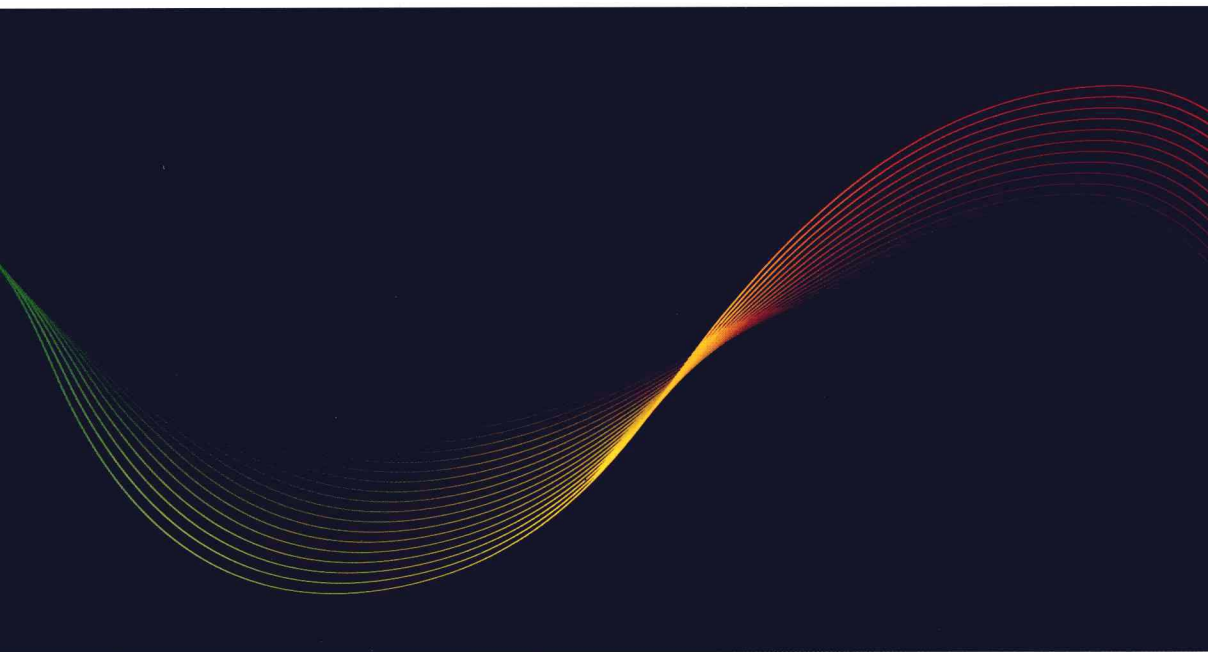


数值分析

谷根代 杨晓忠 等 编著



科学出版社

内 容 简 介

本书系统地介绍了数值分析的基本方法和理论, 并强调这些数值分析方法在计算机上如何实现. 内容包括: 数值计算的引论、非线性方程求根、插值与拟合、数值微分和数值积分、常微分方程初值问题的数值解法、解线性代数方程组的高斯消去法和迭代解法、矩阵特征值问题的解法、非线性方程组的迭代解法. 每章末都配有章末总结、习题和计算实习, 供读者学习巩固.

本书是为工学硕士研究生数值分析课程编写的教材, 也可作为信息与计算科学、应用物理、计算机等专业本科生教材, 并可供工程技术人员和科研人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

数值分析 / 谷根代, 杨晓忠等编著. —北京: 科学出版社, 2011
ISBN 978-7-03-032140-4

I. ①数… II. ①谷… ②杨… III. ①数值分析-研究生-教材
IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011) 第 170356 号

责任编辑: 张中兴 / 责任校对: 刘亚琦
责任印制: 张克忠 / 封面设计: 谜底书装

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码 100717

<http://www.sciencep.com>

骏立印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2011 年 8 月第 一 版 开本 720 × 1000 1/16

2011 年 8 月第一次印刷 印张 12 3/4

印数 1—3 000 字数 250 000

定价: 34.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前 言

计算机技术和计算数学(数值分析)的有机结合和相互促进,形成了平行于理论分析和实验研究的一种新的科学方法——科学与工程计算.科学与工程计算已成为自然科学、工程技术、经济等领域不可或缺的一种研究手段,极大地推进了科学技术的进步和发展,而数值分析就是科学与工程计算的核心.数值分析(numerical analysis)已成为国内外大学普遍开设的一门数学课程.

