

第一章 数值计算

1.1 绪论

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

定理 1.1.1. 对于线性方程组 $Ax = b$

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

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

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

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

证明:

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

□

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 λ_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 $r \in [a_n, b_n]$ 。