

K. E. 阿特金森 著

数值分析引论

SHUZH I FENXI YIN LUN

上海科学技术出版社



51.81

7

数值分析引论

K. E. 阿特金森 著

匡蛟勋 王国荣 等译

上海科学技术出版社

**AN INTRODUCTION TO
NUMERICAL ANALYSIS**

By Kendall E. Atkinson
John Wiley & Sons, 1978

责任编辑 唐仲华

数值分析引论

K. E. 阿特金森 著

匡蛟勋 王国荣 等译

上海科学技术出版社出版

(上海瑞金二路 450 号)

新华书店上海发行所发行 上海东方印刷厂印刷

开本 850×1156 1/32 印张 16 字数 418,000

1986 年 7 月第 1 版 1986 年 7 月第 1 次印刷

印数: 1—7,400

书号: 13119·1344 定价: 3.90 元

译 者 序

一九八一年春,上海师范学院数学系为了81级计算数学硕士研究生们的教学需要,由本系匡蛟勋、乔三正、李燮璋、瞿必达、乔锐等同志将K. E. Atkinson著的《An Introduction to Numerical Analysis》一书译成中文,并由王国荣同志校阅了全部初稿。油印后,曾在我系高年级及研究生中教学实践两次,学生反映良好,与此同时,有些兄弟院校纷纷来索译稿,故在原稿基础上重新翻译出版。此书的大部分重译工作由匡蛟勋及王国荣同志负责。另外,瞿必达、李燮璋、王秋辉等同志也参加了部分章节的重译工作。

全书共分九章:第一章讲误差的来源和传播;第二章介绍非线性方程求根方法,较详细地讨论了一些常用的单点迭代法;第三章是插值理论,介绍经典插值方法及分段多项式插值;第四章讨论函数逼近,主要内容是一致逼近及最小二乘逼近的理论和计算问题,以及与此有关的正交多项式理论;第五章为数值积分,主要介绍Newton-Cotes公式、Gauss求积公式及其变形,另外还介绍了处理奇性积分的各种有效方法;第六章花较大的篇幅讨论了解常微分方程初值问题的单步法及线性多步法,详细研究了方法的收敛性及稳定性理论;第七章复习线性代数的一些基本理论及内容;第八章介绍了解线性方程组的常见的直接法与迭代法,并对这些方法进行误差分析,以及运算量的估计;第九章讨论矩阵特征值问题,主要介绍幂法、Givens方法以及QR方法。

本书内容丰富,取材精炼,叙述由浅入深,论证严密,重要结果皆以命题形式列出,重要方法皆列出算法便于读者编写程序。

本书是作为一本教材而编写的，每章附有与课文紧密结合的大量习题，便于读者深入掌握课文中的内容，同时亦是课文内容的补充。限于篇幅，本译稿删去了原文中的文献讨论及部分文献。

本书是一本入门教材，只要懂得微积分，线性代数及常微分方程初步的读者就能学习此书。

由于译者水平有限，错误在所难免，欢迎同志们批评指正。

译 者 一九八三年十一月于上海

引 言

这本数值分析引论是为数学专业、物理专业和工科的学生写的，学生应具有大学高年级到研究生低年级的水平。使用本书的预备知识是初等微积分、线性代数和微分方程引论。学生的数学修养应比上述要求略高一些。我发现大多数学生直到高年级才达到所要求的水平。最后，学生应具有编写计算机程序的知识。对于大多数科学程序，选用 Fortran 语言。

在应用中要真正有效地使用数值分析，需具有这门学科的理论知识和有关的计算经验。理论知识应包括对求解的原始问题及其数值方法的理解，其中还包括方法的推导过程、误差分析以及方法在什么时候执行得好或者不好的概念。即使你仅考虑使用计算中心程序包的话，这种知识也是必不可少的。你还必须知道此程序的目的是使用范围，从而了解此程序是否适用于你的特殊情况。更重要的是，大多数问题不能简单地用某个标准程序来解决。对于这样的问题，你必须设计新的数值方法，通常修改标准的数值方法来适合新的情况就可以了。为了设计新的方法和避免在许多问题中容易产生的一些数值差错，这就需要有良好的数值分析理论基础。

