

高等数值计算

沈 艳 杨丽宏 王立刚 冯国峰 编著
沈继红 主审

清华大学出版社

介绍全书主要基础知识和理论，并配有大量例题和习题，可作为高等院校理工科专业教材，也可供从事数值计算工作的工程技术人员参考。

高等数值计算

沈 艳 杨丽宏 王立刚 冯国峰 编著

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书以数值计算方法的理论与方法为主线,在介绍了线性代数必备知识与误差理论的基础上,全面介绍了求解线性方程组的直接法,求解线性方程组、非线性方程(组)及矩阵特征值与特征向量的迭代法,函数的插值与逼近,数值积分与数值微分,求解常微分方程定解问题的数值方法,求解偏微分方程定解问题的有限差分法和有限元法,书中详细讲述了各种方法的构造思想、理论推导、计算公式以及误差分析等内容.本书结构清晰,重点突出,便于根据不同对象、学时和要求进行教学.此外,各章均配有有一定数量的习题,以方便读者学习本课程.

本书既适合作为工科及理科高等院校高年级本科生、研究生的教材,也适合作为教师和广大科技工作者从事科学研究的参考书.

版权所有,侵权必究.侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

高等数值计算/沈艳等编著.--北京:清华大学出版社,2014
ISBN 978-7-302-35427-7

I. ①高… II. ①沈… III. ①数值计算 IV. ①O241

中国版本图书馆CIP数据核字(2014)第028073号



责任编辑:刘颖
封面设计:傅瑞学
责任校对:王淑云
责任印制:何芊

出版发行:清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址:北京清华大学学研大厦A座 邮 编:100084

社总机:010-62770175 邮 购:010-62786544

投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质量反馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印 装 者:北京鑫海金澳胶印有限公司

经 销:全国新华书店

开 本:185mm×260mm 印 张:18.5 字 数:446千字

版 次:2014年5月第1版 印 次:2014年5月第1次印刷

印 数:1~3000

定 价:38.00元

产品编号:048757-01

前 言

随着计算机的广泛使用与科学技术的迅速发展,科学计算已成为科学研究、工程设计中的一个重要的手段,它已成为与理论分析、科学试验并驾齐驱的科学研究方法.目前,掌握和应用科学计算的基本方法或数值计算方法,已不再仅仅是数学专业的学生和专门从事科学与工程计算工作的科研人员的必备知识,大量从事力学、物理学、航空航天、信息传输、能源开发、土木工程、机械设计、医药卫生及社会科学领域的科研人员和工程技术人员,也将数值计算方法作为各自领域研究的一种重要研究工具.因此,“数值计算方法”已逐渐成为理工科大学本科生和硕士研究生的必修课程.

本教材根据国家教委关于“数值计算方法”课程的基本要求,介绍计算机上常用的数值计算方法,不仅充实完善了线性代数方程组直接法和迭代法、非线性方程与方程组求根、函数的插值与逼近、数值微积分和微分方程数值解等内容,而且还增加了数值求解偏微分方程的有限差分法和有限元法.全书深入浅出,层次分明,部分理论证明和全书内容独立,便于根据工科研究生 32 学时、48 学时等不同需求进行取材和教学,也适合数学系高年级本科生 64 学时、72 学时使用.该书在内容安排上,既注重理论的严谨性,又注重方法的实用性.每章配备了大量的例题与数值计算应用实例,并配有丰富的习题,以帮助读者巩固和加深理解有关内容.

本教材适合理工科大学硕士研究生“数值计算”或者“数值分析”课程及数学系高年级本科生“计算方法”课程使用,也可供相关科技人员学习参考.

本书编写得到哈尔滨工程大学研究生院大力支持,在此表示衷心的感谢.希望使用本书的广大读者和教师,对本书缺点和不足之处提出批评并指正.

编 者
2014 年 3 月

目 录

第 1 章 预备知识与误差理论	1
1.1 线性代数的一些基础知识	1
1.1.1 几种常见矩阵及其性质	1
1.1.2 矩阵的特征值问题与对角化	2
1.1.3 线性空间与内积空间	4
1.1.4 向量范数	6
1.1.5 矩阵范数与矩阵的算子范数	8
1.2 误差	11
1.2.1 误差的来源与分类	11
1.2.2 误差与有效数字	12
1.2.3 数值运算中的误差估计	14
1.2.4 病态问题与算法稳定性分析	15
1.2.5 避免误差危害与数值计算中算法设计	17
习题 1	18
第 2 章 解线性方程组的直接法	20
2.1 高斯消去法	21
2.1.1 基本高斯消去法	21
2.1.2 列主元高斯消去法	24
2.2 矩阵三角分解	26
2.2.1 LU 分解	26
2.2.2 三对角方程组的追赶法	31
2.2.3 对称矩阵的三角分解	33
2.2.4 平方根法	34
2.3 矩阵条件数与病态方程组	36
2.3.1 病态现象与条件数	36
2.3.2 线性方程组的误差分析	38
2.3.3 病态线性方程组	40

