



新编 21 世纪高等院校计算机系列规划教材

算法语言与 计算方法基础

北京希望电子出版社 总策划

刘水强 主 编

牛莉 陈继业 副主编

谢文平 肖调云 陈大钊 编 著

 科学出版社
www.sciencep.com



算法语言



计算方法基础

作者：[作者姓名]

出版社：[出版社名称]





新编 21 世纪高等院校计算机系列规划教材

算法语言与 计算方法基础

北京希望电子出版社 总策划

刘水强 主 编

牛莉 陈继业 副主编

谢文平 肖调云 陈大钊 编 著

 科学出版社
www.sciencep.com

内 容 简 介

本书面向计算机讲计算方法,是一本集算法、程序设计和数学模型实例于一体的新型教材,学生通过该门课程的学习能够真正做到学以致用。全书共7章,每章的内容相对独立自成体系,主要内容包括:数值算法概论,线性方程组的数值解法,非线性方程及非线性方程组的解法,插值法与数据拟合法,数值微积分,常微分方程的数值解法及偏微分方程的数值解法等。从第2章开始的每一章均有与本章内容相关的程序设计与数学建模实例,在附录中还给出了习题的参考答案。

本书选材合理,简明实用,讲解深入浅出,可作为大学理工科学生的教材,也可作为大专院校学生的参考书。

需要本书或技术支持的读者,请与北京中关村 083 信箱(邮编 100080)发行部联系,电话:010-82702660 010-82702658 010-62978181 转 103,传真:010-82702698, E-mail: tbd@bhp.com.cn。

图书在版编目(CIP)数据

算法语言与计算方法基础 / 刘水强主编. —北京: 科学出版社, 2005.4

新编 21 世纪高等院校计算机系列规划教材

ISBN 7-03-015303-0

I. 算... II. 刘... III. ①算法语言—程序设计—高等学校—教材②电子计算机—计算方法—高等学校—教材
IV. ①TP312②TP301.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 026892 号

责任编辑: 王超辉 / 责任校对: 王春桥
责任印刷: 媛 明 / 封面设计: 梁运丽

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>

北京市媛明印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2005 年 4 月第 一 版 开本: 787×1092 1/16

2005 年 4 月第一次印刷 印张: 15 1/2

印数: 1—4 000 字数: 360 千字

定价: 24.00 元

新编 21 世纪高等院校计算机系列规划教材编委会

主 任： 陈火旺 全国工科院校计算机专业教学指导委员会主任
中国工程院院士

副主任： 李国杰 中国计算机学会理事长
中科院计算技术研究所所长

王 珊 中国计算机学会副理事长
中国人民大学信息学院学术委员会主任

杨芙清 中国计算机学会副理事长
中国科学院院士

沈复兴 全国高等师范学校计算机教育研究会副理事长
北京师范大学信息科学学院院长

何炎祥 武汉大学计算机学院院长

桂卫华 中南大学信息科学与工程学院院长

李仁发 湖南大学计算机与通信学院院长

陆卫民 中国科学出版集团北京希望电子出版社社长

委 员： （按姓氏笔画为序）

于 戈	王世卿	王志英	王清贤	刘水强	刘先省	成礼智
吴建国	张 钢	张德贤	李节阳	李晓明	杨 波	杨宗源
肖建华	陈立潮	陈志刚	周立柱	周学毛	孟祥旭	郑明红
金 海	赵 欢	高守平	谢长生	韩国强		

秘 书： 李节阳

总 序

一本好书，是人生前进的阶梯；一套好教材，就是教学成功的保证。为满足培养应用型人才的需要，我们成立了本编委会。在明确高等院校应用型人才培养模式、培养目标、教学内容和课程体系的框架下，我们组织编写了本套规划教材。

为了使本套教材能够达成目标，编委会做了大量的前期调研工作，在广泛了解各高等院校的教学现状、学生水平、培养目标的情况下，认真探讨了课程设置，研究了课程体系。为了编写出符合教学需求的好教材，我们除了聘请一批计算机知名专家、教授作为本套教材的主审和编委外，还组织了一批具备较高的学术水平、丰富的教学经验、较强的工程实践能力的学术带头人和骨干教师来承担具体编写工作，从而编写出特色鲜明、适用性强的教材，以真正满足目前高等院校应用型人才培养的需要。教材编写采用整体规划、分步实施、在实践中检验提高的方式，分期分批地启动编写计划。编写大纲以及教材编写方式的确定均经过编委会多次认真讨论，以确保该套教材的高质量和实用性。