数值分析面向各学科最常见的数学问题,它的内容一般包含解决这些问题最基础的数值方法及其分析.它是连接理论与实践的桥梁,也是发展更复杂的数值计算方法的基础.本书比较系统地介绍了这门学科的一些基本方法和理论,着重对方法的分析并引入了各种类型的例子,强调该方法在计算机上如何实现.同时,也联系一些工程学科和其他学科中的实际问题,讨论这些问题与数值计算有关的数学模型.主要内容包括线性代数的数值计算(方程组的直接方法、迭代方法以及特征值问题的计算)、非线性方程(组)的数值解法、函数的插值和逼近、数值积分与数值微分以及常微分方程初值问题的数值解法.

教学中使用本书可以有不同的处理.一般课堂讲授 60 学时左右的课程可以讲授除各章带“*”外的内容,学时较少的课程可以酌情删减内容.本书是为工学硕士研究生,以及信息与计算科学、应用物理和计算机各专业本科生编写的教材,也可作为其他理工科各专业本科生和研究生课程的教材.我们也希望本书能对从事这方面工作的工程技术人员和科研人员有所帮助.

全书内容由谷根代教授和杨晓忠教授共同主持编写.谷根代编写第 1 章和第 9 章,杨晓忠编写第 6 章和第 8 章,彭武安编写第 2 章,刘敬刚编写第 5 章,张可铭编写第 3 章,曹艳华编写第 7 章,孔倩编写第 4 章.全书由谷根代统稿整理.中国科学院大气物理研究所(大气科学与计算地球流体力学数值模拟国家重点实验室)季仲贞研究员和哈尔滨工业大学吴勃英教授,认真审阅了书稿,纠正了书稿内一些不妥之处,并提出了许多宝贵的修改意见.这里向他们及本书所列参考文献的作者们,还有华北电力大学 2000 级硕士研究生袁婷同学、2001 级硕士研究生刘媛同学,科学出版社的张中兴女士等,表示衷心的感谢.

本书的出版得到国家自然科学基金(批准号 10771065)、河北省自然科学基金(批准号 A2007001027)和华北电力大学“211 工程”创新人才核心课程建设基金资助.

出版精品教科书,使众多莘莘学子受益,一直是作者追求的目标.但由于我们水平有

限, 尽管做了很大努力, 可能还会有很多不妥和错误, 我们衷心期望广大读者对本书提出宝贵的意见.

谷根代 杨晓忠

2011 年 5 月

目 录

前言

第 1 章 引论	1
1.1 数值分析研究的内容及特点	1
1.2 近似计算中的误差	3
1.3 向量和矩阵范数	7
1.4 函数的泰勒 (Taylor) 公式	8
1.5 算法的收敛性和数值稳定性	11
1.6 数值计算中的一些基本原则	13
习题 1	15
第 2 章 非线性方程求根	17
2.1 问题的提出	17
2.2 二分法	18
2.3 不动点迭代	19
2.4 牛顿 (Newton) 迭代法及其改进	22
2.5 加速收敛技术	26
本章总结	28
习题 2	28
计算实习 2	29
第 3 章 插值与拟合	30
3.1 问题的提出	30
3.2 代数插值	31
3.3 分段低次多项式插值	44
3.4 正交多项式及其在函数逼近中的应用	54
3.5 数据的最小二乘法拟合	61
本章总结	68
习题 3	69
计算实习 3	71
第 4 章 数值微分和数值积分	72
4.1 问题的提出	72
4.2 数值微分法	72