2.4 豪斯霍尔德变换与 QR 分解	40
习题 2	46
第 3 章 解线性方程组的迭代法	48
3.1 经典迭代法的基本概念	48
3.1.1 雅可比迭代法	49
3.1.2 高斯-赛德尔迭代法	50
3.1.3 逐次超松弛迭代法	52
3.2 迭代法的收敛性	54
3.3 共轭梯度法	57
3.3.1 最速下降法	57
3.3.2 共轭梯度法	58
习题 3	59
第 4 章 非线性方程与方程组的迭代解法	61
4.1 根的搜索	61
4.2 压缩映像原理与不动点迭代法	63
4.2.1 不动点迭代法的基本思想	63
4.2.2 压缩映像原理	65
4.2.3 不动点迭代法的收敛性	66
4.3 牛顿迭代法及其变形	68
4.3.1 牛顿迭代法及其收敛性	68
4.3.2 牛顿迭代法的修正	70
4.3.3 重根的迭代法	73
4.4 迭代收敛的加速方法	74
4.4.1 埃特金加速收敛方法	74
4.4.2 斯特芬森迭代法	74
4.5 求解非线性方程组的迭代法	76
4.5.1 多变量的不动点迭代法	76
4.5.2 多变量的牛顿迭代法	78
习题 4	79
第 5 章 矩阵特征值和特征向量的迭代算法	81
5.1 幂迭代法	82
5.1.1 幂迭代法原理	82
5.1.2 加速收敛的方法	85
5.1.3 反幂法	86
5.2 QR 迭代法	88
5.2.1 QR 迭代法的原理	88

5.2.2 黑森伯格矩阵	90
习题 5	95
第 6 章 插值法	96
6.1 插值问题的提出	96
6.2 多项式插值	97
6.3 拉格朗日插值方法	97
6.3.1 拉格朗日插值	97
6.3.2 插值余项	99
6.4 牛顿插值多项式	102
6.4.1 差商形式的牛顿插值多项式	102
6.4.2 差商的基本性质	104
6.4.3 差分形式的牛顿插值多项式	105
6.5 埃尔米特插值多项式	108
6.5.1 构造基函数方法	108
6.5.2 待定系数法	110
6.5.3 重节点差商法	111
6.6 分段低次插值	111
6.6.1 高次插值多项式的缺陷	111
6.6.2 分段线性插值	113
6.6.3 分段三次埃尔米特插值	114
6.7 三次样条插值	115
6.7.1 三次样条插值问题的基本提法	115
6.7.2 三次样条插值公式	116
6.7.3 误差阶与收敛性	118
6.8 B-样条插值	119
6.8.1 B-样条函数	119
6.8.2 m 次样条函数空间	120
6.8.3 B-样条插值	122
习题 6	122
第 7 章 函数逼近与曲线拟合	126
7.1 正交多项式	127
7.1.1 正交函数族	127
7.1.2 正交多项式的性质	128
7.1.3 勒让德多项式	130
7.1.4 切比雪夫多项式	130
7.1.5 切比雪夫多项式零点插值	132
7.2 最佳平方逼近	134

7.2.1	最佳平方逼近及其误差分析	134
7.2.2	用正交函数族作最佳平方逼近	137
7.3	曲线拟合的最小二乘法	140
7.3.1	最小二乘拟合问题	140
7.3.2	非线性最小二乘拟合的线性化	142
7.3.3	用正交多项式作最小二乘拟合	145
	习题 7	146
第 8 章	数值积分与数值微分	148
8.1	数值积分的基本概念	149
8.1.1	插值型求积公式	150
8.1.2	求积公式的代数精度	150
8.2	牛顿-科特斯求积公式	151
8.2.1	牛顿-科特斯公式	151
8.2.2	几种常用的牛顿-科特斯求积公式	153
8.3	复化求积公式	155
8.3.1	复化梯形求积公式	155
8.3.2	复化辛普森求积公式	156
8.3.3	复化科特斯求积公式	157
8.4	龙贝格积分方法	158
8.4.1	后验误差估计	158
8.4.2	变步长梯形公式	159
8.4.3	理查森外推法	159
8.4.4	龙贝格算法	161
8.5	高斯求积公式	162
8.5.1	高斯型求积公式的建立	162
8.5.2	高斯求积公式的余项	164
8.5.3	高斯-勒让德求积公式	165
8.5.4	高斯-切比雪夫求积公式	167
8.6	数值微分	167
8.6.1	差商公式及误差分析	167
8.6.2	插值型求导公式	168
8.6.3	三次样条求导	170
	习题 8	171
第 9 章	常微分方程的初值问题	173
9.1	引言	173
9.2	常微分方程初值问题的一般方法	174
9.2.1	单步方法和多步方法	176

