

# 第一章 数值计算

## 1.1 绪论

**定义 1.1.1.** 若  $A$  非奇异, 称  $\text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$  为  $A$  的条件数。 $\text{cond}(A) \geq 1$ , 当  $A$  为正交矩阵时  $\text{cond}(A) = 1$ 。

**定理 1.1.1.** 对于线性方程组  $Ax = b$

1. 设  $A(x + \delta x) = b + \delta b$ ,  $\delta x$  收到  $\delta b$  的影响表示为

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

2. 设  $(A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b$ ,  $\delta x$  收到  $\delta A, \delta b$  的影响表示为

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond} \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}} \left( \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \right)$$

证明:

$$\begin{aligned} & (A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b \\ & (A + \delta A)\delta x = b + \delta b - \cancel{A + \delta A}^{\rightarrow} = b + \delta A \cdot x \\ & \delta x = \underbrace{(A + \delta A)^{-1}}_{(I + \delta A A^{-1})^{-1}} (\delta b - \delta A \cdot x) \\ & \|\delta x\| = \|A^{-1}(I + \delta A A^{-1})^{-1}(\delta b - \delta A \cdot x)\| \\ & \leq \|A^{-1}\| \|(I + \delta A A^{-1})^{-1}\| \|(\delta b - \delta A \cdot x)\| \\ & \leq \|A^{-1}\| \frac{1}{1 - \|\delta A\| \|A^{-1}\|} \|(\underbrace{\delta b}_{\text{partA}} - \underbrace{\delta A \cdot x}_{\text{partB}})\| \\ & \text{partB} = \|A^{-1}\| \|A\| \frac{1}{1 - \|\delta A\| \|A^{-1}\|} \frac{\|x\| \|\delta A\|}{\|A\|} \\ & \text{partA} = \|A^{-1}\| \frac{1}{1 - \|\delta A\| \|A^{-1}\|} \frac{\|\delta b\| \|Ax\|}{\|B\|} \leq \|A^{-1}\| \frac{1}{1 - \|\delta A\| \|A^{-1}\|} \frac{\|\delta b\| \|A\| \|x\|}{\|B\|} \\ & \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond} \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}} \left( \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \right) \end{aligned}$$

□

**引理 1.1.2.** 若  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , 且  $\|A\| < 1$ , 则

1.  $I - A$  非奇异
2.  $(I - A)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} A^k$
3.  $\|(I - A)^{-1}\| \leq \frac{1}{1-\|A\|}$

证明:

1. 若  $I - A$  奇异, 则  $\exists x \neq 0$ , s.t.  $(I - A)x = 0$ , 即 1 为  $A$  的特征值, 矛盾
2.  $\sum_{k=0}^{\infty} A^k \cdot (I - A) = A^0 = I$
3.  $\|(I - A)^{-1}\| = \|\sum_{k=0}^{\infty} A^k\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \|A^k\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \|A\|^k = \frac{1}{1-\|A\|}$

□

**注.** 在数值分析中, 判断矩阵  $A$  是否病态 (即对微小扰动敏感) 通常不直接计算  $A^{-1}$  (条件数), 而是依据以下经验准则:

#### 1. 行列式很大或很小 (如某些行、列近似相关)

行列式  $\det(A)$  的绝对值若远小于或远大于矩阵元素数量级的  $n$  次方, 可能预示病态。

**解释:** 行列式绝对值过小通常意味着矩阵的行或列向量近似线性相关, 导致其张成的“体积”很小, 矩阵接近奇异。

#### 2. 元素间相差大数量级, 且无规则

若矩阵元素在数值上跨越多个数量级 (如  $10^{-6}$  与  $10^3$  共存), 且没有特定的分布模式 (如对角占优)。

**解释:** 这种巨大的尺度差异会在数值计算 (如消元法) 中放大舍入误差, 除非该矩阵具有特殊的、可补偿的结构。

#### 3. 主元消去过程中出现小主元

在进行高斯消元时, 如果出现绝对值非常小的主元。

**解释:** 小主元意味着矩阵接近奇异, 在消元过程中需要用其去除其他大元素, 这会极大地放大原始数据中存在的微小误差。

#### 4. 特征值相差大数量级

矩阵的特征值  $\lambda_i$  的绝对值分布范围极广, 即  $\max |\lambda_i| / \min |\lambda_i| \gg 1$ 。

**解释:** 对于对称矩阵, 这直接导致其条件数  $\kappa(A)$  极大, 意味着矩阵在不同特征向量方向上的伸缩程度差异巨大, 从而对扰动非常敏感。

## 1.2 非线性方程求根

### 1.2.1 二分法 (对分法)

二分法两种终止条件:

1. 给定精度条件  $|f(x)| < \varepsilon$  不适用情况: 当函数在远离根的区域存在平坦区间 (即导数近似为零) 时, 即使当前点  $x$  离真实根  $r$  还很远, 也可能满足  $|f(x)| < \varepsilon$ , 导致算法提前

终止，返回一个错误解。

数学描述：存在连续函数  $f \in C[a, b]$ ,  $f(r) = 0$ , 且存在某点  $x_0$  满足  $|x_0 - r| \gg 0$ , 但  $|f(x_0)| < \varepsilon$ 。此时若以  $|f(x_n)| < \varepsilon$  为终止条件, 可能在  $x_n = x_0$  时就停止迭代, 而实际误差  $|x_n - r|$  很大。

2. 区间长度条件  $b - a < \varepsilon$  不适用情况：当函数在根  $r$  附近数值上呈现陡峭跳变（由于浮点舍入误差导致类似符号函数的行为）时，可能在迭代过程中因符号判断错误而将真根排除在区间之外。此时区间继续缩小至  $b - a < \varepsilon$ , 但区间内不含根, 导致返回错误解。  
数学描述：存在连续函数  $f \in C[a, b]$ , 由于浮点运算精度限制, 在根  $r$  的某邻域  $(r-\delta, r+\delta)$  之外, 计算出的  $\text{sign}(f(x))$  为常值且错误, 导致二分法过早丢弃含根区间。此后区间  $[a_n, b_n]$  满足  $b_n - a_n < \varepsilon$  但不满足  $r \in [a_n, b_n]$ 。