbf{A}$ 是 n 阶方阵，$\|\mathbf{x}\|$ 为某范数，称

$$\|\mathbf{A}\| = \max_{x\neq 0}\frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|}$$

为矩阵 $\mathbf{A}$ 的从属于该向量范数的范数，或称矩阵 $\mathbf{A}$ 的范数，记为 $\|\mathbf{A}\|$。

矩阵范数的性质：

(1)（正定性）对任意方阵 $\mathbf{A}$，$\|\mathbf{A}\| \geq 0$，当且仅当 $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ 时 $\|\mathbf{A}\| = 0$。

(2)（齐次性）对任意实数 λ 和任意方阵 $\mathbf{A}$，有

$$\|\lambda\mathbf{A}\| = |\lambda|\|\mathbf{A}\|$$

(3) 对任意两个同阶方阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$，有

$$\|\mathbf{A}+\mathbf{B}\| \leq \|\mathbf{A}\| + \|\mathbf{B}\| \quad \text{（三角不等式）}$$
$$\|\mathbf{AB}\| \leq \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{B}\| \quad \text{（相容性）}$$

有什么样的向量范数，就有什么样的矩阵范数。因此有矩阵 $\mathbf{A}$ 的 p - 范数：（略）

矩阵 $\mathbf{A}$ 的**行范数**：

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1\leq i\leq n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}| \tag{6.4}$$

矩阵 $\mathbf{A}$ 的**列范数**：

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1\leq j\leq n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}| \tag{6.5}$$

矩阵 $\mathbf{A}$ 的 **F-范数**：

$$\|\mathbf{A}\|_F = \left(\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}a_{ij}^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{6.6}$$

矩阵 $\mathbf{A}$ 的 **2-范数（谱范数）**：

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \left[\lambda_{\max}(A^TA)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{6.7}$$

其中，$\lambda_{\max}$ 是矩阵 $\mathbf{A}$ 的最大特征值。矩阵 $\mathbf{A}$ 为对称矩阵时，它的 2-范数和谱半径相等。

易错：不要忽略了绝对值符号！

6.3 迭代过程的收敛性

雅可比迭代和高斯-塞德尔迭代公式都可以写成如下形式

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{GX}^{(k)} + \mathbf{b} \tag{6.8}$$

其中 $\mathbf{G}$ 称为公式 ()6.8) 的**迭代矩阵**。

定理 6.4 *若迭代矩阵* $\mathbf{G}$ *满足*

$$\|\mathbf{G}\| < 1 \tag{6.9}$$

则迭代公式 (6.8) 对于任意初值 $\mathbf{x}^{(0)}$ *均收敛。*

6.3.1 对角占优方程组

如果 n 阶方阵 $\mathbf{A} = (a_{ij})_{n\times n}$ 的主对角线元素的绝对值大于同行其他元素的绝对值之和，则称其为**对角占优矩阵**。系数矩阵为对角占优矩阵的线性方程组称为**对角占优方程组**。

定理 6.5 *若 A 为对角占优矩阵，则它是非奇异的，且它对应的线性方程组的雅可比迭代公式和高斯-塞德尔迭代公式都收敛。*

VII　第六章 线性方程组的直接法

7.1 消去法

7.1.1 约当消去法（P172）

约当消去法：每一步在一个方程中保留某个变元，而从其他方程中消去这个变元，反复消元后，方程组的每个方程都只剩下一个变元。约当消去法的总计算量约为 $\frac{n^3}{3}$，n 为方程个数。

7.1.2 高斯消去法（P176）

这是约当消去法的改进版本。计算量约为约当消去的 50% 左右。

7.1.3 选主元素（P179）

考察高斯消去法的消元过程，可以看到，其第 k 步要用 $a_{kk}^{(k-1)}$ 做除法，这就要求保证它们全不为 0.

$$\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j = b_i, \quad i = 1,2,\cdots,n \tag{4}$$

定理 7.1 *假设方程组 (4) 是对角占优的，则* $a_{kk}^{(k-1)}(k = 1,2,\cdots,n)$ *全不为 0.*

定理 7.2 *设所给方程组 (4) 对称并且是对角占优的，则* $a_{kk}^{(k-1)}(k = 1,2,\cdots,n)$ *全是主元素.*

7.2 追赶法

有如下三对角阵：

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \cdots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & a_n & b_n \end{bmatrix} \tag{7.1}$$

定理 7.3 假设上面的三对角阵 *(7.1)* 为对角占优，则它是非奇异的，且以 *(7.1)* 为系数矩阵的方程组有唯一解。

7.2.1 追赶法的计算公式（P182）

追的过程（消元过程）：按照如下顺序计算系数 $u_1 \to u_2 \to \cdots \to u_{n-1}$ 和 $y_1 \to y_2 \to \cdots \to y_n$。

$$\begin{aligned} u_1 &= \frac{c_1}{b_1}, \quad y_1=\frac{f_1}{b_1} \\ u_i &= \frac{c_i}{b_i-u_{i-1}a_i}, \quad i=2,3,\cdots,n-1 \\ y_i &= \frac{f_i-y_{i-1}a_i}{b_i-u_{i-1}a_i}, \quad i=2,3,\cdots,n \end{aligned} \tag{7.2}$$

a_i,b_i,c_i 都是矩阵 (7.1) 中的值，f_i 是对应方程组等号右边的数排成的向量。

赶的过程（回代过程）：按照下面的式子逆序求出解 $x_n \to x_{n-1} \to \cdots \to x_1$。

$$\begin{aligned} x_n &= y_n \\ x_i &= y_i - u_i x_{i+1}, \quad i=n-1,n-2,\cdots,1 \end{aligned} \tag{7.3}$$