9.2.2	显式方法和隐式方法	177
9.2.3	局部截断误差和整体截断误差	177
9.2.4	线性多步法的相容性与收敛性	178
9.2.5	线性多步法的稳定性与绝对稳定域	178
9.3	常微分方程初值问题的高阶单步法	182
9.3.1	泰勒级数法	183
9.3.2	龙格-库塔方法	184
9.4	高阶单步方法的性态分析及改进	187
9.5	线性多步法——亚当斯方法和吉尔方法	190
9.5.1	亚当斯-巴什福思方法	191
9.5.2	亚当斯-莫尔顿方法	192
9.5.3	吉尔方法	192
9.6	一般线性多步方法的构造	193
9.7	一阶常微分方程组	196
9.8	刚性问题	199
9.8.1	隐式龙格-库塔方法	200
9.8.2	吉尔方法	202
	习题 9	203
第 10 章	求解微分方程的有限差分法	205
10.1	解两点边值问题的差分方法	205
10.2	在矩形区域上求解椭圆边值问题的差分方法	209
10.2.1	第一类边值条件	212
10.2.2	第二、第三类边值条件	213
10.3	在三角形网格上求解椭圆型方程的有限差分法	214
10.4	椭圆差分方程的性态研究	215
10.5	扩散方程的有限差分法	220
10.5.1	扩散方程的离散	220
10.5.2	古典显格式	223
10.5.3	古典隐格式	223
10.5.4	克兰克-尼科尔森格式	224
10.5.5	最高截断误差阶的两层加权平均格式	224
10.5.6	理查森格式	225
10.6	对流方程的差分格式	228
10.7	波动方程的差分离散	231
	习题 10	233
第 11 章	求解微分方程的有限元法简介	238
11.1	变分问题	238



11.1.1	两点边值问题的变分形式	238
11.1.2	泛函和变分	241
11.1.3	两点边值问题的变分形式	243
11.1.4	椭圆型方程的变分形式	245
11.2	泛函的极值问题	250
11.2.1	泛函的极值问题的存在性	250
11.2.2	与椭圆型方程相应的泛函极值问题	252
11.2.3	极值问题与变分问题之间的联系	254
11.3	变分和泛函极值问题的近似求解	256
11.3.1	变分和泛函极值问题的进一步讨论	256
11.3.2	里茨法	260
11.3.3	伽辽金法	263
11.4	解椭圆型问题的有限元方法	265
11.4.1	基于变分问题的有限元方法	265
11.4.2	基于泛函极值问题的有限元方法	269
	习题 11	274
	习题答案或提示	276
	参考文献	283

第1章

预备知识与误差理论

数学是科学之母,科学技术离不开数学.科学技术通过建立数学模型而与数学产生紧密的联系,数学又以各种形式应用于科学技术各领域.“数值计算”这门课程的主要任务是研究各种数学问题的数值计算方法的设计、分析以及有关的数学理论和如何具体实现,常常也称为数值分析或者数值计算方法,前者理论与方法并重,后者注重于方法.历史上数值计算方法是以前数学问题为研究对象,只是不像纯数学那样只研究数学本身的理论,而是把理论与计算机紧密结合,着重研究数学问题的数值方法、评估数值解的精确程度、收敛性、稳定性等.本课程既有纯数学的高度抽象性与严密科学性的特点,又有应用广泛性与实际试验高度技术性的特点,是一门实用性很强的数学课程.

一般来说,用计算机求解科学技术问题通常经历以下几个步骤:

第一步:根据实际问题建立数学模型.

第二步:由数学模型给出数值计算方法.

第三步:根据计算方法编制程序(数学软件)在计算机上算出结果.

上述过程中的第一步建立数学模型通常是应用数学的任务,而第二、三步就是计算数学的任务,也就是数值分析研究的对象,它涉及数学的各个分支,内容十分广泛.“数值计算”课程中将介绍其中最基本、最常用的数值方法及其理论,它包括线性方程组的数值求解、非线性方程与方程组求解、矩阵特征值和特征向量的计算、插值与逼近、数值积分与微分、常微分方程和偏微分方程的数值解等.

1.1 线性代数的一些基础知识

本节回顾线性代数课程中的一些基础知识,并适当补充一些内容供以后各章使用.