本套规划教材的主要特点是：

(1) 以服务教学为最高宗旨，认真做好教学内容的取舍、教学方法的选取、教学成果的检验工作。本套教材在教学过程中的有益反馈，都将及时体现在后续版本。

(2) 面向应用型高等院校，在保证学科体系完整的基础上把握好理论的深度和难度。注重理论知识与实践相结合，使学生通过实践深化对理论的理解，学会并掌握理论方法的实际运用。从而较好地培养学生的专业技能和实施工程的实用技术能力。

(3) 教材在内容编排上，力求由浅入深，循序渐进；举一反三，突出重点；语言简练，通俗易懂。采用模块化结构，兼顾不同层次的需求，在具体授课时可根据具体教学计划适当取舍内容。

(4) 教材采用“任务驱动”的编写方式，以实际问题引出相关原理和概念，在讲述实例的过程中将本章的知识点融入，通过分析归纳，介绍解决工程实际问题的思想和方法，同时，引入案例教学和启发式教学方法，便于激发学习兴趣。

(5) 在教材中加大实训部分的比重，使学生能比较熟练地应用计算机知识和技术解决实际问题，既注重培养学生分析问题的能力，也注重培养学生解决问题的能力。

(6) 大部分教材配有电子教案，从而更好地服务教学。

为编写本套教材，作者们付出了艰辛的劳动，编委会的各位专家进行了悉心的指导和认真的审定。书中参考、借鉴了国内外同类的优秀教材和专著，在此一并表示感谢。

我们衷心希望更多的优秀教师参与到教材建设中来，真诚希望广大教师、学生与读者朋友在使用本丛书过程中提出宝贵意见和建议。

若有投稿或建议，请发电子邮件到 textbook@bhp.com.cn。谢谢！

新编 21 世纪高等院校计算机系列规划教材编委会

推荐序

随着数字化时代的到来,数学与信息科学的交叉使得信息与计算科学成为国际热门的学科与专业,其中,其核心课程《计算方法学》在计算机、控制工程、信息与通信工程等诸多领域得到广泛应用,并成为上述学科的重点课程之一。但是,另一方面,其相应的教材建设相对滞后。以刘水强教授为课题负责人撰写的《算法语言与计算方法基础》一书将数学中的计算方法与目前在计算机编程中广泛应用的C语言相结合,在“少而精”以及“理论联系实际”原则的指导下,拟出版的新教材极大弥补了现有计算方法教材内容相对的不足。该教材具有如下鲜明特色:

1. 数值计算理论与算法设计过程有机连接,是一种“面向计算机”的数值算法设计学的尝试,使学生通过该门课程的学习真正做到学以致用,这样读者既掌握了计算数学方法,同时也学会了利用C语言设计程序的能力。
2. 选材合理。教材选取了计算数学中常见的数值算法进行描述,其内容涵盖线性与非线性方程(组)求解、插值与数据拟合、数值积分与数值微分、常微分方程数值解以及有限元基本方法等有关知识。上述内容对于从事数学应用的科技与工程技术人员都是必需的。
3. 简明实用。书中所描述的算法设计原理容易理解,而建议采用的算法设计技术也不难掌握。作为计算机科学重要基础的数值算法设计学,其设计思想的简朴、设计方法的协调、设计技术的实用,体现了该学科内在的科学美。

总之,该书的出版必将对数学、应用数学、信息与计算科学以及相关工程类学科的教材建设起到极大的推动作用,郑重推荐该书在具有一定影响的出版社公开出版。

中国国防科学技术大学博士生导师

戚礼亭

前 言

随着科学技术的高速发展,现代社会的经济、工程技术等各领域存在大量复杂的科学计算问题,要完成这些人自身所不能及的工作,必须借助于计算机,而使计算机有效解决科学计算问题的关键技术是计算方法和算法语言,但是相应的教材建设相对滞后。为此,我们编写了这本《算法语言与计算方法基础》来弥补现有计算方法教材内容相对滞后的缺陷。

