



数值 数学 方法 引论

[德] W. Böhm G. Gose 著
包雪松 译 何旭初 校

数值数学方法引论

W. Böhm G. Gose 著

包雪松 译 何旭初 校

高等教育出版社

取值数学方法引论

W. Böhm G. Gose 著

包雪松译 何旭校

上海群众出版社出版

新华书店上海发行所发行

上海群众印刷厂印装

开本 850×1168 1/32 印张 5.625 字数 131,000

1987年9月第1版 1987年12月第1次印刷

印数 00,001—3,600

书号 13010·01151 定价 1.30 元

译 者 的 话

作者在本书中以很小的篇幅对数值数学(即计算数学)的基本内容作了清晰的介绍,是一本较好的入门书。作者的着眼点是介绍建立算法的基本思想和基本方法,而不是罗列一些算法。这样便可望使读者收到触类旁通的效果。在计算数学的教学工作中,如果忽视这一点而只注意具体算法的介绍,不仅使读者感到枯燥无味,而且还会影响读者能力的培养。而更值得注意的是,读者在应用中遇到困难时,可能会感到束手无策,缺乏独立解决问题的能力。希望本书译本的出版,将会对我们的计算数学教学工作产生有益的影响。

由于译者水平所限,翻译不当之处在所难免,尚希读者指正。

前 言

本书适用于数学系的高年级大学生、信息论工作者以及其他对自然科学有兴趣的读者。阅读本书仅要求对分析及线代数的基本知识有所准备。

此书源出于第一个作者在 Braunschweig 工业大学反复讲授的一个学期(每周三小时)课程的讲稿,它是数值数学入门的一个基本导引,其主要目的是尽可能地弄清楚用算法来求解十分不同的数学课题的基本思想,从而使学生能独立地处理相近的问题并将所学的原则用于新的问题。

为了引起学生对实践的兴趣,内容的安排尽可能生动,并且不让记号及证明技巧的困难掩盖方法的基本思想。

为了联系实际起见,算法恒以与 Algol 60 接近的书写方式给出,它可以直接编制程序,并用简单的例子来说明算法的流程。

特别要感谢 Ingrid Brückner 博士小姐,她对讲义初稿进行了加工,并且是本书出版的主要参加者。我们感谢 Brückner 博士小姐、Homuth 博士教授先生及数学系应届生 Jürgen Rüger 先生,他们帮助通读了校样。

Wolfgang Böhm

Günther Gose

1977 年春

于 Wolfenbüttel

与 Stuttgart

目 录

前言	1
I 基本概念	1
1. 算法与误差传播	1
1.1 算法	1
1.2 算法的实现	2
1.3 算法的鉴定	3
1.4 习题与补充	3
2. 矩阵	4
2.1 记号	4
2.2 矩阵乘积	6
2.3 Falk 格式	7
2.4 秩与行列式	8
2.5 范数与收敛性	9
2.6 习题与补充	10
II 线性方程组与线性不等式组	12
3. Gauss 算法	12
3.1 回代法	12
3.2 Gauss 算法	13
3.3 主元的选取	14
3.4 习题与补充	15
4. LR 分解	16
4.1 A 的 LR 分解	16
4.2 选主元的 LR 分解	17
4.3 线性方程组	18
4.4 习题与补充	19
5. 置换法	19

5.1	变量交换	20
5.2	表格式与算法	20
5.3	矩阵求逆	22
5.4	线性方程组	23
5.5	习题与补充	25
6.	Cholesky 分解	25
6.1	对称分解	25
6.2	存在性与唯一性	26
6.3	对称线性方程组	27
6.4	后期迭代	28
6.5	习题与补充	29
7.	QR 分解	30
7.1	Householder 变换	30
7.2	Householder 算法	31
7.3	线性方程组	32
7.4	习题与补充	33
8.	松弛法	34
8.1	坐标松弛法	34
8.2	优对角矩阵的收敛性	36
8.3	极小问题	37
8.4	对称正定矩阵的收敛性	39
8.5	几何解释	40
8.6	习题与补充	41
9.	线性拟合	41
9.1	超定线性方程组	42
9.2	QR 分解的应用	43
9.3	应用	43
9.4	亚定线性方程组	45
9.5	应用	46
9.6	几何意义及对偶性	47
9.7	习题与补充	47