1.1.1 几种常见矩阵及其性质

1. 正交矩阵

设 $\mathbf{A} = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 若满足 $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}$, 则称 \mathbf{A} 为正交矩阵. 正交矩阵有下列性质:

① 按向量内积定义, \mathbf{A} 不同的列向量相互正交, 且各列向量的 2-范数等于 1;

- ② $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$, 且 \mathbf{A}^T 也是正交矩阵;
 ③ \mathbf{A} 的行列式 $\det \mathbf{A}$ 的绝对值等于 1;
 ④ 若 \mathbf{A}, \mathbf{B} 都是同阶的正交矩阵, 则 \mathbf{AB} 和 \mathbf{BA} 都是正交矩阵.

2. 对称矩阵

设 $\mathbf{A} = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 若 $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$, 则称 \mathbf{A} 为实对称矩阵. 它有下列性质:

- ① \mathbf{A} 的特征值均为实数, 且有 n 个线性无关的特征向量;
 ② \mathbf{A} 对应于不同特征值的向量必正交;
 ③ 存在正交矩阵 \mathbf{P} , 使 $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}$ 为对角矩阵.

3. 对称正定矩阵

设 $\mathbf{A} = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是实对称矩阵, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$, 称

$$(\mathbf{Ax}, \mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j$$

为实对称矩阵 \mathbf{A} 的二次型. 若对任意 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, 有 $(\mathbf{Ax}, \mathbf{x}) > 0$, 则称 \mathbf{A} 是对称正定矩阵.

关于对称正定矩阵有下列性质:

- ① 设 $\mathbf{A} = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则 k 阶矩阵

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{bmatrix}, \quad k = 1, 2, \dots, n$$

称为 \mathbf{A} 的 k 阶顺序主子式矩阵. 它们的行列式依次记为 $\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_n$, 称为 \mathbf{A} 的顺序主子式, 其中 $\Delta_1 = a_{11}, \Delta_n = \det \mathbf{A}$, \mathbf{A} 是对称正定矩阵的充分必要条件是所有顺序主子式是大于零的, 即 $\Delta_k > 0, k = 1, 2, \dots, n$.

- ② 实对称矩阵 \mathbf{A} 是对称正定矩阵的充分必要条件是 \mathbf{A} 的所有特征值都大于零.

特别地, 如果对称矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 满足 $(\mathbf{Ax}, \mathbf{x}) \geq 0 (\forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0})$, 则称 \mathbf{A} 是对称非负定矩阵 (或称为半正定矩阵), 非负定矩阵的所有特征值都是非负实数.

1.1.2 矩阵的特征值问题与对角化

1. 矩阵特征值问题

- ① 设 $\mathbf{A} = (a_{ij})$ 是实数或复数 n 阶方阵, 若存在复数 λ 及非零向量 \mathbf{x} , 使得

$$\mathbf{Ax} = \lambda \mathbf{x},$$

则称 λ 是方阵 \mathbf{A} 的特征值, 称非零向量 \mathbf{x} 是矩阵 \mathbf{A} 的属于特征值 λ 的特征向量. 求特征值 λ 和与之相应的特征向量 \mathbf{x} 的问题称为矩阵的特征值问题.

- ② 矩阵 $\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}$ 的行列式 $\det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})$ 称为 \mathbf{A} 的特征多项式, 方程

$$\det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) = 0$$

称为 \mathbf{A} 的特征方程, 它是特征值 λ 的 n 次代数方程, 所以矩阵 \mathbf{A} 有 n 个复数 (也可以是实数) 特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ (方程的重根按重数计算).

- ③ \mathbf{A} 的全体特征值的集合称为 \mathbf{A} 的谱, 记作 $\sigma(\mathbf{A})$, 即

$$\sigma(\mathbf{A}) = \{\lambda_i \mid \mathbf{Ax} = \lambda_i \mathbf{x}, i = 1, 2, \dots, n\}. \quad (1-1)$$

- ④ 称 \mathbf{A} 的谱 $\sigma(\mathbf{A})$ 中模的最大值为 \mathbf{A} 的谱半径, 记做 $\rho(\mathbf{A})$, 即

$$\rho(\mathbf{A}) = \max_{\lambda_i \in \sigma(\mathbf{A})} |\lambda_i|. \quad (1-2)$$

⑤ \mathbf{A} 的对角元素之和 $\sum_{i=1}^n a_{ii}$ 称为 \mathbf{A} 的迹, 记为 $\text{tr}\mathbf{A}$, 即 $\text{tr}\mathbf{A} = \sum_{i=1}^n a_{ii}$. 且有

$$\text{tr}\mathbf{A} = \sum_{i=1}^n \lambda_i, \quad \det\mathbf{A} = |\mathbf{A}| = \lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n.$$

2. 矩阵对角化问题

① 设 \mathbf{A}, \mathbf{B} 均为 n 阶方阵, 若存在 n 阶可逆方阵 \mathbf{P} , 使 $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \mathbf{B}$, 则称 \mathbf{A} 与 \mathbf{B} 相似, 相似矩阵具有相同的特征多项式和相同的谱.