4.3 数值求积方法	75
4.4 插值型求积方法	77
4.5 复合求积方法	81
4.6 龙贝格 (Romberg) 积分法	84
4.7* 自适应求积方法	87
4.8 高斯 (Gauss) 型求积公式	89
本章总结	93
习题 4	94
计算实习 4	95
第 5 章 常微分方程初值问题的数值解法	96
5.1 问题的提出	96
5.2 初值问题的基本理论	96
5.3 初值问题的单步法	99
5.4 单步法数值稳定性	105
5.5* 单步法的步长选择与控制	109
5.6 初值问题的线性多步法	113
5.7* 一阶常微分方程组与高阶常微分方程	117
本章总结	119
习题 5	119
计算实习 5	120
第 6 章 解线性代数方程组的高斯消去法	121
6.1 问题的提出	121
6.2 列主元高斯消去法	122
6.3 LU 分解法	126
6.4 两类特殊矩阵方程	130
本章总结	132
习题 6	132
计算实习 6	134
第 7 章 线性方程组的迭代解法	135
7.1 迭代法的原理	135
7.2 古典迭代法及其收敛性	138
7.3 共轭梯度法	147
本章总结	153
习题 7	154
计算实习 7	155

第 8 章 矩阵特征值问题的解法	156
8.1 问题的提出	156
8.2 求指定特征值的幂法	156
8.3 求全矩阵部特征值的 QR 迭代法	163
本章总结	179
习题 8	179
计算实习 8	180
第 9 章 非线性方程组的迭代解法	182
9.1 问题的提出	182
9.2 Newton 迭代法	185
9.3 拟 Newton 迭代法	187
9.4 同伦方法	190
本章总结	193
习题 9	193
计算实习 9	194
参考文献	195

引 论

一个实际问题要想得到解决,首先要经过简化,再抽象成数学模型,接着提出数学模型的求解方法(算法),分析或在计算机上实现该算法得到结果,最后检验结果的正确性.对绝大多数问题来说,要得到数学模型解析解并非易事.例如,求多项式方程($n \geq 5$)

$$p_n(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n = 0$$

的根,只能用计算机求出数值解(近似解).从应用角度看,求得一个数学模型的数值解已经足够了.因此,讨论用于求数学模型数值解的方法是十分重要的工作.

1.1 数值分析研究的内容及特点

数值分析是为各类数学问题(模型)寻求适合计算机执行并能快速得到满意解的算法的学科.大家知道,计算机本身只会算术运算和逻辑运算,它的神奇之处就在于“快”,可以快到每秒浮点运算万亿次以上!算法就是利用计算机高速的简单运算来实现各种复杂的计算功能.

例 1 对于给定的 $x \in \mathbb{C}$, 计算多项式 $p(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$ 的值.

解 算法

```
p = a0;
for k = 1 : n
    p = p + ak · xk;
end
```

该算法经过 $\frac{n(n+1)}{2}$ 次乘法和 n 次加法运算得到 $p(x)$.

例 2 求可微函数 $f(x)$ 在 x_0 处的二阶导数 $f''(x_0)$.

解 由于 $h > 0$ 时,

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2} [f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)] - \frac{f^{(4)}(x_0)}{12} h^2 + O(h^4).$$

令 $s(h) = \frac{1}{h^2} [f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)]$, 则

$$s(h) - f''(x_0) = \frac{f^{(4)}(x_0)}{12} h^2 + O(h^4),$$

$$s\left(\frac{h}{2}\right) - f''(x_0) = \frac{f^{(4)}(x_0)}{12} \frac{h^2}{4} + O(h^4),$$

$$s(h) - s\left(\frac{h}{2}\right) \approx \frac{3}{4} \left[\frac{f^{(4)}(x_0)}{12} h^2 + O(h^4) \right] = 3 \left(s\left(\frac{h}{2}\right) - f''(x_0) \right),$$

所以对于给定的 $h, \varepsilon > 0$, 有算法

$$s = \frac{1}{h^2} [f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)];$$

$$h = \frac{h}{2};$$

$$s_1 = \frac{1}{h^2} [f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)];$$

while $|s_1 - s| > 3\varepsilon$

$$s = s_1;$$

$$h = \frac{h}{2};$$

$$s_1 = \frac{1}{h^2} [f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)];$$

end

可以看出, 经过多步简单的函数求值和算术运算可求得 $f''(x_0)$ 的近似值.

