

数值分析基础

(第三版)

Fundamentals of Numerical Analysis

(Third Edition)

关 治 陆金甫

高等教育出版社

数值分析基础

(第三版)

Fundamentals of Numerical Analysis
(Third Edition)

关 治 陆金甫



高等教育出版社·北京

内容提要

本书着重介绍现代科学与工程计算中的有关数值方法, 强调数值分析的基本概念、理论及应用, 特别是数值方法在计算机上的实现, 理论叙述严谨精练, 概念交代明确, 方法描述清晰, 系统性较强。

全书内容包括: 线性代数方程组的直接解法和迭代解法, 非线性方程和方程组的数值解法, 矩阵特征值问题的数值方法, 函数的插值和逼近, 数值积分和数值微分, 常微分方程初值问题的数值解法等。

本书可作为理工科研究生数值分析、科学计算等课程的教材, 也可以作为相关专业本科生的教材, 还可供相关科研、技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

数值分析基础 / 关治, 陆金甫编. --3 版. -- 北京: 高等教育出版社, 2019.5

ISBN 978-7-04-051315-8

I. ①数… II. ①关… ②陆… III. ①数值计算-高等学校-教材 IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 024476 号

策划编辑 李冬莉 责任编辑 李冬莉 封面设计 李卫青 版式设计 马敬茹
插图绘制 于博 责任校对 陈杨 责任印制 田甜

出版发行	高等教育出版社	网 址	http://www.hep.edu.cn
社 址	北京市西城区德外大街 4 号		http://www.hep.com.cn
邮政编码	100120	网上订购	http://www.hepmall.com.cn
印 刷	人卫印务(北京)有限公司		http://www.hepmall.com
开 本	787mm×960mm 1/16		http://www.hepmall.cn
印 张	25.5	版 次	1998 年 5 月第 1 版
字 数	470 千字		2019 年 5 月第 3 版
购书热线	010-58581118	印 次	2019 年 5 月第 1 次印刷
咨询电话	400-810-0598	定 价	48.60 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题, 请到所购图书销售部门联系调换
版权所有 侵权必究
物 料 号 51315-00

第三版前言

本书第三版是第二版的修订版,全书的主要内容和结构都没有大的改变。修订中除了更正少量的错误外,主要是删减或简化了某些在一般理工科课程教学中可能较少触及的内容(例如超松弛法最优松弛因子的讨论),去掉了个别章节的内容(例如 B-样条函数,快速 Fourier(傅里叶)变换,线性差分方程等),一些章节也作了改写,有些较复杂的定理证明亦作了删减,只是注明了参考文献。因为各校的课程内容和学时不同,我们希望这样修订能更好地配合教学的需要。

借助于现代技术手段,本书每一章的部分习题答案或提示以二维码的形式放置在章末,供读者参阅。

本书此版是在李冬莉编辑的推动下完成的,对她认真仔细的工作,我们表示诚挚的感谢。祈望读者继续对本书提出宝贵的意见,这对本书的改进一定是很有意义的。

关 治 陆金甫

2018年4月

第二版前言

本书第一版按照当时的《应用数学专业数值分析课程基本要求》编写,出版后经我们和兄弟院校同行使用,有了一些教学的积累。这些年来,高等学校的专业设置和课程开设都有了很多调整和变动,数值分析课程更多为理工科各专业的研究生开设,我们也多年从事这方面的教学。为了更适应当前的情况,特别是针对一般理工科研究生“数值分析”或“科学与工程计算”一类课程的要求,我们对本书第一版进行了修订,以使新的一版更适合于这类课程使用。

修订后全书的主要内容仍然是数值分析学科的基本方法与理论,但是根据教学的需求做了一些调整,增加了一些常用的数值方法,删去了部分内容,很多章节也进行了改写。首先是各章次序的安排,把线性代数和非线性方程及方程组的数值方法放在全书的前半部分。根据我们的体会,这样的安排对教学有一定的好处。当然,本书也可以适合不同讲课次序的教师使用。其次,把原来分散的一些准备知识,特别是赋范线性空间、内积空间的一些基本概念以及它们在各种数值方法中的应用集中在第一章,加强了介绍。这些数学概念有利于用比较统一的观点对不同的近似问题中误差、收敛性等进行分析。同时也在第一章中也对以下各章用到的一些线性代数知识作了复习和进一步集中补充介绍,便于读者系统地学习,也和随后关于代数问题数值方法的各章有比较紧密的联系。