② 如果 \mathbf{A} 与对角矩阵 $\text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$ 相似, 称 \mathbf{A} 可以通过相似变换化为对角矩阵, 简称 \mathbf{A} 可对角化.

③ \mathbf{A} 可对角化的充分必要条件是 \mathbf{A} 有 n 个线性无关的特征向量. 如果 \mathbf{A} 是实对称矩阵, 则它的特征值全都是实数, 且一定可以对角化.

④ 如果 \mathbf{A} 有 n 个不同的特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$, 即 \mathbf{A} 的特征方程的根都是单重根, 则 \mathbf{A} 可对角化.

⑤ 如果 \mathbf{A} 的特征值有相同的, 即特征方程有重根, 这时

$$\det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}) = (\lambda - \lambda_1)^{n_1} (\lambda - \lambda_2)^{n_2} \cdots (\lambda - \lambda_s)^{n_s},$$

其中当 $i \neq j$ 时, 有 $\lambda_i \neq \lambda_j, i, j = 1, 2, \cdots, s$, 也就是 λ_i 是特征方程的 n_i 重根. n_i 称为特征值 λ_i 的代数重数. 它们满足: $n_i \geq 1 (i = 1, 2, \cdots, s)$ 且 $n_1 + n_2 + \cdots + n_s = n$. 设 λ_i 对应的最大线性无关特征向量的个数为 m_i 个, 则数 m_i 应是齐次线性方程组 $(\lambda_i \mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 的基础解系中所含最大线性无关解的个数, m_i 也称为 λ_i 的几何重数, 显然 $m_i \leq n_i (i = 1, 2, \cdots, s)$. 于是, \mathbf{A} 可对角化的充分必要条件是每个特征值 λ_i 的几何重数与代数重数相等, 即

$$m_i = n_i, \quad i = 1, 2, \cdots, s.$$

此时亦称矩阵 \mathbf{A} 为非亏损矩阵, 否则, 若存在 $i \in \{1, 2, \cdots, s\}$ 使得 $m_i \neq n_i$, 则称 \mathbf{A} 为亏损矩阵.

⑥ 在矩阵的特征值的几何重数与代数重数不相等的情况下, 可以把 \mathbf{A} 化为若尔当 (Jordan) 标准形, 即有下面的定理.

定理 1.1 (若尔当标准形) 设方阵 \mathbf{A} 有 s 个不同的特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_s$, 则 \mathbf{A} 可通过相似变换化为若尔当标准形矩阵 \mathbf{J} , 它是含有 s 个对角块的块对角阵, 即存在可逆阵 \mathbf{P} , 使得

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \mathbf{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{J}_1 & & & \\ & \mathbf{J}_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{J}_s \end{bmatrix},$$

其中每个对角块 \mathbf{J}_i 分别对应于特征值 $\lambda_i (i = 1, 2, \cdots, s)$, 每个 \mathbf{J}_i 是 n_i 阶方阵 (n_i 是 λ_i 的代数重数), \mathbf{J}_i 有它自己的含有 m_i 个子块的块对角结构 (m_i 是 λ_i 的几何重数), 可以写成

$$\mathbf{J}_i = \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{i1} & & & \\ & \mathbf{J}_{i2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{J}_{im_i} \end{bmatrix}, \quad \text{其中 } \mathbf{J}_{ik} = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & \\ & \lambda_i & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & \lambda_i \end{bmatrix}, \quad \begin{cases} k=1, 2, \cdots, m_i, \\ i=1, 2, \cdots, s. \end{cases}$$

\mathbf{J}_i 中不同的 \mathbf{J}_{ik} 对应 λ_i 的不同的特征向量, \mathbf{J}_{ik} 称为若尔当块, \mathbf{J}_i 称为若尔当子阵. 如果 \mathbf{J}_{ik} 是 1×1 的矩阵, 则 \mathbf{J}_{ik} 中只有对角元 λ_i .

1.1.3 线性空间与内积空间

“数域”是代数学的一个概念. 所谓数域 F 是指复数集合 \mathbb{C} 的一个子集, 满足: $0 \in F$, $1 \in F$, 且 F 中任意的两个数(可以相同)的和、差、积、商(除数不为零)仍属于 F , 本书常用到的是实数域 \mathbb{R} 和复数域 \mathbb{C} .