追赶法的计算量仅为 $5n$ 次乘除法。

7.2.2 追赶法的代数基础（P183）

有如下**单位上二对角阵**

$$\mathbf{U}=\begin{bmatrix} 1 & u_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & 1 & u_2 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \cdots & 1 & u_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{7.4}$$

和如下**下二对角阵**

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix} d_1 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ a_2 & d_2 & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & a_{n-1} & d_{n-1} & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & a_n & d_n \end{bmatrix} \tag{7.5}$$

（类似地，可以得到**单位下二对角阵**和**上二对角阵**的形式）

定理 7.4 如果矩阵 *(7.1)* 为对角占优，则它可以：

- 分解为 $\mathbf{A}=\mathbf{LU}$ 的形式，其中 $\mathbf{L}$ 为单位下二对角阵，$\mathbf{U}$ 为上二对角阵。此分解称为**杜里特尔 *(Doolittle)* 分解**。
- 分解为 $\mathbf{A}=\mathbf{LU}$ 的形式，其中 $\mathbf{L}$ 为下二对角阵，$\mathbf{U}$ 为单位上二对角阵。此分解称为**克劳特 *(Crout)* 分解**。

且上述两种分解都是唯一的。

7.3 平方根法

7.3.1 平方根法

定理 7.5 设 $A=\begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ a_{21} & a_{22} & & \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$ 为正定阵，则有如下三角阵 $L=\begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \mathbf{0} & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$ 使成立 $A=L\cdot L^T$

若限定 L 的主对角线元素取正值，则这种分解是唯一的.

对于一个 $n\times n$ 的正定对称矩阵 A，平方根法可以找到一个下三角矩阵 L，其主对角线元素为正，使得：$A=L\cdot L^T$ 这里 L^T 表示 L 的转置矩阵。这个过程类似于将一个数分解成它的平方根，因此称为“平方根法”。

7.3.2 改进的平方根法

定理 7.6 对称正定阵 $\mathbf{A}$ 可分解成

$$\mathbf{A}=\mathbf{LDL}^T$$

的形式，其中

$$D=\begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & \mathbf{0} & \\ & & \ddots & \\ & \mathbf{0} & & d_n \end{bmatrix}$$

$$L=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

分别为对角阵和单位下三角阵。这里分解公式为

$$l_{ij}=(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}d_kl_{ik}l_{jk})/d_j, \qquad j=1,2,\cdots,i-1$$

$$d_i=a_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1}d_kl_{ik}^2, \qquad i=1,2,\cdots,n$$

据此可逐行计算 $d_1\to l_{21}\to d_2\to l_{31}\to l_{32}\to d_3\to\cdots$.

运用这种矩阵分解方法，方程组 $\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$ 即

$$\mathbf{L}(D\mathbf{L}^T\mathbf{x})=\mathbf{b}$$

可归结为求解两个上三角方程组

$$\mathbf{L}\mathbf{y}=\mathbf{b}$$
$$\mathbf{L}^T\mathbf{x}=D^{-1}\mathbf{y}$$

其计算公式分别为

$$y_i=b_i-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ki}y_k, \qquad i=1,2,\cdots,n$$

$$x_i=y_i/d_i-\sum_{k=i+1}^{n}l_{ki}x_k, \qquad i=n,n-1,\cdots,1$$

求解方程组的上述算法称作改进的平方根法，亦称乔累斯基 (Cholesky) 方法。这种方法总的计算量约为 $n^3/6$ 次乘除法，仅为高斯消去法计算量的一半。

7.3.3 一维压缩存储

对称矩阵的特点是它的元素关于主对角线对称，如果知道了一半的元素，另一半就是相同的。因此，我们可以只存储一半的数据。例如，对于一个 $n\times n$ 的对称矩阵，我们只需要 $\frac{n(n+1)}{2}$ 个空间来保存所有信息，而不是 n^2 个空间。这种存储方式可以显著减少所需的内存。

7.4 误差分析

7.4.1 方程组的病态

系数只有微小差别，解却大不相同的方程组称作是**病态的**。

记

$$\mathrm{cond}(\mathbf{A})\equiv\|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{A}\|$$

为矩阵 $\mathbf{A}$ 的**条件数**。则系数矩阵 $\mathbf{A}$ 和右端项 $\mathbf{b}$ 导致的误差估计式可以分别表示为

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}\le\mathrm{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

与

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}\le\frac{\mathrm{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}{1-\mathrm{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}$$

条件数 $\mathrm{cond}(A)$ 刻画了方程组“病态”的程度。

不能用行列式值 $\det(A)$ 是否很小来衡量方程组 $\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$ 的病态程度。

7.4.2 精度分析

将近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ 代回到原方程组中得到**余量** $\mathbf{r}$：

$$\mathbf{r}=\mathbf{b}-\mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}$$

如果 $\mathbf{r}$ 很小，就认为 $\tilde{\mathbf{x}}$ 是相当准确的。