这次修订对第一版各章内容有所增删。作为数值线性代数的三个主要部分的前两者,即解方程组和特征值问题的传统内容和第一版同样得到重视,而第三部分即线性最小二乘问题则在第二版得到了加强,这在第七章中有所反映。此外还增加了 Padé 逼近、自适应求积分方法等内容,删去了稀疏矩阵有关方法的详细分析、矩阵的奇异值分解、函数最佳一致逼近的古典理论、插值和积分的 Peano 余项估计等在非数学专业课程中一般较少涉及的内容,关于 B-样条函数的内容也大大地简化了。我们希望内容增删后更适合一般理工科研究生的课程,同时也适当留有余地,对于不同要求和不同学时的课程,可以从中选择适当的章节使用。

只要具有一般理工科专业的高等数学(微积分和微分方程)和线性代数课程的基础就可以学习本书。针对读者这样的数学基础,在修订中除了数值方法的叙述力求清晰外,还注意理论分析更加严谨,必要的数学推导更加详细。各章的习题以数值方法的使用和分析为主,也适当地包括一些概念和性质的讨论。

在各章习题之后增设了计算实习题,我们推荐读者使用 MATLAB 上机计算。由于本书适用于比较基础的课程,一些通用的数值方法软件在本书中没有介绍,读者在使用时也容易找到有关的参考资料。

第二版所列的参考文献主要是修订时用到的参考资料。当然,第一版所列出的参考文献仍然是对本书有意义的资料。

本书的前五章由关治修订,后四章由陆金甫修订。我们衷心感谢同行和读者对本书第一版的关心和帮助,更希望国内的教师、学生和其他读者对本书提出宝贵的意见,你们的意见对本书进一步完善一定会有所帮助。最后我们还要特别提及出版社的张长虹和李陶编辑,他们认真和细致的工作使本书得以顺利出版,我们深表感谢。

关 治 陆金甫

2010年2月于清华园

第一版前言

随着计算机与计算数学的发展以及它们在各种科学技术问题中的广泛应用,数值分析已经成为高等学校理工科的一门重要课程,它是一门应用性很强的基础课程,包含数值分析学科最基础和最常用的部分。几十年来,国内外数值分析教材有很大的变化,除了内容的变化和发展外,也出现了一些适应不同对象的不同类型的教材,但目前在国内还较少见到应用数学专业本科生的适用教材,本书就是为此而编写的,同时也兼顾到理工科其他专业研究生同类课程的需要。

本书按照国家教委数学与力学教学指导委员会应用数学教材建设组制定的《应用数学专业数值分析课程基本要求》编写,个别内容有所增删,以适应其他理工科专业研究生课程的教学。我们体会这一基本要求的特点是重视基础理论,注意本学科的发展和教学内容的更新,同时强调应用,特别是重视数值方法在计算机上的实现。数值分析课是一门基础课,它像通常的数学课程那样有自身严密的科学系统,但它又是一门应用性很强的课程,希望使学生能够用本学科的知识在计算机上进行有关的科学与工程计算。计算能力的培养对理工科各专业的学生是十分重要的,对应用数学专业的学生更是如此。所以我们在教材的选材上适当减少了古典内容的篇幅,增加近代方法的介绍,也力图在理论叙述尽量严谨的同时注意对方法的分析,使算法描述尽量清晰,并配有适量的例题,便于学生理解方法和在计算机上实现方法的数值计算。

本书的主要内容是函数的插值和逼近,数值积分和微分,解线性代数方程组的直接方法和迭代方法,非线性方程和方程组的数值解法,矩阵特征值问题计算方法和常微分方程初值问题的数值解法。第一章引论除了介绍本学科的一些基本问题外,还为其他各章的一些基础知识做了准备。本书的初稿曾在清华大学校内使用,据我们的经验,60学时左右可以讲授本书的主要部分,估计75—80学时可以讲授本书的绝大部分。当然,使用本书的讲授次序不是固定不变的,大致地说,可以分为两条主要线索,即按照书上各章的自然顺序,或者是按照第一、五、六、七、八章及第二、三、四、九章的顺序讲授。书中有些内容单独安排成章、节,便于教师适应不同学时和要求选择使用,特别是带“*”号的节和段是供选择的。各章有一定数量的习题,其中一部分是有关方法的分析和理论方面的,另一部分则是数值计算的习题,可以手算,也可用计算器完成,还有一些要利用计

