

第1章 误差

误差来源：

模型误差（数学模型与实际问题之间的误差）

观测误差/参量误差（观测产生的误差）

截断误差/方法误差（数值计算近似解和准确解之间的误差）

舍入误差（计算机字长有限产生的误差）

绝对误差： $e^*(x) = x - x^*$ （近似值减去准确值）

误差限（绝对误差限）： $|e^*(x)| = |x - x^*| \leq \varepsilon^*$

工程上常表示为： $x = x^* \pm \varepsilon^*$

相对误差： $e_r(x) = \frac{e^*(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x} \approx \frac{x - x^*}{x^*}$ ，**相对误差限**（常用百分数表示）

数值计算中需要注意的几个原则：

- （1）选用数值稳定性好的算法
- （2）相近两数避免相减
- （3）绝对值太小的数不宜作除数
- （4）避免大数吃小数的情况发生
- （5）简化计算步骤，减少运算次数

第二章 非线性方程求根

二分法（操作略）

对于任意给定的误差 ε ，只要二分次数满足不等式 $\frac{b-a}{2^{k+1}} \leq \varepsilon$ 则可得到满足要求近似根

局限性：不能求复数根和偶数重根

迭代法：将方程化为 $x = g(x)$ ，从而根据 $x_{k+1} = g(x_k)$ 求解。

迭代法收敛的充分条件：

- （1）在区间 $[a, b]$ 上 $g'(x)$ 存在，且 $|g'(x)| \leq L \leq 1$
- （2）对任意 $x \in [a, b]$ ，都有 $g(x) \in [a, b]$

牛顿法：方程 $f(x) = 0$ 近似线性化为 $f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) = 0$ 从而得到迭代公式

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

牛顿迭代法收敛的充分条件

条件1：对于方程 $f(x) = 0$ ，若存在区间 (a, b) 使

- （1）在区间 (a, b) 内存在方程的单根 x^* ；
- （2） $f''(x)$ 在区间 (a, b) 内连续

则牛顿迭代法在 x^* 附近具有局部收敛性。

条件2：对于方程 $f(x) = 0$ ，若存在区间 $[a, b]$ 使

- （1） $f''(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续
- （2） $f(a)f(b) < 0$ ；
- （3）对任意 $x \in [a, b]$ 都有 $f'(x) \neq 0$ ；
- （4） $f''(x)$ 在 $[a, b]$ 上保号

则当初值 $x_0 \in [a, b]$ 且 $f(x_0)f''(x_0) > 0$ 时，牛顿迭代序列收敛于区间上唯一实根 x^* 。

第三章 线性方程组解法

1、高斯消元法（略）（也称顺序消元法）

2、列主元消元法（让每一次消元的列主元绝对值尽可能的大）

3、LU分解法，分解 $A = LU$ 后，分别解方程 $LY = b$ 与 $UX = Y$

4、雅可比迭代法

向量范数：1范数： $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ 2范数： $\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{1/2}$ ∞ 范数： $\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$

矩阵的范数：

1范数（列模）（每列各个元素绝对值相加之和，取最大）

2范数（谱模） $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$

∞ 范数（行模）（每行各个元素绝对值相加之和，取最大）

矩阵条件数（用来刻画方程组病态程度） $Cond(A) = \|A^{-1}\| \|A\|$ 如果条件数特别大，则矩阵是病态的，很难求出其准确的解。

第4章 插值与拟合

拉格朗日插值多项式： $L_n(x) = \sum_{k=0}^n y_k \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)}$

两点差值——线性插值；三点插值——抛物插值

高次的插值会导致Runge现象，在区间端点出现明显的震荡。

三次样条插值： 每一段上都是不高于三次的多项式，保证段和段之间二阶导数连续。
一种比较简便的办法： 利用 $s(x)$ 在节点处的二阶导数值 $M_i = S''(x_i)$ 表示 $S_i(x)$ ， 用 $S'(x)$ 在内节点 x_i 上的连续性和边界条件来确定 M_i

记 $M_i = S''(x_i)$ ， $h_i = x_i - x_{i-1}$ 利用插值条件， 整理得到

$$S_i(x) = M_{i-1} \frac{(x_i - x)^3}{6h_i} + M_i \frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} + \left(y_{i-1} - \frac{M_{i-1}}{6}h_i^2\right) \frac{x_i - x}{h_i} + \left(y_i - \frac{M_i}{6}h_i^2\right) \frac{x - x_{i-1}}{h_i}$$

这样就将求n个函数 $S_i(x)$ 的问题转化为求n+1个未知数的问题

利用一阶导数连续的条件： 记

$$\mu_i = \frac{h_i}{h_i + h_{i+1}} \quad \lambda_i = \frac{h_i + 1}{h_i + h_{i+1}} = 1 - \mu_i \quad g_i = \frac{6}{h_i + h_{i+1}} \left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \right) \quad \text{从而得到}$$

$$\mu_i M_{i-1} + 2M_i + \lambda_i M_{i+1} = g_i \quad (i = 1, 2, \dots, n-1)$$

区间有n个， 未知数有n+1个， 方程有n-1个， 还需要两个边界条件， 可以解出方程。解出Mi之后代入上面的方程即可求出S(x)。

最小二乘法：

$\varphi(x) = F(a_0, a_1, \dots, a_n, x)$ ， 选择参数使得 $S = \sum_{i=1}^m [F(a_0, a_1, \dots, a_n, x_i) - y_i]^2$ 取到最小值， 也就是说

点 $(a_0^*, a_1^*, \dots, a_n^*)$ 是该方程组的极值点， 因此解法方程组 $\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0$ 即可解出所求的参数。一般情况

下法方程组不是线性的， 当且仅当 $\varphi(x) = F(a_0, a_1, \dots, a_n, x)$ 是由一系列已知函数的线性组合时， 法方程组为线性方程组。此时可以代入矩阵求解。

当函数为线性拟合时， 最小二乘法退化为：

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}, \quad y = a + bx$$

数值积分

1、中点法： $M = hf\left(\frac{a+b}{2}\right)$ 2、梯形法： $T = h \frac{f(a) + f(b)}{2}$

中点法和梯形法的误差相反， 且中点法准确性是梯形法的两倍， 对其进行加权平均：

3、辛普森法则： $S = \frac{2}{3}M + \frac{1}{3}T = \frac{h}{6} [f(a) + 4f(c) + f(b)]$

微分方程：

1、欧拉法 设一阶方程可以写成 $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ ， $x \in [a, b]$ ， $y(a) = y_0$

把 $[a, b]$ 分为 i 等分， 记分点为 $x_i = a + ih$ ， 则有 $y'(x_i) = f(x_i, y_i) = f(x_i, y(x_i))$

用向前差商代替导数， 有近似值 $y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y(x_i))$ 欧拉公式步进法

2、改进欧拉法 $\widetilde{y_{i+1}} = y_i + hf(x_i, y_i)$, $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \widetilde{y_{i+1}})]$

3、龙格库塔法

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_1\right) \\ K_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_2\right) \\ K_4 = f(x_i + h, y_i + hK_3) \end{cases}$$