定义 1.1 算法就是按步执行的并能在有限步内完成的一个序列 $\{x^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$. 它蕴含着

(1) 以耗费计算量为代价, 每步设法将复杂数学运算化简为一系列简单运算过程的重复;

(2) 每步观察计算结果 $y^{(k)}$ 的精度:

$$y^{(k)} - x^* = (x^{(k)} - x^*) + (y^{(k)} - x^{(k)}),$$

其中 $(x^{(k)} - x^*)$ 称为算法的截断误差, $(y^{(k)} - x^{(k)})$ 称为算法的舍入误差.

求数学模型近似解的算法、误差理论、计算机实现构成了数值分析课程完整的研究内容.

1.2 近似计算中的误差

在科学与工程计算的过程中, 误差的来源主要有模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差四个方面, 见图 1.1.

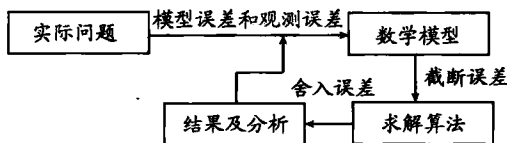


图 1.1 科学与工程计算中的误差来源

根据实际问题建立数学模型时要分析各种因素, 但一般忽略一些次要因素, 由此产生的误差称为模型误差. 模型误差是实际问题抽象、简化为数学问题 (模型) 时所引起的误差.

另外, 一般的数学模型包含若干个参数, 如温度, 长度, 电压等物理量, 这些参数的值往往由观测得到, 观测过程中难免会发生误差, 此时产生的误差称为观测误差.

一个数学问题难以求出准确解时, 我们会退而求其近似解, 由于构造相应问题的算法而引起的误差称为截断误差. 例如

$$\sin x \approx x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5$$

在近似的过程中产生截断误差

$$R = \sin x - \left(x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 \right) = -\frac{\cos(\xi)}{7!}x^7.$$

计算机只能对有限数位 (字长) 的数进行运算和表示, 对超过该计算机位数的数通常用“四舍五入”的办法取近似值, 由此引起的误差称为舍入误差.

不论是截断误差还是舍入误差, 都是因为对真值 x^* 的某种近似 x 而引起的误差.

定义 1.2 设 x 为真值 x^* 的近似, 称 $e(x) = x - x^*$ 为 x 的绝对误差, 简称误差; 当 $x^* \neq 0$ 时, 称 $e_r(x) = \frac{e(x)}{|x^*|} \approx \frac{e(x)}{|x|}$ 为 x 的相对误差.

绝对误差和相对误差都是刻画近似值精确度的重要概念. 一般来说真值 x^* 是未知的, 因此绝对误差和相对误差也是未知的. 然而, 在实际应用中只要估计出 $e(x)$ 或 $e_r(x)$ 的范围大小就行了. 例如使用毫米刻度的米尺测量某物体长度, 由“四舍五入”法可获得近似值 x , 其误差绝对值不会超过 0.5mm, 即

$$|e(x)| = |x - x^*| \leq 0.5.$$

从而物体长度的准确值满足不等式

$$x - 0.5 \leq x^* \leq x + 0.5$$

或记为 $x^* = x \pm 0.5(\text{mm})$, 其中小正数 0.5mm 称为近似值 x 的绝对误差限.