计算方法与算法语言包含十分丰富的内容,但是作为一门基础课教材,不可能也不必要面面俱到,重要的是使读者通过一些典型、通用的计算方法掌握其方法构造的基本思想及其实现技巧,同时通过实例在计算机上编程运行,从而达到触类旁通的功效。在计算方法的基本概念及其基本理论方面,我们力求其严谨性、实用性,使读者通读完本书后具备一定的算法理论分析能力和实际运算能力。本书有3个重要特点,一是面向计算机讲计算方法,数值计算理论与算法设计过程有机连接。二是每章的内容相对独立、自成体系;教师在教学过程中可根据不同学科和层次的专业需要,灵活选择各章节内容的学习。这样使得本书既可以适合广大理工类学生作为基础课程的需要,也可以作为计算科学类专业学生基础课程的教材。三是从第2章起每章均有实例运行程序和数学建模实例,这些实例均可在计算机上运行出相应的结果,这样让读者在上机实验方面可以有立竿见影的功效。

全书共7章,其中全书的编写提纲和第1章由刘水强编写,肖调云同志编写了第2章,牛莉同志编写了第3章,谢文平同志编写了第4章,陈继业同志编写了第5章和第7章,陈大钊同志编写了第6章,最后由刘水强、陈继业、牛莉、谢文平四位同志进行了统稿和校稿等工作。

本书的编写过程中得到了中国国防科学技术大学博士生导师成礼智教授的指导,他在百忙中抽出时间通读了本书,并为本书作序。本书的编写出版及发行得到了许多领导和同志的大力支持与鼓励,他们提出了大量宝贵的建议,编者对此深表感谢。

由于编者水平有限,书中必有疏漏或不妥之处,诚望读者指正。

编 者

目 录

第1章 绪论.....	1	3.2.2 二分法计算步骤及其 传统流程图.....	50
1.1 数值算法概论.....	1	3.3 迭代法.....	52
1.2 预备知识.....	4	3.3.1 迭代法的基本思想.....	52
1.2.1 范数.....	4	3.3.2 迭代法的几何意义及收敛性.....	53
1.2.2 差分方程.....	7	3.3.3 迭代法的收敛速度.....	55
1.3 误差分析.....	9	3.3.4 迭代法收敛的加速方法.....	56
1.3.1 误差的来源.....	9	3.3.5 迭代法的计算步骤及其 N-S 流程图.....	57
1.3.2 误差、误差限和有效数字.....	10	3.4 牛顿(Newton)法.....	58
1.3.3 相对误差和相对误差限.....	11	3.4.1 牛顿法的基本思想.....	58
1.3.4 有效数字与误差的关系.....	12	3.4.2 牛顿法的几何意义.....	59
1.3.5 数值计算中需要注意的问题.....	13	3.4.3 牛顿法的收敛性.....	60
本章小结.....	15	3.4.4 牛顿法的计算步骤及其 N-S 流程图.....	62
习题.....	15	3.5 非线性方程组的解法.....	63
第2章 线性方程组的数值解法.....	17	3.6 解非线性方程组的牛顿迭代法.....	63
2.1 高斯列主元消去法.....	17	3.7 最速下降法.....	65
2.1.1 高斯消去法.....	17	3.8 本章部分算法 C 语言参考程序.....	68
2.1.2 高斯列主元消去法.....	18	3.8.1 二分法参考程序.....	68
2.2 对称正定矩阵的平方根法.....	21	3.8.2 迭代法参考程序.....	69
2.2.1 矩阵的三角分解.....	21	3.8.3 牛顿法参考程序.....	70
2.2.2 对称正定矩阵的平方根法.....	27	3.9 应用举例.....	72
2.3 三对角线性方程组的追赶法.....	31	本章小结.....	75
2.4 线性方程组的迭代解法.....	33	习题.....	75
2.4.1 雅可比迭代法.....	33	第4章 插值法与数据拟合法.....	76
2.4.2 高斯-塞德尔迭代法.....	35	4.1 引言.....	76
2.4.3 超松弛迭代法.....	36	4.2 代数插值的基本性质.....	77
2.5 误差分析.....	38	4.3 泰勒插值和拉格朗日(Lagrange)插值.....	78
2.6 算法与程序设计实例.....	40	4.3.1 泰勒插值.....	78
2.6.1 列主元高斯消去法解方程组.....	40	4.3.2 拉格朗日插值.....	80
2.6.2 用雅可比迭代法解方程组.....	43	4.4 牛顿(Newton)插值公式.....	85
本章小结.....	45	4.4.1 差商及其基本性质.....	85
习题.....	45	4.4.2 牛顿插值多项式.....	86
第3章 非线性方程及非线性方程组的解法.....	47	4.4.3 牛顿插值的算法.....	87
3.1 概述.....	47	4.4.4 等距节点的牛顿插值公式.....	89
3.2 二分法.....	48		
3.2.1 二分法的基本思想.....	48		