计算经验也是非常重要的。它使大多数理论上的讨论具有现实意义，并且它显示出大多数理论讨论中的精确运算与实际计算中有限字长运算之间的重要差异，不论在电子计算机上还是在袖珍计算器上进行计算，都有这种差异。电子计算机的利用也对数值方法的结构加以限制。从严格的数学观点来看，这种限制是不

明显的,似乎也是不必要的。例如,虽然直接法似乎比较容易解释和使用,但是因为迭代法程序简单或计算机贮存量受到限制,人们往往更愿意使用迭代法。本书举出许多数值例子来说明这些观点,另有许多练习,将使学生获得多方面的计算经验。

本书是按相当标准的方法组织教材的,理论上和计算上比较简单的论题最早出现。例如:单个非线性方程的求根问题放在第二章。在数值线性代数中较复杂的问题留在最后三章。然而,教师可以根据自己的意愿,将关于数值线性代数内容的第七章至第九章插在第一章后的任何地方。第一章包括许多引子,教师可以将其中一些论题放在本教程稍后的地方。但是,必须学完 1.1 节的数学准备知识和某些数学记号及 1.2 节和 1.3 节的一部分关于计算机浮点运算的介绍,这是很重要的。

本教材内容丰富,足够教一年多,另外,对于某些论题作的介绍,教师可以根据论题本身的一些注释作进一步的讨论。例如,在第六章 6.8 节的最后部分,给出了 Stiff 微分方程的简要介绍,还有在第七章定理 7.5 和问题 15 中给出一些最小二乘数据拟合问题的理论基础。

每一章都有一组练习,其中有些是教材的说明或应用,另一些涉及新资料的进展。为了帮助学生,把一部分练习的答案和提示放在书末。但是,学生解决一些没有答案可查的问题也是很重要的。这样迫使他们考虑各种不同方法来检查自己的结果,同时也将迫使他们具备某种常识或判断力,以帮助他们认识自己的结果是否合理。

我花一年时间教完本书的大部分内容。第一学期从第一章到第五章,第二学期从第六章到第九章。除了 2.4 节中关于线性迭代法,3.1—3.3 节和 3.6 节中关于插值的理论,4.4 节中关于正交多项式及 5.1 节中关于梯形和 Simpson 求积公式以外,大部分章节里的许多论题可以略去而不致于在后面章节中产生任何困难。

本人感谢衣阿华大学 Herb Hethcote 教授,他提出许多有益的建议,并用本书的早期草稿授课,同时也对犹他大学 Robert

Barnhill 教授, 俄克拉何马州立大学 Herman Burehard 教授和
纽约工艺学院 Robert J. Flynn 教授的建议表示谢意。我十分感
激 Ada Burns 和 Lois Friday, 她们出色地打印了本书以及早期
的稿子。我也感谢许多学生, 他们在过去的十二年中听我的课, 使
用我的笔记和草稿而不使用正规课本。这些学生指出了许多错
误, 他们学习某些论题时所遇到的困难, 有助于我把这些论题的表
达准备得更清楚些。John Wiley 出版社的工作人员对我的帮助
也是十分大的, 由于他们的努力, 本书大为改观。最后, 我对我妻
子 Alice 的耐心支持和鼓励表示感谢, 没有她的支持, 本书也许不
会完成。

衣阿华城

1978 年 8 月

Kendall E. Atkinson

目 录

译者序

引言

第一章 误差的来源和传播	1
1.1 数学准备知识	1
1.2 数在计算机中的表示法	9
1.3 误差的来源	11
1.4 误差的传播	16
1.5 数值分析中的稳定性	23
问题	28
第二章 非线性方程求根	31
2.1 简单的闭区间套法	34
2.2 割线法	38
2.3 Newton 法	42
2.4 单点迭代法的一般理论	48
2.5 线性收敛序列的 Aitken 外推法	53
2.6 误差检验	57
2.7 重根的数值求值	59
2.8 Brent 求根算法	64
2.9 多项式的根	67
2.10 Muller 方法	73