1. 线性空间

(1) 线性空间的定义

定义 1.1 若在数域 F 和非空集合 V 上定义了数与集合 V 中元素的数乘运算以及集合 V 中元素之间的加法运算, 并且集合 V 对加法和数乘运算封闭, 则称集合 V 是数域 F 上的线性空间(或数域 F 上的向量空间).

(2) 线性空间的基与维数

定义 1.2 令 V 为线性空间. 若 V 中存在 $n(n \geq 1)$ 个向量 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 满足:

① $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 线性无关;

② V 中任何一个向量都可由 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 线性表示.

则称向量组 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 为线性空间 V 的一组基. 为方便起见, 可将 V 记为

$$V = \text{span}\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\} \quad \text{或者} \quad V = \langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n \rangle,$$

表示 V 是以 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 为基的线性空间或称 V 是由 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 生成的(或张成)的线性空间.

(3) 有限维线性空间与无限维线性空间

线性空间 V 的基不是唯一的, 但容易证明 V 的任何两个基中所含向量的个数是相同的, 我们称这个数是 V 的维数, 记为 $\dim V$. 当 $\dim V$ 是有限数时, 我们称 V 是有限维空间. 若 V 中存在个数任意的线性无关组, 则称 V 为无限维线性空间. 特别地, 若一个线性空间 V 中只含有零向量, 则约定其维数 $\dim V = 0$.

2. 内积与欧几里得(Euclid)空间

(1) 内积的定义

定义 1.3 设 V 是实数域 \mathbb{R} 上的线性空间, 内积是 $V \times V$ 到 \mathbb{R} 的一个映射, 即对于 V 中的任意两个元素 u 和 v , 都有 \mathbb{R} 中唯一的一个数(记为 (u, v))与之对应, 满足:

① $(u, v) = (v, u), \forall u, v \in V$;

② $(u+v, w) = (u, w) + (v, w), \forall u, v, w \in V$;

③ $(ku, v) = k(u, v), \forall u, v \in V, \forall k \in \mathbb{R}$;

④ $(u, u) \geq 0, \forall u \in V$, 且 $(u, u) = 0 \Leftrightarrow u = 0$.

则称 (u, v) 为向量 u 与 v 的内积. 定义了内积的实数域 \mathbb{R} 上的线性空间称为内积空间.

(2) 几个典型例子

例 1.1 (\mathbb{R}^n 和 \mathbb{C}^n) \mathbb{R}^n 是 n 维实向量的全体, 按向量加法及实数与向量的数乘, 构成了实数域 \mathbb{R} 上的线性空间. 同理可以定义 \mathbb{C}^n .

在向量空间 \mathbb{R}^n 中, 对任意向量 $\alpha = (a_1, a_2, \dots, a_n), \beta = (b_1, b_2, \dots, b_n)$, 定义

$$(\alpha, \beta) = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_n b_n = \sum_{i=1}^n a_i b_i. \quad (1-3)$$

显然这样定义的内积 (α, β) 满足定义 1.3. 当 $n=3$ 时, (1-3) 式所定义的内积就是三维几何

空间 \mathbb{R}^3 中向量的内积在直角坐标系下的坐标表达式.

如果 $(u, v) = 0$, 则称两个向量 u 和 v 正交, 这是二、三维向量相互垂直的概念的推广.

例 1.2 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 是所有 m 行 n 列实元素矩阵的全体, 按矩阵加法及实数与矩阵的数乘构成了实数域 \mathbb{R} 上的线性空间. 对于任意的矩阵 $\mathbf{A} = (a_{ij}), \mathbf{B} = (b_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 定义

$$(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} b_{ij}. \quad (1-4)$$

根据矩阵的乘法运算及矩阵的迹的概念, 有 $(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} b_{ij} = \text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}^T)$. 可以证明这样定义的两个 n 阶实方阵 \mathbf{A}, \mathbf{B} 的内积(1-4)式满足定义 1.3.

例 1.3 $C[a, b]$ 是定义在区间 $[a, b]$ 上的连续实值(或复值)函数的全体, 按函数加法及实数(或复数)与函数的乘法, 构成了实数域 \mathbb{R} 上(或复数域 \mathbb{C} 上)的线性空间.

如对任意的 $f(x), g(x) \in C[a, b], \alpha \in \mathbb{R}$ (或 $\alpha \in \mathbb{C}$), 加法和数乘给出了 $C[a, b]$ 上的函数, 即有 $f(x) + g(x) \in C[a, b]$, 及 $\alpha f(x) \in C[a, b]$, 进一步可以验证连续函数空间是线性空间.

同理, 证 $C^n[a, b]$ 为定义在闭区间 $[a, b]$ 上具有 n 阶连续导数的实值(或复值)函数的全体, 同上可定义函数的加法和数乘, $C^n[a, b]$ 也是线性空间.