计算机计算,其中一些习题也带有“*”号。对于学习数值分析课程的学生来说,这两部分的练习都是重要的。

关 治 陆金甫

1994年11月

本书符号

\square	定理结束
\mathbb{R}	实数集合
\mathbb{C}	复数集合
\mathbb{R}^n	全体 n 维实向量组成的集合
\mathbb{C}^n	全体 n 维复向量组成的集合
$\mathbb{R}^{m \times n}$	全体 m 行 n 列实矩阵组成的集合
$\mathbb{C}^{m \times n}$	全体 m 行 n 列复矩阵组成的集合
$\text{span}\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\}$	由 $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ 张成的空间
$C[a, b]$	$[a, b]$ 上全体连续函数组成的集合
$C^n(\mathbb{R}), C^n$	\mathbb{R} 上全体 n 阶导数连续的函数组成的集合
$C^n[a, b]$	$[a, b]$ 上全体 n 阶导数连续的函数组成的集合
$\mathcal{P}_n[a, b]$	$[a, b]$ 上全体不超过 n 次的多项式函数组成的集合
$\text{sgn}(\cdot)$	符号函数
$\ \cdot\ $	范数
A^T	矩阵 A 的转置矩阵
A^H, A^*	矩阵 A 的共轭转置矩阵
$\sigma(A)$	矩阵 A 的谱
$\rho(A)$	矩阵 A 的谱半径
$\det A$	矩阵 A 的行列式
$\text{tr } A$	矩阵 A 的迹
$\text{cond}(A)$	矩阵 A 的条件数
$\text{diag}(a_1, a_2, \dots, a_n)$	对角元素为 a_1, a_2, \dots, a_n 的对角矩阵
$\dim(M)$	空间 M 的维数

目 录

第一章 引论	1
§ 1 数值分析的研究对象	1
§ 2 数值计算的误差	2
2.1 误差的来源与分类	2
2.2 绝对误差和相对误差、有效数字	3
2.3 求函数值和算术运算的误差估计	4
2.4 计算机的浮点数表示和舍入误差	5
§ 3 病态问题、数值稳定性与避免误差危害	8
3.1 病态问题与条件数	8
3.2 数值方法的稳定性	9
3.3 避免误差危害	11
§ 4 线性代数的一些基本概念	13
4.1 矩阵的特征值问题、相似变换化标准形	13
4.2 线性空间和内积空间	15
4.3 范数、赋范线性空间	19
§ 5 几种常见矩阵的性质	26
5.1 正交矩阵和酉矩阵	26
5.2 对称矩阵和对称正定矩阵	27
5.3 初等矩阵	27
5.4 可约矩阵	29
5.5 对角占优矩阵	31
习题	32
第一章部分习题参考答案或提示	34
第二章 线性代数方程组的直接解法	35
§ 1 Gauss 消去法	35
1.1 顺序消去与回代过程	36
1.2 顺序消去能够实现的条件	40
1.3 矩阵的三角分解	40
§ 2 选主元素的消去法	42
2.1 有换行步骤的消去法	42
2.2 矩阵三角分解定理的推广	43

2.3 选主元素的消去法	44
§ 3 直接三角分解方法	47
3.1 Doolittle 分解方法	47
3.2 对称矩阵的三角分解、Cholesky 方法	49
3.3 带状矩阵方程组的直接方法	53
§ 4 矩阵的条件数、直接方法的误差分析	59
4.1 扰动方程组与矩阵的条件数	59
4.2 病态方程组的解法	64
4.3 列主元素消去法的舍入误差分析	65
习题	66
计算实习题	69
第二章部分习题参考答案或提示	70
第三章 线性代数方程组的迭代解法	71
§ 1 迭代法的基本概念	71
1.1 向量序列和矩阵序列的极限	71
1.2 迭代公式的构造	74
1.3 迭代法收敛性分析	76
§ 2 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法	79
2.1 Jacobi 迭代法	80
2.2 Gauss-Seidel 迭代法	80
2.3 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法的收敛性	81
§ 3 超松弛迭代法	83
3.1 逐次超松弛迭代公式	83
3.2 SOR 迭代法的收敛性	84
3.3 最优松弛因子	85
3.4 对称超松弛迭代法	87
§ 4 共轭梯度法	88
4.1 与方程组等价的变分问题	88
4.2 最速下降法	90
4.3 共轭梯度法	90
4.4 预处理共轭梯度方法	95
习题	96
计算实习题	99
第三章部分习题参考答案或提示	100
第四章 非线性方程和方程组的数值解法	101