2.11	非线性方程组	76
2.12	非线性方程组的 Newton 法	79
	问题	83
第三章	插值理论	89
3.1	多项式插值理论	89
3.2	Newton 差商	95
3.3	有限差分及定向插值公式	104
3.4	数据和向前差分的误差	108
3.5	插值误差的进一步结果	111
3.6	Hermite 插值	115
3.7	分段多项式插值	119
	问题	129
第四章	函数逼近	133
4.1	Weierstrass 定理和 Taylor 定理	133
4.2	极小极大逼近问题	137
4.3	最小二乘逼近问题	139
4.4	正交多项式	142
4.5	最小二乘逼近问题(续)	150
4.6	Taylor 级数的减缩	155
4.7	极小极大逼近	159
4.8	近似极小极大逼近	162
4.9	Remes 算法	170
	问题	172
第五章	数值积分	177
5.1	梯形公式和 Simpson 公式	179
5.2	Newton-Cotes 积分公式	189
5.3	Gauss 求积	194

5.4	Patterson 方法	205
5.5	渐近误差公式和它们的应用	211
5.6	自适应数值积分法	225
5.7	奇异积分	230
	问题	238
第六章 微分方程的数值方法244		
6.1	存在性、唯一性和稳定性理论	246
6.2	Euler 方法	254
6.3	多步法	267
6.4	中点方法	272
6.5	梯形方法	278
6.6	一个低阶预报-校正算法	283
6.7	高阶多步法的推导	291
6.8	多步法的收敛性和稳定性理论	303
6.9	单步法和 Runge-Kutta 方法	317
	问题	331
第七章 线性代数336		
7.1	向量空间、矩阵、线性方程组	336
7.2	特征值和矩阵的标准形	343
7.3	向量和矩阵的范数	351
7.4	收敛和扰动定理	360
	问题	365
第八章 线性方程组的数值解369		
8.1	Gauss 消元法	370
8.2	Gauss 消元法中的选主元及按比例增减问题	376
8.3	Gauss 消元法的变形	383
8.4	误差分析	389

8.5	残差校正方法	398
8.6	迭代方法	402
8.7	误差预估及加速方法	407
8.8	Poisson 方程的数值解	411
	问题	417
第九章 矩阵特征值问题		422
9.1	特征值定位、误差和稳定性的一些结果	423
9.2	幂法	436
9.3	使用 Householder 矩阵的正交变换	442
9.4	对称三对角矩阵的特征值	452
9.5	QR 方法	458
9.6	特征向量的计算与逆迭代法	467
	问题	472
	习题选解	478
	参考文献	492

第一章 误差的来源和传播

数值分析这门学科是为研究和求解数学问题提供计算方法。在这本教材里,我们将导出最常见的数学问题求解的数值方法,并且分析这些方法中出现的误差。因为目前大多数计算是在数字计算机上进行的,所以我们也讨论这些数值方法作为计算机程序的实施问题。

对误差的研究是数值分析主要关心的事情。大多数数值方法给出的答案仅是所要求的真解的某种近似,因此了解并估计所引起的误差或确定误差的界限是重要的。本章把问题中可能发生各种误差加以分类,简单介绍计算机的运算,给出各种数值计算中误差传播的初步结论,并引入稳定性概念。第一章是一些为学习以后各章所必需的数学准备知识。

1.1 数学准备知识

本节回顾微积分中一些结论,它们将在本教材里用到。我们先给出几个中值定理,然后提出并讨论 Taylor 定理。最后引进以后各章将要采用的一些记号。

下列三个定理是非常初等的,但它们是数值分析中经常使用的重要工具。

定理 1.1(介值定理) 设 $f(x)$ 在有限区间 $a \leq x \leq b$ 上连续且定义

$$m = \inf_{a \leq x \leq b} f(x), \quad M = \sup_{a \leq x \leq b} f(x), \quad (1.1)$$

则对区间 $[m, M]$ 内的任意数 γ , 在区间 $[a, b]$ 内至少存在一点 ζ ,

使得

$$f(\zeta) = \gamma.$$

特别地, 在 $[a, b]$ 内存在点 \underline{x} 和 \bar{x} , 使得

$$f(\underline{x}) = m, \quad f(\bar{x}) = M. \quad (1.2)$$

定理 1.2(中值定理) 设 $f(x)$ 在 $a \leq x \leq b$ 上连续且可微, 则在 $[a, b]$ 内至少存在一点 ζ , 使得

$$f(b) - f(a) = f'(\zeta)(b - a). \quad (1.3)$$

定理 1.3(积分中值定理) 设 $w(x) \geq 0$ 在 $[a, b]$ 上可积,

$$\int_a^b w(x) dx < \infty,$$

并设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续, 则在 $[a, b]$ 内至少存在一点 ζ , 使得