在 $C[a, b]$ 上可以定义 $f(x)$ 与 $g(x)$ 的内积为

$$(f(x), g(x)) = \int_a^b f(x)g(x)dx. \quad (1-5)$$

容易验证由(1-5)式定义的 $(f(x), g(x))$ 满足内积定义, 于是 $C[a, b]$ 对这个内积构成一内积空间.

例 1.4 用 $P_n(x)$ 表示闭区间 $[a, b]$ 不超过 n 次的多项式的全体, 对于通常的多项式加法及实数与多项式的乘法运算构成了 \mathbb{R} 上的线性空间. 显然多项式函数在其定义域上是连续的, 故两个多项式的内积也可由(1-5)式来定义.

(3) 有关内积的几个重要结论

① **定理 1.2**(柯西-施瓦茨不等式) 设 V 是一个内积空间, 则对任意的 $u, v \in V$, 有

$$|(u, v)|^2 \leq (u, u)(v, v). \quad (1-6)$$

且等号成立的充分必要条件是 u 与 v 线性相关. (1-6)式也称为柯西-施瓦茨(Cauchy-Schwarz)不等式.

② **定义 1.4** 设 V 是一个内积空间, $u_1, u_2, \dots, u_n \in V$, 则矩阵

$$\mathbf{G}(u_1, u_2, \dots, u_n) = \begin{bmatrix} (u_1, u_1) & (u_2, u_1) & \cdots & (u_n, u_1) \\ (u_1, u_2) & (u_2, u_2) & \cdots & (u_n, u_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (u_1, u_n) & (u_2, u_n) & \cdots & (u_n, u_n) \end{bmatrix} \quad (1-7)$$

称为格拉姆(Gram)矩阵.

③ **定理 1.3** 设 V 是一个内积空间, $u_1, u_2, \dots, u_n \in V$, 则格拉姆矩阵 $\mathbf{G}(u_1, u_2, \dots, u_n)$ 非奇异的充分必要条件是元素 u_1, u_2, \dots, u_n 线性无关.

例 1.5 设 $x, y \in \mathbb{R}^n$, 其中 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T, y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$, 内积 (x, y) 通常定义为

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n x_i y_i = \mathbf{y}^T \mathbf{x}. \quad (1-8)$$

此时柯西-施瓦茨不等式为

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y})^2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i y_i \right)^2 \leq \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^n y_i^2 \right). \quad (1-9)$$

说明 如果给定实数 $w_i > 0, i=1, 2, \dots, n$, 又可定义 \mathbb{R}^n 的另一种带权 w_i 的内积

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y})_w = \sum_{i=1}^n w_i x_i y_i. \quad (1-10)$$

例 1.6 在内积空间 $C[a, b]$ 中, 对任意的 $f(x), g(x) \in C[a, b]$, 利用(1-6)式有

$$\left(\int_a^b f(x)g(x)dx \right)^2 \leq \left(\int_a^b f^2(x)dx \right) \left(\int_a^b g^2(x)dx \right). \quad (1-11)$$

1.1.4 向量范数

我们通常把数域 F 上的线性空间 V 的元素称为向量, 把几何空间视为一般线性空间的具体模型, 不难发现几何空间中向量的长度、向量之间的夹角等概念, 在线性空间中没有得到反映, 这些与度量有关的概念不仅在理论上, 而且在实际应用中都有重要作用. 因此有必要在线性空间中引进向量的长度、向量之间夹角等度量概念.

在二、三维向量空间中, 有向量长度的概念, 下面把这个概念扩展到一般的线性空间.

1. 范数的一般定义

定义 1.5 设 V 是数域 F 上的线性空间. 定义 V 到 \mathbb{R} 的一个映射 $\|\cdot\|$, 即对任意的 $u \in V$, 都有一个实数 $\|u\| \in \mathbb{R}$ 与之对应, 满足以下性质:

- ① 正定性: $\|u\| \geq 0$, $\forall u \in V$, 而且 $\|u\| = 0 \Leftrightarrow u = 0$;
- ② 齐次性: $\|au\| = |a| \|u\|$, $\forall u \in V, a \in F$;
- ③ 三角不等式: $\|u+v\| \leq \|u\| + \|v\|$, $\forall u, v \in V$.

则称 $\|\cdot\|$ 为 V 上的范数. 定义了范数的线性空间称为线性赋范空间.