定义 1.3 设 x 为真值 x^* 的近似值, 如果 $|e(x)| = |x - x^*| \leq \varepsilon(x)$, 则称 $\varepsilon(x)$ 为 x 的绝对误差限. 当 $x^* \neq 0$ 时, 称

$$\varepsilon_r(x) = \frac{\varepsilon(x)}{|x^*|} \approx \frac{\varepsilon(x)}{|x|}$$

为 x 的相对误差限.

例 3 考虑真值 x^* 用 x 近似所产生的绝对误差和相对误差.

解 x^* 用 x 近似所产生的绝对误差和相对误差如表 1.1 所示.

表 1.1 x^* 用 x 近似所产生的绝对误差和相对误差

x^*	x	绝对误差 $ x^* - x $	相对误差 $ x^* - x / x $
0.3100×10^1	0.3000×10^1	0.1	0.3333×10^{-1}
0.3100×10^{-3}	0.3000×10^{-3}	0.1×10^{-4}	0.3333×10^{-1}
0.3100×10^4	0.3000×10^4	0.1×10^4	0.3333×10^{-1}

从表 1.1 看出: 虽然绝对误差有较大变化, 但是相对误差不变. 说明作为近似值精确性的度量, 绝对误差可能引起误解, 而相对误差由于考虑到了值的大小而更有意义.

数在计算机中是用有限位规格化的二进制或十进制浮点数表示的, 称为机器数. 设机器数以规格化的 k 位十进制浮点数的形式表示

$$\pm 0.a_1a_2 \cdots a_k \times 10^m,$$

其中 $a_1, a_2, \dots, a_k$ 都是 $0 \sim 9$ 中的整数且 $a_1 \neq 0$, m 为阶码. 则该计算机对超过 k 位的数

$$y = \pm 0.d_1d_2 \cdots d_k d_{k+1} d_{k+2} \cdots \times 10^n,$$

将进行末位 (d_{k+1}) 四舍五入处理, 得到 k 位浮点数

$$\bar{y} = \pm 0.b_1b_2 \cdots b_k \times 10^n,$$

其舍入误差满足

$$|\bar{y} - y| \leq \underbrace{0.00 \cdots 05}_k \times 10^n = \frac{1}{2} \times 10^{n-k},$$

即绝对误差限不超过末位数的半个单位.

例如, 考虑 π 的不同近似值: 取 3 位数 $x_3 = 3.14 = 0.314 \times 10^1$, 有

$$|\pi - x_3| \leq 0.0005 \times 10^1 = \frac{1}{2} \times 10^{1-3},$$

而取五位数 $x_5 = 3.1416 = 0.31416 \times 10^1$, 有

$$|\pi - x_5| \leq 0.000005 \times 10^1 = \frac{1}{2} \times 10^{1-5}.$$

定义 1.4 设近似数 x 的规格化浮点数形式为 $x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$, 满足

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n},$$

则称近似数 x 具有 n 位有效数字.

一个具有 n 位有效数字的近似数 $x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$, 其相对误差满足

$$\frac{|x - x^*|}{|x|} \leq \frac{5}{a_1} \times 10^{-n}.$$

反之, 若近似数 x 的相对误差满足

$$\frac{|x - x^*|}{|x|} \leq \frac{5}{a_1 + 1} \times 10^{-n},$$

则 x 至少有几位有效数字.

这说明, 有效数字的位数与相对误差的阶码相对应, 有效数字位数越多, 相对误差越小.

例 4 使 $\sqrt{30}$ 的近似值 x 的相对误差限不超过 0.1%, x 应取几位有效数字?

解 设 x 取 n 位有效数字. 因 $\sqrt{30}$ 的规格化浮点数的第 1 位数字 5, 所以相对误差限

$$\varepsilon_r(x) \leq \frac{5}{5} \times 10^{-n} = 10^{-n} \leq 0.001,$$

得到 $n = 3$.

例 5 已知 $\sqrt{20}$ 的近似数 x 相对误差限为 0.5%, 试问 x 至少有几位有效数字?