$$\int_a^b w(x) f(x) dx = f(\zeta) \int_a^b w(x) dx. \quad (1.4)$$

证明 前两个定理在大多数微积分教程中都作了讨论, 因此我们略去任何讨论. 为了证明积分中值定理, 引入函数

$$\begin{aligned} g(u) &= f(u) \int_a^b w(x) dx - \int_a^b f(x) w(x) dx \\ &= \int_a^b [f(u) - f(x)] w(x) dx, \quad a \leq u \leq b, \end{aligned}$$

因为 $g(u)$ 正好是 $f(u)$ 的常数倍加上另一个常数, 所以它是 $[a, b]$ 上连续函数. 用(1.2)中的点 \underline{x} ,

$$g(\underline{x}) = \int_a^b [f(\underline{x}) - f(x)] w(x) dx \leq 0,$$

这是因为 $f(\underline{x}) - f(x) \leq 0$ 对 $[a, b]$ 上一切点成立, 因而被积函数决不为正的. 类似地, 用(1.2)中的 \bar{x} , 有 $g(\bar{x}) \geq 0$. 联合这两个结果, 由介值定理推得 $g(u)$ 在 \underline{x} 和 \bar{x} 之间必有零点 ζ , 这就证得(1.4). ■

作为积分中值定理的一个几何解释, 考虑 $w(x) \equiv 1$ 的情形. 此时在 $[a, b]$ 内存在点 ζ , 使得

$$\int_a^b f(x) dx = f(\zeta)(b - a),$$

左边是在 $x = a$ 和 $x = b$ 之间的曲线 $y = f(x)$ 下方的面积, 而右边

是底为 $[a, b]$ 高为 $f(\xi)$ 的矩形面积. 这三个定理将在后面各章及问题中得到应用.

Taylor 定理 数值分析最重要的工具之一是 Taylor 定理和 Taylor 级数. 在本教材中, 除数值线性代数那几章外, 其余各章都将应用它. 定理给出了用多项式逼近函数 $f(x)$ 的一个比较简单的方法, 从而给出计算 $f(x)$ 的一种方法.

定理 1.4(Taylor 定理) 设对某个 $n \geq 0$, $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上有 $n+1$ 阶连续导数, 且 $x, x_0 \in [a, b]$, 则

$$f(x) = p_n(x) + R_{n+1}(x) \quad (1.5)$$

$$p_n(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!} (x-x_0) + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x-x_0)^n \quad (1.6)$$

$$R_{n+1}(x) = \frac{1}{n!} \int_{x_0}^x (x-t)^n f^{(n+1)}(t) dt = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x-x_0)^{n+1} \quad (1.7)$$

其中 ξ 在 x_0 与 x 之间.

证明 大多数微积分教科书中已给出(1.5)的推导. 在恒等式

$$f(x) = f(x_0) + \int_{x_0}^x f'(t) dt$$

中, 适当使用分部积分, 重复 n 次, 得到(1.5)及(1.7)中积分形式的余项 $R_{n+1}(x)$. 对 $w(x) \equiv (x-t)^n$ 利用积分中值定理便得余项的第二种形式. ■

利用 Taylor 定理, 我们得到下列标准公式:

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} e^{\xi} \quad (1.8)$$

$$\begin{aligned} \cos(x) &= 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \dots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} \\ &\quad + (-1)^{n+1} \frac{x^{2n+2}}{(2n+2)!} - \cos(\xi_n) \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} \sin(x) &= x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \cdots + (-1)^{n-1} \frac{x^{2n-1}}{(2n-1)!} \\ &\quad + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} \cos(\xi_x) \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$\begin{aligned} (1+x)^\alpha &= 1 + \binom{\alpha}{1}x + \binom{\alpha}{2}x^2 + \cdots + \binom{\alpha}{n}x^n \\ &\quad + \binom{\alpha}{n+1} \frac{x^{n+1}}{(1+\xi_x)^{n+1-\alpha}} \end{aligned} \quad (1.11)$$

其中对任意实数 α ,

$$\binom{\alpha}{k} = \frac{\alpha(\alpha-1)\cdots(\alpha-k+1)}{k!} \quad k=1, 2, 3, \dots$$

而对以上各种情形,未知数 ξ_x 位于 x 与 0 之间.