4.5 分段低次插值	90	5.1.3 李查逊(Richardson)	
4.5.1 分段线性插值	91	外推方法	132
4.5.2 分段二次插值	91	5.2 数值求积公式的一般形式及其	
4.5.3 分段三次埃尔米特插值	93	代数精度	135
4.6 三次样条插值	95	5.2.1 数值积分公式的一般形式	135
4.6.1 三次样条函数的定义	95	5.2.2 求积公式的代数精度	136
4.6.2 三次样条插值问题	96	5.3 牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)	
4.6.3 求样条插值函数的三转角法	97	求积公式	137
4.6.4 求样条插值函数的三弯矩法	100	5.3.1 插值型求积公式	137
4.6.5 余项估计及收敛性、稳定性	101	5.3.2 牛顿-柯特斯公式	139
4.7 曲线拟合的最小二乘法	102	5.3.3 诸公式的截断误差及其	
4.7.1 曲线拟合的最小二乘法	102	代数精度分析	141
4.7.2 超定方程组的最小二乘解	103	5.4 复化求积公式	143
4.7.3 代数多项式拟合	104	5.5 变步长求积公式	145
* 4.8 三角函数插值与快速富利叶变换	107	5.6 龙贝格(Romberg)求积法	147
4.8.1 最佳平方三角逼近与		5.7 高斯-勒让得(Gauss-Legendre)	
三角插值	107	求积公式	149
4.8.2 快速富氏变换(FFT)	109	5.7.1 高斯-勒让得求积公式概述	149
4.9 应用实例: 用样条函数设计公路		5.7.2 正交多项式	152
平面曲线	112	5.7.3 区间 $[-1, 1]$ 与区间 $[a, b]$ 上	
4.9.1 问题的背景	112	的 Gauss 公式	154
4.9.2 数学模型	113	5.8 Gauss 型求积公式简介	156
4.9.3 计算方法与结果分析	113	5.8.1 概述	156
4.10 上机程序参考实例	115	5.8.2 几种常见的高斯型求积公式	157
4.10.1 拉格朗日插值算法		5.9 应用实例: 混频器中变频损耗的	
程序实例	115	数值计算	159
4.10.2 牛顿插值算法程序实例	116	5.9.1 问题的背景	159
4.10.3 分段抛物插值算法		5.9.2 数学模型	160
程序实例	117	5.9.3 计算方法和结果分析	161
4.10.4 三次样条插值的三转角算法		5.10 上机程序参考实例	162
程序实例	118	5.10.1 牛顿-柯特斯梯形公式	162
4.10.5 曲线拟合的最小二乘算法		5.10.2 高斯-勒让得法	165
程序实例	124	5.10.3 龙贝格法	168
本章小结	125	5.10.4 高斯-埃尔米特法	172
习题	125	本章小结	176
第 5 章 数值微积分	128	习题	176
5.1 数值微分	128	第 6 章 常微分方程的数值解法	178
5.1.1 两点数值微分公式	129	6.1 概述	178
5.1.2 三点数值微分公式	130	6.2 Euler 方法	179