10. 线性最优化	48
10.1 线性不等式与线性规划	48
10.2 顶点交换与单纯形方法	50
10.3 消去法	52
10.4 Tschebyscheff 拟合	54
10.5 习题与补充	56
III 迭代法	58
11. 向量迭代	58
11.1 矩阵的特征值问题	58
11.2 Modal 矩阵	59
11.3 von Mises 向量迭代法	60
11.4 逆迭代法	62
11.5 近似值的改进	63
11.6 习题与补充	64
12. LR 算法	65
12.1 Rutishauser 算法	65
12.2 收敛性证明	66
12.3 绝对值相等的特征值对	68
12.4 习题与补充	69
13. 一维迭代	70
13.1 压缩映像	70
13.2 误差估计	72
13.3 收敛速度	73
13.4 Aitken 的 Δ^2 -方法	74
13.5 几何加速收敛	75
13.6 零点	76
13.7 习题与补充	77
14. 多维迭代	78
14.1 压缩映像	78
14.2 收敛速度	78
14.3 加速收敛	79

14.4	方程组的零点	80
14.5	习题与补充	80
15.	多项式的零点	81
15.1	Horner 格式	81
15.2	推广的 Horner 格式	82
15.3	单零点	83
15.4	Bairstow 方法	84
15.5	确定二次因子推广的 Horner 格式	85
15.6	习题与补充	86
16.	Bernoulli 方法	87
16.1	线性差分方程	87
16.2	矩阵书写方式	88
16.3	Bernoulli 方法	89
16.4	逆迭代法	90
16.5	习题与补充	91
17.	QD 格式	91
17.1	三对角阵的 LR 算法	92
17.2	多项式的 QD 格式	94
17.3	绝对值相同的根对	95
17.4	习题与补充	96
IV	插值与离散逼近	98
18.	插值	98
18.1	插值多项式	98
18.2	Lagrange 多项式	99
18.3	Lagrange 插值	101
18.4	Newton 插值	102
18.5	多维插值	103
18.6	Aitken 引理	105
18.7	Neville 格式	106
18.8	习题与补充	107
19.	离散逼近	108

19.1 Taylor 展式	108
19.2 基点多项式	109
19.3 Tschebyscheff 逼近	111
19.4 Tschebyscheff 多项式	112
19.5 极小性质	113
19.6 按 Tschebyscheff 多项式展开	114
19.7 多项式次数的降低	115
19.8 最小二乘法	116
19.9 Tschebyscheff 多项式的正交性	116
19.10 习题与补充	118
20. Bézier 多项式	119
20.1 Bernstein 多项式	119
20.2 Bézier 多项式	120
20.3 点与切线的构造	121
20.4 Bézier 曲面	123
20.5 习题与补充	124
21. 样条与子样条	125
21.1 Bézier 曲线	125
21.2 可微性条件	126
21.3 三次样条及子样条	128
21.4 极小性质	130
21.5 习题与补充	132
V 数值微分与数值积分	133
22. 数值微分与数值积分	133
22.1 基点多项式的微分	133
22.2 数值微分的误差估计	135
22.3 基点多项式的积分	136
22.4 求和	139
22.5 数值积分的误差估计	140
22.6 习题与补充	141
23. 外推法	141

23.1	逼近序列	141
23.2	Richardson 外推法	142
23.3	重复的 Richardson 外推法	144
23.4	Romberg 积分	145
23.5	习题与补充	146
24.	微分方程的单步法	147
24.1	离散化	147
24.2	离散误差	148
24.3	Runge-Kutta 方法	150
24.4	Runge-Kutta 公式对	153
24.5	步长控制	154
24.6	习题与补充	155
25.	微分方程的线性多步法	156
25.1	离散化	156
25.2	多步法的收敛性	157
25.3	根条件	158
25.4	收敛的充分条件	159
25.5	起步计算	162
25.6	预测-校正方法	162
25.7	步长控制	163
25.8	单步法与多步法的比较	165
25.9	习题与补充	165

I 基本概念

一个确定的有限的工作方案,可用于整个一类问题,并且用有限步便可将一个问题化为另一个问题或得到它的解的,称为算法。

1 算法与误差传播

数值数学研究的对象是推导并探讨解数值问题的算法。由于舍入误差的原因,不是每一个问题在数字计算机上都可解,也不是每一种算法在数字计算机上所确定的解都是足够精确的。

1.1 算法

在数值数学中,人们理解一个算法是指:一个严格规定的单个初等运算的序列,在它们作用于容许输入的数据,并经过在有限多步之后,便产生出一组输出数据。一般来说,输入、输出数据分别是 R^n 及 R^m 中的元素。初等运算,例如,可以是4种基本运算,也可以是定积分或是线性方程组的求解。