(1.11)的一个重要特殊情形是几何级数

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \cdots + x^n + \frac{x^{n+1}}{1-x} \quad (1.12)$$

这是 $\alpha = -1$ 且以 $-x$ 代替 x 的情形. 它的余项比(1.11)中更简单些. 为了证明(1.12), 将(1.12)两边同乘 $1-x$ 后化简便可. 令 $n \rightarrow \infty$, 可得(1.8)至(1.12)左边函数的无穷级数表示. (1.8)至(1.10)的无穷级数对一切 x 都收敛, 而(1.11), (1.12)的无穷级数对一切 $|x| < 1$ 收敛.

由定义(1.6)能够直接计算任意函数 $f(x)$ 的 Taylor 级数, 使它含有事先要求的项数. 可是, 因为许多函数微商的复杂性, 所以利用(1.8)至(1.12)中某一个间接地得到 Taylor 级数往往更为方便. 我们给出这种方法的三个例子, 它们的余项也比直接利用(1.7)来得简单.

例 1 设 $f(x) = e^{-x^2}$, 在(1.8)中用 $-x^2$ 代替 x , 得

$$e^{-x^2} = 1 - x^2 + \frac{x^4}{2!} - \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{n!} + (-1)^{n+1} \frac{x^{2n+2}}{(n+1)!} e^{\xi x^2}$$

其中 $-x^2 \leq \xi_x \leq 0$.

例 2 设 $f(x) = \tan^{-1} x$, 在(1.12)中先设 $x = -u^2$,

$$\frac{1}{1+u^2} = 1 - u^2 + u^4 - \cdots + (-1)^n u^{2n} + (-1)^{n+1} \frac{u^{2n+2}}{1+u^2}$$

在 $[0, x]$ 上积分, 得

$$\begin{aligned} \tan^{-1} x &= x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{2n+1} \\ &\quad + (-1)^{n+1} \int_0^x \frac{u^{2n+2}}{1+u^2} du, \end{aligned}$$

应用积分中值定理,

$$\int_0^x \frac{u^{2n+2}}{1+u^2} du = \frac{x^{2n+3}}{2n+3} \cdot \frac{1}{1+\xi_x^2},$$

其中 ξ_x 在 0 与 x 之间.

例 3 设 $f(x) = \int_0^1 \sin(xt) dt$, 利用 (1.10),

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_0^1 \left[xt - \frac{x^3 t^3}{3!} + \cdots + (-1)^{n-1} \frac{(xt)^{2n-1}}{(2n-1)!} \right. \\ &\quad \left. + (-1)^n \frac{(xt)^{2n+1}}{(2n+1)!} \cos(\xi_{xt}) \right] dt \\ &= \sum_{j=1}^n (-1)^{j-1} \frac{x^{2j-1}}{(2j-1)!(2j)} \\ &\quad + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} \int_0^1 t^{2n+1} \cos(\xi_{xt}) dt, \end{aligned}$$

其中 ξ_{xt} 在 0 与 xt 之间. 容易验证余项中的积分以 $\frac{1}{2n+2}$ 为界; 可是我们也可把它转化为更简单的形式. 可以证明: $\cos(\xi_{xt})$ 是 t 的连续函数. 然后应用积分中值定理便可推出:

$$\begin{aligned} \int_0^1 \sin(xt) dt &= \sum_{j=1}^n (-1)^{j-1} \frac{x^{2j-1}}{(2j-1)!(2j)} \\ &\quad + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!(2n+2)} \cos(\zeta_x) \end{aligned}$$

其中 ζ_x 在 0 与 x 之间.

二维 Taylor 定理 设 $f(x, y)$ 是两个自变量 x 和 y 的已知函数. 我们将指出如何把前面的 Taylor 定理推广到 $f(x, y)$ 关于给定点 (x_0, y_0) 的展开式. 不难将此结果推广到多于两个自变量的函数. 作为记号, 设 $L(x_0, y_0; x_1, y_1)$ 表示连结 (x_0, y_0) , (x_1, y_1) 的线段上一切点 (x, y) 的集合.