解 因 $\sqrt{20}$ 的规格化浮点数的第一位数字为 4, 阶码为 1, 所以

$$\frac{5}{4+1} \times 10^{-n} \leq 0.005$$

成立. 可见 $n \geq 2$, 即近似数 x 至少有 2 位有效数字.

我们知道, 数值算法是大量算术运算和函数求值的重复, 运算中误差的产生与传播会如何呢?

函数求值的误差 设一元函数 $y = f(x)$, 自变量准确值为 x^* , 近似值 x , 对应的函数准确值为 $y^* = f(x^*)$. 利用泰勒公式

$$f(x^*) - f(x) = (x^* - x)f'(x) + \frac{(x^* - x)^2}{2}f''(\xi),$$

其中 ξ 介于 x 和 x^* 之间. 忽略高阶项, 得函数的误差限

$$\varepsilon(y) \approx |f'(x)|\varepsilon(x).$$

对多元函数 $z = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, 利用多元函数泰勒公式, 仍然有误差估计

$$\varepsilon(z) \approx \sum_{k=1}^n \left| \frac{\partial f}{\partial x_k} \right| \varepsilon(x_k).$$

算术运算的误差 设两个近似数 x_1 与 x_2 的绝对误差限分别为 $\varepsilon(x_1)$ 和 $\varepsilon(x_2)$, 则对这两个数的加, 减, 乘, 除运算, 可以利用多元函数的误差估计得到:

$$\varepsilon(x_1 \pm x_2) = \varepsilon(x_1) + \varepsilon(x_2);$$

$$\varepsilon(x_1 \cdot x_2) \approx |x_1|\varepsilon(x_2) + |x_2|\varepsilon(x_1) \text{ 或 } \varepsilon_r(x_1 \cdot x_2) \approx \varepsilon_r(x_2) + \varepsilon_r(x_1);$$

$$\varepsilon(x_1/x_2) \approx \frac{|x_1|\varepsilon(x_2) + |x_2|\varepsilon(x_1)}{|x_2|^2} \text{ 或 } \varepsilon_r(x_1/x_2) \approx \varepsilon_r(x_2) + \varepsilon_r(x_1).$$

说明算术运算中误差累计是不可避免的.

例 6 试用 4 位浮点数计算机系统求二次方程 $x^2 - 16x + 1 = 0$ 的较小正根.

解 方程 $x^2 - 16x + 1 = 0$ 的较小正根为 $x_1^* = 8 - \sqrt{63} = \frac{1}{8 + \sqrt{63}}$. 采用

$$x_1^* \approx x_1 = 0.8000 \times 10^1 - 0.7937 \times 10^1 = 0.0063 \times 10^1 = 0.63 \times 10^{-1},$$

由于

$$\varepsilon(x_1) = \varepsilon(8) + \varepsilon(7.937) = 0 + 0.0005 = 0.5 \times 10^{-1-2},$$

故 $x_1 = 0.063$ 有 2 位有效数字.

采用

$$x_1^* \approx x_1 = \frac{1}{0.8000 \times 10^1 + 0.7937 \times 10^1} = \frac{1}{0.1594 \times 10^2} = 0.6274 \times 10^{-1},$$

此时

$$\varepsilon(x_1) \approx \frac{\varepsilon(15.94) + 15.94\varepsilon(1)}{(15.94)^2} \leq \frac{0.0005}{254.1} \leq 0.5 \times 10^{-1-4},$$

故 $x_1 = 0.6274 \times 10^{-1}$ 具有 4 位有效数字.

例 7 试分析对方程

$$p(x) = (x-1)(x-2)(x-3)(x-4)(x-5) = 0$$

中 x^4 的系数做微小扰动后各个根的变化.