每个算法都包含两个部分:在它的说明部分,定义了输入输出量。而在它的指令部分,以尽可能清楚而明了的语句写出了所要执行的初等运算。同时,对指令加以编号,必要时进行说明。

以计算乘积和

$$s = a_1 b_1 + \cdots + a_n b_n$$

为例,它的算法为:

乘积和

已知:	$a_1, \dots, a_n; b_1, \dots, b_n$
求:	$s = a_1b_1 + \dots + a_nb_n$

1 置 $s := 0$
2 对 $i = 1, 2, \dots, n$
3 构成 $s := s + a_ib_i$

这里“ $:=$ ”为赋值记号。指令2“对 $i = 1, 2, \dots, n$ ”意指，指令3在“构成 $s := s + a_ib_i$ ”时按顺序 $i = 1, i = 2, \dots, i = n$ 执行。因此指令3是从属于指令2的，它通过书写位置的右移来表示。变量 s 开始时为零，然后为中间结果，最后表示问题的解。每一个算法附有一个名称。为醒目起见，加了一个边框。

1.2 算法的实现

当以手算或是在一台计算机上执行算法时，都有误差出现。因为具体的计算只在实数的一个有限部分集合中进行，它对算法来说，一般不是封闭的。一般来说，计算机只对形如

$$\tilde{x} = m \cdot 10^a$$

的实数进行工作，其中指数 a 为整数， $|a| \leq q$ ，而 m 为尾数，它是由满足 $|m| < 1$ 的 p 位十进制小数确定的。这些数称为机器数或浮点数。若 $|m| \geq 0.1$ 则称尾数为规格化的。通常指数与尾数的范围为 $q = 99$ 及 $p = 8$ 至 $p = 12$ 。一个实数 x 用它最邻近的机器数 $\tilde{x}$ 来表示的过程称为舍入。

计算机进行乘法是通过把两个实数 x 和 y 舍入成 $\tilde{x}$ 和 $\tilde{y}$ ，然后形成 $z = \tilde{x} \cdot \tilde{y}$ （设 z 的绝对值小于 10^q ），再一次舍入成机器数 $\tilde{z}$ ，因此一般来说 $\tilde{z} \neq x \cdot y$ 。其它基本运算有相应的过程，它们一起构成所谓的浮点算术。人们注意到，在这种算术中，结合律分配律均

不成立。

对于规格化的尾数, 当尾数为最小值 0.1 时, 相对舍入误差 ρ 为最大, 它是

$$\rho := \left| \frac{x - \tilde{x}}{x} \right| \leq \frac{0.5 \cdot 10^{-p}}{0.1} = 5 \cdot 10^{-p}.$$

数 $\epsilon ps := 5 \cdot 10^{-p}$ 称为机器精度. ϵps 显然就是在机器上与 1 相加后得到不同于 1 的数中绝对值最小的量。

1.3 算法的鉴定

一个算法定义一个映射, 它将 R^n 的一个子集, 即输入数据, 映射到输出数据的空间 R^m 中, 它就是问题的解. 输入数据中的舍入误差以及其它误差会造成输出数据的误差, 人们要求这些误差不要太大, 并称一个问题是好条件的, 如果在输入数据中有一个相对改变量 ϵps 只使输出数据中产生不大的误差. 这个误差称为不可避免的误差。

一个算法称为数值上是稳定的或是好的, 如果由于在计算过程中的舍入, 在最终结果中引起的误差比不可避免的误差大得不多的话. 一个问题是好条件的, 而求解它的算法不一定总是好的。

1.4 习题与补充

1. 乘积 $z = x \cdot y$ 是好条件的.
2. 和 $z = x + y$ 至少对 $x \cdot y \geq 0$ 是好条件的.
3. 和 $z = x + y$ 当 $x \approx -y$ 及 $x \neq 0 \neq y$ 时, 在浮点算术中是坏条件的, 人们称它为对消.
4. 线性方程组

$$ax + y = 1,$$

$$x+ay=0,$$

当 $|a| \approx 1$ 时是坏条件的.

5. 表达式

$$z = x - \sqrt{x^2 + y}, \quad x \gg y > 0$$

是好条件的. 当开方含有一个相对误差 ϵps 时,

$$z := x - \sqrt{x^2 + y}$$

不是一个好算法, 而

$$z := \frac{-y}{x + \sqrt{x^2 + y}}$$

是好的, 为什么?