§ 1 区间对分法	101
§ 2 单个方程的不动点迭代法	103
2.1 不动点和不动点迭代法	103
2.2 迭代法在区间 $[a, b]$ 上的收敛性	105
2.3 局部收敛性与收敛阶	107
§ 3 迭代加速收敛的方法	109
3.1 Aitken 加速方法	109
3.2 Steffensen 迭代法	111
§ 4 Newton 迭代法和割线法	113
4.1 Newton 迭代法的计算公式	113
4.2 局部收敛性和全局收敛性	114
4.3 重根情形	115
4.4 割线法	117
§ 5 非线性方程组的不动点迭代法	119
5.1 向量值函数的连续性和导数	120
5.2 压缩映射和不动点迭代法	123
§ 6 非线性方程组的 Newton 迭代法和拟 Newton 迭代法	127
6.1 Newton 迭代法	127
6.2 拟 Newton 迭代法	129
习题	133
计算实习题	135
第四章部分习题参考答案或提示	136
第五章 矩阵特征值问题的数值方法	137
§ 1 特征值的估计和扰动	137
1.1 特征值的估计	137
1.2 特征值的扰动	140
§ 2 正交变换和矩阵因式分解	141
2.1 Householder 变换	142
2.2 Givens 变换	144
2.3 矩阵的 QR 因式分解	145
2.4 矩阵的 Schur 因式分解	151
§ 3 幂迭代法和逆幂迭代法	151
3.1 幂迭代法	151
3.2 加速技术	153
3.3 逆幂迭代法	154
3.4 收缩方法	156

§ 4 QR 方法	157
4.1 基本 QR 方法	158
4.2 正交相似变换化矩阵为上 Hessenberg 形式	159
4.3 Hessenberg 矩阵的 QR 方法	163
4.4 带有原点位移的 QR 方法	164
4.5 双重步 QR 方法	166
§ 5 对称矩阵特征值问题的计算	170
5.1 对称矩阵特征值问题的性质	170
5.2 Rayleigh 商迭代法	171
5.3 Jacobi 方法	172
5.4 对称矩阵的 QR 方法	177
习题	179
计算实习题	180
第五章部分习题参考答案或提示	181
第六章 插值法	182
§ 1 Lagrange 插值	182
1.1 Lagrange 插值多项式	182
1.2 插值余项及其估计	184
1.3 线性插值和二次插值	187
1.4 关于插值多项式的收敛性问题	189
§ 2 均差与 Newton 插值多项式	190
2.1 均差及其性质	191
2.2 Newton 插值多项式	193
2.3 差分及其性质	197
2.4 等距节点的 Newton 插值公式	199
§ 3 Hermite 插值	201
3.1 Hermite 插值多项式	201
3.2 重节点均差	204
3.3 Newton 形式的 Hermite 插值多项式	206
3.4 一般密切插值 (Hermite 插值)	208
§ 4 三次样条插值	209
4.1 分段线性插值及分段三次 Hermite 插值	209
4.2 三次样条插值函数	210
4.3 三次样条插值函数的计算方法	211
4.4 数值例子	214
4.5 三次样条插值函数的误差估计	215

习题	215
计算实习题	217
第六章部分习题参考答案或提示	218
第七章 函数逼近	219
§ 1 正交多项式	219
1.1 正交多项式的基本概念及性质	219
1.2 Legendre 多项式	224
1.3 Laguerre 多项式	226
1.4 Hermite 多项式	227
§ 2 Chebyshev 多项式	228
2.1 Chebyshev 多项式基本性质	228
2.2 极小化性质与 Chebyshev 多项式零点插值	230
§ 3 函数的最佳平方逼近	234
3.1 最佳平方逼近的概念及计算	234
3.2 用正交函数组作最佳平方逼近	238
3.3 用 Legendre 多项式作最佳平方逼近	241
§ 4 Padé 逼近	243
4.1 Padé 逼近	243
4.2 连分式	247
§ 5 数据拟合	248
5.1 最小二乘曲线拟合及其计算	249
5.2 多项式拟合	251
5.3 线性化方法	252
5.4 用正交多项式作最小二乘曲线拟合	256
5.5 非多项式拟合	257
§ 6 线性最小二乘问题的解法	259
6.1 线性最小二乘问题	260
6.2 QR 分解	262
6.3 用 QR 分解求解线性最小二乘问题	264
§ 7 周期函数的最佳平方逼近	265
7.1 周期函数的最佳平方逼近	265
7.2 离散情形	266
7.3 周期复值函数	267
习题	268
计算实习题	269
第七章部分习题参考答案或提示	270