2. 向量的范数

(1) 向量范数的定义

定义 1.6 如果向量 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ (或 \mathbb{C}^n) 的某个实值函数 $N(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|$, 满足条件:

- ① $\|\mathbf{x}\| \geq 0$ ($\|\mathbf{x}\| = 0$ 当且仅当 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$) (正定性);
- ② $\|\alpha\mathbf{x}\| = |\alpha| \|\mathbf{x}\|$, $\forall \alpha \in \mathbb{R}$ (或 \mathbb{C}) (齐次性);
- ③ $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$ (闵科夫斯基三角不等式).

则称 $N(\mathbf{x})$ 是 \mathbb{R}^n (或 \mathbb{C}^n) 上的一个向量范数 (或模).

由定义 1.6 中的(3)可推出

$$|\|\mathbf{x}\| - \|\mathbf{y}\|| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|. \quad (1-12)$$

(2) 几种常用的向量范数

对于向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$, 可以定义:

∞ -范数 (最大范数):

$$\|\mathbf{x}\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|, \quad (1-13)$$

1-范数:

$$\| \mathbf{x} \|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|, \quad (1-14)$$

2-范数:

$$\| \mathbf{x} \|_2 = (\mathbf{x}, \mathbf{x})^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1-15)$$

特别地, $\| \mathbf{x} \|_2$ 也称为向量 \mathbf{x} 的欧氏范数. 显然, 按照向量内积的计算公式(1-4), 有

$$(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \| \mathbf{x} \|_2^2 \quad \text{或者} \quad \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} = \| \mathbf{x} \|_2. \quad (1-16)$$

p -范数:

$$\| \mathbf{x} \|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}, \text{ 其中 } p \in [1, \infty).$$

可以证明向量函数 $N(\mathbf{x}) \equiv \| \mathbf{x} \|_p$ 是 \mathbb{R}^n 上的向量的范数, 且容易说明上述三种范数是 p -范数的特殊情况 ($\| \mathbf{x} \|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \| \mathbf{x} \|_p$). 且容易验证这样定义的向量 \mathbf{x} 的函数 $N(\mathbf{x})$ 满足向量范数的 3 个条件.

例 1.7 计算向量 $\mathbf{x} = (1, 4, 3, -1)^T$ 的 3 种范数.

解 $\| \mathbf{x} \|_1 = |x_1| + |x_2| + |x_3| + |x_4| = 9,$

$$\| \mathbf{x} \|_2 = (|x_1|^2 + |x_2|^2 + |x_3|^2 + |x_4|^2)^{1/2} = \sqrt{27} = 3\sqrt{3},$$

$$\| \mathbf{x} \|_\infty = \max_{1 \leq i \leq 4} |x_i| = 4.$$

例 1.8 ($C[a, b]$ 上定义的范数) (1-5) 式定义了 $C[a, b]$ 的内积, 由此可以导出 $C[a, b]$ 的 2-范数. 设 $f(x) \in C[a, b]$, 记

$$\| f(x) \|_2 = \sqrt{(f(x), f(x))} = \left[\int_a^b (f(x))^2 dx \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1-17)$$

也可以不由内积定义范数, 例如

$$\| f(x) \|_\infty = \max_{x \in [a, b]} |f(x)|, \quad (1-18)$$

$$\| f(x) \|_1 = \int_a^b |f(x)| dx. \quad (1-19)$$

显然它们都满足定义 1.6, (1-17)、(1-18)、(1-19) 式分别称为闭区间 $[a, b]$ 上的连续函数 $f(x)$ 的 2-范数、 ∞ -范数(最大范数)、1-范数.

3. 向量范数的等价性

定理 1.4 ($N(\mathbf{x})$ 的连续性) 设非负函数 $N(\mathbf{x}) = \| \mathbf{x} \|$ 为 \mathbb{R}^n 上任一向量范数, 则 $N(\mathbf{x})$ 是 \mathbf{x} 的分量 x_1, x_2, \dots, x_n 的连续函数.

定理 1.5 (向量范数的等价性) 设 $\| \mathbf{x} \|_s, \| \mathbf{x} \|_t$ 为 \mathbb{R}^n 上向量的任意两种范数, 则存在常数 $c_1, c_2 > 0$, 使得对一切 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ 有

$$c_1 \| \mathbf{x} \|_s \leq \| \mathbf{x} \|_t \leq c_2 \| \mathbf{x} \|_s. \quad (1-20)$$

证明 只需就 $\| \mathbf{x} \|_s = \| \mathbf{x} \|_\infty$ 证明上式成立即可, 即证明存在常数 $c_1, c_2 > 0$, 使

$$c_1 \leq \frac{\| \mathbf{x} \|_t}{\| \mathbf{x} \|_\infty} \leq c_2, \quad \text{对一切 } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \text{ 且 } \mathbf{x} \neq \mathbf{0}.$$

考虑函数

$$f(\mathbf{x}) = \| \mathbf{x} \|_t \geq 0, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n.$$