解 设扰动方程 $p(x, \delta) = p(x) + \delta x^4 = 0$ 的根分别为 $\{z_k(\delta), k = 1, 2, 3, 4, 5\}$, 它们均是 δ 的连续可微函数. 对于充分小的 δ , 有

$$|z_k(\delta) - k| = |z_k(\delta) - z_k(0)| \approx \left| \frac{dz_k}{d\delta} \right|_{\delta=0} |\delta| = C_k |\delta|,$$

这里 $C_k = \left| \frac{dz_k}{d\delta} \right|_{\delta=0}$ 是误差放大系数. 由

$$p(z_k, \delta) = p(z_k) - \delta z_k^4 = 0, \quad (*)$$

得到

$$p'(z_k) \frac{dz_k}{d\delta} - z_k^4 - 4\delta z_k^3 \frac{dz_k}{d\delta} = 0, \quad \text{代入 } (*) \text{ 式有 } p'_{z_k}(z_k, \delta) \cdot \frac{dz_k}{d\delta} - z_k^4 = 0,$$

表 1.2 显示了放大系数的变化, 说明系数微小扰动对多项式根的影响是不可忽视的.

表 1.2 误差放大系数

k	1	2	3	4	5
C_k	0.04	2.67	20.25	42.67	26.04

1.3 向量和矩阵范数

讨论向量序列 $\{x^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$ 的收敛性, 实际上是观察空间两点 $x^{(k)}, x^*$ 之间的距离. 这需要范数概念.

定义 1.5 $\mathbf{R}^n$ 上定义的一个实函数 $\|x\|$, 称之为向量 x 的范数. 如果对于任意的 $\alpha \in \mathbf{R}, x, y \in \mathbf{R}^n$, 满足

- (1) 非负性 即 $\|x\| \geq 0, \|x\| = 0$ 当且仅当 $x = 0$;
- (2) 齐次性 即 $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$;
- (3) 三角不等式 即 $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.

$\mathbf{R}^n$ 上三种常用的范数有

$$1\text{-范数} \quad \|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|;$$

$$\text{2-范数 } \|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2};$$

$$\infty\text{-范数 } \|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|.$$

$\mathbf{R}^n$ 中两点 x^*, x 的距离为 $\|x^* - x\|$. 特别常用的是

$$\|x^* - x\|_2 = \sqrt{(x_1^* - x_1)^2 + (x_2^* - x_2)^2 + \cdots + (x_n^* - x_n)^2}.$$

定义 1.6 $\mathbf{R}^{n \times n}$ 上定义的一个实函数 $\|A\|$, 称之为矩阵 A 的范数, 如果对于任意的 $A, B \in \mathbf{R}^{n \times n}, x \in \mathbf{R}^n, \alpha \in \mathbf{R}$, 它满足下列性质:

- (1) 非负性 即 $\|A\| \geq 0, \|A\| = 0$ 当且仅当 $A = O$;
- (2) 齐次性 即 $\|\alpha A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$;
- (3) 三角不等式 即 $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$;
- (4) 相容性 即 $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|, \|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$.

$\mathbf{R}^{n \times n}$ 中常用的矩阵范数有

$$\infty\text{-范数 } \|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|.$$

$$1\text{-范数 } \|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|.$$

2-范数 $\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$, 其中 $\rho(B) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$, λ_i 是矩阵 B 的特征值, 称 $\rho(B)$ 为矩阵 B 的谱半径.

1.4 函数的泰勒 (Taylor) 公式

在算法的构造和分析中, 函数的 Taylor 公式起着最重要的作用.

一元函数 Taylor 公式 设 $f: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ 在 $x_0 \in \mathbf{R}$ 及其邻域有直到 $n+1$ 阶的导数, 则对于 x_0 的邻域的任意 x , 存在介于 x_0 和 x 之间的数 ξ , 使得

$$\begin{aligned} f(x) = & f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 \\ & + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}. \end{aligned}$$

实际问题中, 最常用的是函数在一点 x_0 处局部线性化公式

$$f(x) \approx L(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0),$$

它具有误差 (局部截断误差)

$$e(x) = f(x) - L(x) = \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_0)^2.$$

把一元函数 Taylor 公式推广到多元函数 $f: D \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ 和向量值函数 $F: D \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ 更有实际意义.