2 矩阵

线性代数问题用矩阵书写, 显得特别简单明瞭, 描述解这些问题的算法时也是如此.

2.1 记号

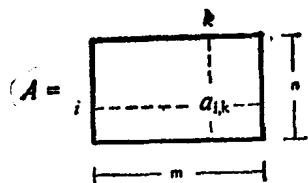
非齐次线性方程组

$$\begin{array}{ccccccc} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + \cdots + a_{1,m}x_m & = & a_1 \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n,1}x_1 + a_{n,2}x_2 + \cdots + a_{n,m}x_m & = & a_n \end{array} \quad (1)$$

的 $n \cdot m$ 个系数 $a_{i,k}$ 构成一个 $n \times m$ 矩阵

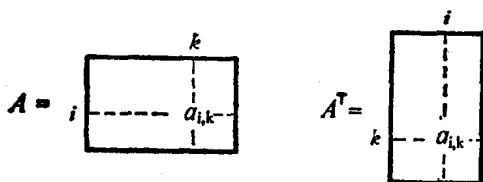
$$A := \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,m} \\ \vdots & & & \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,m} \end{bmatrix} = [a_{i,k}],$$

其中位于第 i 行与第 k 列相交处的元素是 $a_{i,k}$. 把一个 $n \times m$ 矩阵表示成一个长方块常常是有益的;



如果 $m=n$, 则称为方阵.

以 $n \times m$ 矩阵 A 中的列作为行所得到的 $m \times n$ 矩阵 $A^T = [a_{ki}]$, 称为 A 的转置矩阵.

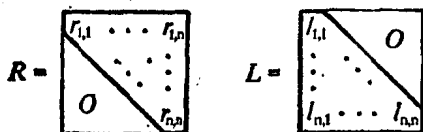


如果 $A^T = A$, 意即: 如果 $a_{i,k} = a_{k,i}$ 及 $m=n$, 则称矩阵 A 是对称的.

方阵 $E = [\delta_{i,k}]$, 其中 $\delta_{i,i} = 1$, 且当 $i \neq k$ 时 $\delta_{i,k} = 0$, 称为单位矩阵.

当 $i > k$ 时方阵 R 的元素 $r_{i,k} = 0$, 称 R 为右(上)三角矩阵,

当 $i < k$ 时方阵 L 的元素 $l_{i,k} = 0$, 称 L 为左(下)三角矩阵.



一个 $n \times 1$ 矩阵 a 称为 n 维列向量. 一个 $1 \times m$ 矩阵 b^T 称为 m 维行向量. 一个 1×1 矩阵 c 称为标量.

元素均为零的矩阵 O , 称为零矩阵. 元素均为零的列向量 O 称为零列向量. O^T 称为零行向量.

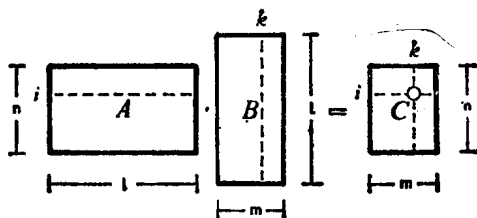
如果矩阵只有少数元素不为零, 则称该矩阵为稀疏的.

2.2 矩阵乘积

一个 $n \times l$ 矩阵 $A = [a_{i,j}]$ 与一个 $l \times m$ 矩阵 $B = [b_{j,k}]$ 的乘积 $A \cdot B$ 是一个 $n \times m$ 矩阵 $C = [c_{i,k}]$, 其中

$$c_{i,k} = \sum_{j=1}^l a_{i,j} b_{j,k}.$$

用块的形式它可直观地表示为:



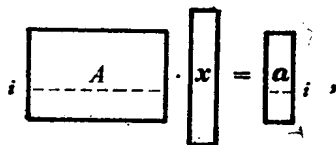
元素 $c_{i,k}$ 是 A 的第 i 行元素与 B 的第 k 列相应元素相乘的积, 简言之: i 行 $\times k$ 列.

如果一个方阵 A , 满足关系 $A^T A = E$, 则称为正交的, 更确切地说, 标准正交的.

例 1 在线性方程组 (1) 中, 右端 a_i 构成一个 $n \times 1$ 矩阵或 n 维列向量 $\mathbf{a}$. 同样, 诸 x_k 可写成一个 $m \times 1$ 矩阵 $\mathbf{x}$, 因此 (1) 具有十分简明的形式:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{a},$$

或用块表示:



由此立刻可以看出行和列的“长度”,