6.2.1 Euler 方法	179
6.2.2 隐式 Euler 方法和梯形方法	182
6.2.3 改进的 Euler 方法	183
6.2.4 Taylor 展开法	185
6.2.5 数值问题的截断误差与阶	185
6.3 Runge-Kutta 方法	187
6.3.1 二阶 Runge-Kutta 方法	187
6.3.2 四阶标准 Runge-Kutta 方法	189
6.3.3 其他常用 Runge-Kutta 方法	192
6.4 单步法的收敛性和稳定性	193
6.4.1 单步法收敛性	193
6.4.2 单步法的稳定性	194
6.5 一阶方程组与高阶方程	196
6.5.1 一阶方程组	196
6.5.2 高阶方程	198
6.6 边值问题的差分解法	199
6.6.1 线性方程边值问题的 差分格式	199
6.6.2 其他边界条件的讨论	201
6.6.3 非线性方程边值问题	202
6.7 应用实例: 磁流体发电通道的 数值计算	202
6.7.1 问题的背景	202
6.7.2 数学模型	203
6.7.3 计算方法与结果分析	204

6.8 上机程序参考实例	205
6.8.1 Euler 方法 (Euler 折线法)	205
6.8.2 改进的 Euler 方法	207
6.8.3 四阶标准 Runge-Kutta 方法	208
本章小结	210
习题	210
第 7 章 偏微分方程数值解法简介	212
7.1 椭圆型方程的差分解法	212
7.1.1 差分格式的构成	212
7.1.2 差分方程解的存在惟一性	215
7.1.3 收敛性与误差估计	218
7.1.4 一般二阶椭圆型方程第三边 值问题的差分格式	219
7.2 有限元方法	220
7.2.1 变分原理	220
7.2.2 区域剖分	223
7.2.3 面单元分析	224
7.2.4 线单元分析	228
7.2.5 总体合成与基本方程组	228
本章小结	233
习题	233
附录 习题参考答案	234
参考文献	239

第1章 绪 论

在科学技术高度发展的现代社会, 计算机技术的应用已渗透到社会生活的各个领域. 而数值计算是计算机处理实际问题的一种重要方法, 从工程系统到非工程系统, 从宏观天体运动学到微观分子细胞学说, 无一能离开数值计算. 数值计算这门学科的诞生, 使科学发展产生了巨大的飞跃, 它使各科学领域从定性分析阶段走向定量分析阶段, 从粗糙走向精密. 对理工类大学生和每一位从事科学研究与应用的人来说, 数值计算方法是不可缺少的知识. 本章主要介绍数值算法的基本思想、预备知识及误差分析.

1.1 数值算法概论

一个实际问题用计算机来求解时, 主要分下面几个步骤:

实际问题 → 建立数学模型 → 构造数值算法 → 编程上机 → 获取近似结果

实际上, 数值算法是利用计算机求解数学问题的近似解的方法, 所获近似解也称为原问题的数值解或逼近解. 构造一个数值算法时, 既要面向数学模型, 使算法能尽可能地仿真问题的模型; 同时, 也要面向计算机及其程序设计, 要求算法具有递推性、简洁性及必要的准确性, 使其能借助于计算机最终在尽可能短的时间内获得符合原问题要求精度的数值解.

例 1.1 计算积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx \quad (n=0,1,2,\dots,20)$$

解 通过直接计算可产生递推关系

$$I_n = -5I_{n-1} + \frac{1}{n}, I_0 = \ln \frac{6}{5} \approx 0.182322 \quad (1.1.1)$$

且由经典微积分知识可推得 I_n 具有如下性质:

- (1) $I_n > 0$.
- (2) I_n 单调递减.
- (3) $\lim_{n \rightarrow \infty} I_n = 0$.
- (4) $\frac{1}{6n} < I_n < \frac{1}{5n} (n > 1)$.

现在用两种算法来计算 I_n .

算法一:

按公式 (1.1.1) 自 $n=1$ 计算到 $n=20$, 产生如下计算结果 (见表 1.1).