首先将一元函数可微的定义

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} [f(x_0 + t) - f(x_0) - at] = 0$$

推广到向量值函数 $F(x)$. 这里 $a = f'(x_0)$.

定义 1.7 向量值函数 $F: D \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ 在点 $x^{(0)} \in D$ 称为可微的, 如果存在 $n \times n$ 阶矩阵 A , 满足

$$\lim_{\|h\| \rightarrow 0} \frac{1}{\|h\|} \|F(x^{(0)} + h) - F(x^{(0)}) - Ah\| = 0 \quad (h \in \mathbf{R}^n).$$

可以证明这个矩阵 A 是唯一的 (证明留给读者自我练习).

记 $A = F'(x_0)$, 它称为 $F(x)$ 在点 $x^{(0)}$ 的导数, 且

$$F'(x^{(0)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}_{x=x^{(0)}}.$$

多元函数可以看成向量值函数的特例. 因此, 多元函数 $f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ 的导数

$$f'(x^{(0)}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)_{x=x^{(0)}}.$$

记 $\nabla f(x^{(0)}) = [f'(x^{(0)})]^T$, 称为多元函数 $f(x)$ 在点 $x^{(0)}$ 处的梯度.

多元函数的梯度函数 $\nabla f(x)$ 是向量值函数. 若 $\nabla f(x)$ 在点 $x^{(0)}$ 处可微, 则 $f(x)$ 有

二阶导数.

$$f''(\mathbf{x}^{(0)}) = \nabla^2 f(\mathbf{x}^{(0)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(0)}}$$

$f''(\mathbf{x}^{(0)})$ 又称为 $f(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x}^{(0)}$ 处的 Hesse 矩阵.

定义 1.8 称向量值函数 $F: D \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ 在点 $\mathbf{x}^{(0)} \in D$ 及其邻域二阶可微, 如果

$$\lim_{\|\mathbf{h}\| \rightarrow 0} \frac{1}{\|\mathbf{h}\|} \|F'(\mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{h}) - F'(\mathbf{x}^{(0)}) - F''(\mathbf{x}^{(0)})\mathbf{h}\| = 0$$

成立. 这里 $F''(\mathbf{x}^{(0)})$ 为二阶导数.

如果 $F(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x}^{(0)} \in D$ 二阶可微, 则有

$$F'(\mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{h}) - F'(\mathbf{x}^{(0)}) - F''(\mathbf{x}^{(0)})\mathbf{h} = o(\|\mathbf{h}\|) \mathbf{E},$$

推出

$$\begin{aligned} F''(\mathbf{x}^{(0)})\mathbf{h} &= F'(\mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{h}) - F'(\mathbf{x}^{(0)}) + o(\|\mathbf{h}\|) \mathbf{E} \\ &= \left(\frac{\partial f_i(\mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{h})}{\partial x_j} - \frac{\partial f_i(\mathbf{x}^{(0)})}{\partial x_j} \right)_{n \times n} + o(\|\mathbf{h}\|) \mathbf{E} \\ &= \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 f_i(\mathbf{x}^{(0)})}{\partial x_k \partial x_j} h_k \right)_{n \times n} + o(\|\mathbf{h}\|) \mathbf{E}, \end{aligned}$$

于是, 对于充分小的 $\|\mathbf{h}\|$ 有

$$F''(\mathbf{x}^{(0)})\mathbf{h} = \begin{pmatrix} H_1(\mathbf{x}^{(0)})\mathbf{h} & H_2(\mathbf{x}^{(0)})\mathbf{h} & \cdots & H_n(\mathbf{x}^{(0)})\mathbf{h} \end{pmatrix}^T,$$

其中

$$H_i(\mathbf{x}^{(0)}) = f''_i(\mathbf{x}^{(0)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_2 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_n \partial x_1} \\ \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_n \partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_2 \partial x_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(0)}}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$