第八章 数值积分与数值微分	271
§ 1 数值积分的基本概念	272
1.1 代数精度	272
1.2 插值型求积公式	273
§ 2 Newton-Cotes 求积公式	274
2.1 梯形公式和 Simpson 求积公式	274
2.2 Newton-Cotes 求积公式	278
2.3 Newton-Cotes 求积公式的误差分析	280
2.4 开(型)Newton-Cotes 求积公式	281
2.5 Newton-Cotes 求积公式的数值稳定性	284
§ 3 复合求积公式	285
3.1 复合梯形求积公式	285
3.2 复合 Simpson 求积公式	286
3.3 带有导数值的求积公式及其复合公式	288
§ 4 Gauss 求积公式	290
4.1 Gauss 求积公式	291
4.2 Gauss 求积方法的收敛性和稳定性	298
4.3 Gauss-Legendre 求积公式	300
4.4 Gauss-Chebyshev 求积公式	304
4.5 Gauss-Laguerre 求积公式	305
4.6 Gauss-Hermite 求积公式	306
§ 5 Romberg 求积方法	307
5.1 Euler-Maclaurin 求和公式	307
5.2 Richardson 外推方法	309
5.3 Romberg 求积方法	311
§ 6 自适应 Simpson 求积方法	313
§ 7 奇异积分的数值计算	317
7.1 区间截断	318
7.2 变量替换	319
7.3 Kontorovich 奇点分离法	319
§ 8 数值微分	321
8.1 数值微分公式	322
8.2 数值微分的外推算法	326
习题	327
计算实习题	329
第八章部分习题参考答案或提示	329

第九章 常微分方程初值问题的数值解法	330
§ 1 常微分方程初值问题	330
§ 2 Euler 方法	331
2.1 显式 Euler 方法	331
2.2 隐式 Euler 方法	333
2.3 梯形方法及改进的 Euler 方法	334
§ 3 显式单步法	337
3.1 截断误差	337
3.2 相容性	339
3.3 收敛性	340
3.4 关于初值的稳定性	343
3.5 绝对稳定性	344
§ 4 Runge-Kutta 方法	346
4.1 用 Taylor 展开构造高阶数值方法	346
4.2 显式 Runge-Kutta 方法	347
4.3 显式 Runge-Kutta 方法的性质	353
4.4 高阶方法与隐式 Runge-Kutta 方法	354
4.5 变步长的 Runge-Kutta 方法	356
§ 5 线性多步法	359
5.1 一般形式的线性多步法	359
5.2 基于数值积分的方法	361
5.3 Adams 方法	363
5.4 预估校正方法	367
§ 6 线性多步法的相容性、收敛性及稳定性	369
6.1 相容性及方法的阶	369
6.2 收敛性	371
6.3 稳定性	372
6.4 绝对稳定性	373
§ 7 一阶方程组	377
7.1 一阶方程组	377
7.2 高阶微分方程的初值问题	380
7.3 刚性微分方程组	381
习题	384
计算实习题	386
第九章部分习题参考答案或提示	386
参考文献	387

第一章 引 论

§ 1 数值分析的研究对象

数值分析是科学与工程计算的数学,它研究各种科学与工程中求解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等问题.所以数值分析这门数学学科现在也常常被称为科学与工程计算.

很多数学问题往往难以简明准确地表示出其解,例如某些微分方程不能用初等函数表示出准确解,人们就用数值方法来近似求解.有些问题的准确计算方法也常常难以得到结果,例如用按行展开的方法(Laplace 定理)求高阶行列式的值需要极其大量的运算,所以用 Cramer 法则解高阶线性代数方程组是不现实的.这样便需要寻求能够实际使用的数值方法.在我国古代就有圆周率计算和解线性代数方程组的消去法等数值方法的研究.当微积分出现以后,就有了数值微积分和解常微分方程等各种数值方法.但是数值计算开始真正迅速发展是在 20 世纪中叶,随着计算机和相关技术的发展,数值计算的应用已经深入到自然科学、工程技术和经济等领域,它自身的发展也是十分迅速的.现在,很多复杂的和大规模的计算问题都可以在计算机上进行计算,新的、更有效的计算方法不断出现.科学与工程计算已经成为自然科学、工程技术和经济等领域中的一种科学计算方法和重要手段.所以,数值分析和其他学科有十分紧密的联系,它是一门基础性的,也是一门应用性很强的数学学科.

在计算机上求解一个科学技术问题大致有几个步骤:首先是数学建模,再针对该模型选择或设计数值求解的方法,然后在计算机上计算(包括使用各种软件),将计算结果用数据、图表等表现出来加以分析,有时还要进行反复的计算.数值分析主要是针对这个过程的第二步.由于大量的问题要求解计算,所以要对各种方法进行研究和分析,这主要包括:误差、稳定性、收敛性、计算工作量、存储量和自适应性等方面.这些基本的概念用于描述数值方法的适用范围、可靠性、准确性、效率和使用的方便性等.

在实际的科学科学与工程计算中,所计算的问题往往是大型、复杂和综合的.但是有一些最基础、最常用的数值方法,它们不仅可以直接用于实际计算,同时也