表 1.1 例 1.1 算法一的计算结果

n	I_n	n	I_n
1	0.0883922	11	0.0173247
2	0.0580389	12	-0.00329022
3	0.0431387	13	-0.0933742
4	0.0343063	14	-0.395442
5	0.0284686	15	2.04388
6	0.0243239	16	-10.1569
7	0.0212378	17	50.8433
8	0.0188109	18	-254.161
9	0.0170566	19	1270.86
10	0.0147169	20	-6354.23

从表中可以看出, 该算法产生的数值解自 $n=12$ 开始出现负值且其绝对值逐渐增加, 这显然与 I_n 的固有性质相矛盾, 因此本算法所得的数值解不符合原问题的要求. 究其原因, 在构造算法时未能充分考虑原积分模型的性态, 即由公式 (1.1.1), 其计算从 I_{n-1} 到 I_n 每向前推进一步, 其计算值的舍入误差便增长 5 倍, 误差由此积累传播导致最终数值解与原问题真解相悖. 为克服这一缺陷, 改进算法一为算法二.

算法二:

第 1 步, 由性质 (4), 取

$$I_{20} \approx \frac{1}{6 \times 21} + \frac{1}{5 \times 21} = 0.00873016$$

第 2 步, 用递推公式

$$I_{n-1} = -\frac{I_n}{5} + \frac{1}{5n} \quad (1.1.2)$$

按公式 (1.1.2) 自 $n=20$ 计算到 $n=1$, 由于该算法每向后推进一步, 其计算值的舍入误差便减少 5 倍, 因此获得符合原积分模型性态的数值结果 (见表 1.2).

表 1.2 例 1.1 算法二的计算结果

n	I_n	n	I_n
19	0.00825397	9	0.0169265
18	0.00887552	8	0.0188369
17	0.00933601	7	0.0212326
16	0.00989750	6	0.0243250
15	0.0105205	5	0.0284684

(续表)

n	I_n	n	I_n
14	0.0112292	4	0.0343063
13	0.0120389	3	0.0431387
12	0.0129766	2	0.0580389
11	0.0140713	1	0.0883922
10	0.0153676	0	0.182322

对上述例子,采用的是由原模型精确解的递推关系来实现计算机求解的,这种数值求解方法称为直接法,即将连续系统离散化,这种求解方法称为离散变量法。在后续章节中将要学习的代数方程(组)的迭代法,微分方程(组)的数值积分法及差分法等均属这类方法。

考察结构力学、热传导问题中经常出现的数学定解问题——两点边值问题:

$$\begin{aligned} y'' + p(x)y' + q(x)y &= f(x), x \in (a, b) \\ y(a) &= \alpha, y(b) = \beta \end{aligned} \quad (1.1.3)$$

的数值解法,其中 $p(x), q(x)$ 及 $f(x)$ 是 $[a, b]$ 上的给定函数, α, β 为已知常数,且设问题(1.1.3)在 $[a, b]$ 上恒有惟一解 $y(x)$, 其解法步骤如下:

(1) 将区间 $[a, b]$ 离散化,即将 $[a, b]$ N 等分,所得节点为:

$$x_i = a + ih \quad (i = 0, 1, 2, \dots, N; x_0 = a, x_N = b)$$

其中, $h = \frac{b-a}{N}$ 称为方法的步长。

(2) 将问题(1.1.3)离散化,由于

$$\begin{aligned} \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}))}{2h} &= y'(x_i) + O(h^2) \\ \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}))}{h^2} &= y''(x_i) + O(h^2) \end{aligned}$$

故可略去上两式中的余项 $O(h^2)$, 并取 $y_i \approx y(x_i)$, 即得

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \quad (\text{一阶中心差商}) \quad (1.1.4)$$

$$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \quad (\text{二阶中心差商}) \quad (1.1.5)$$

将(1.1.4)、(1.1.5)代入(1.1.3)中得差分格式

$$\begin{cases} \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + p_i \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + q_i y_i = f_i (i = 1, 2, \dots, N-1) \\ (y_0 = \alpha, y_N = \beta) \end{cases} \quad (1.1.6)$$

其中, $p_i = p(x_i)$, $q_i = q(x_i)$, $f_i = f(x_i)$. (1.1.6) 实质是含 $N-1$ 个未知数 $y_1, y_2, \dots, y_{N-1}$ 的线性方程组, 由此可解得数值解 $y_1, y_2, \dots, y_{N-1}$.

1.2 预备知识

在后续章节的算法理论的学习中, 将考虑到多种问题的解的误差估计、稳定性及收敛性等, 为此必须学习一些相关的基础知识.

1.2.1 范数

定义 1.1 在 n 维实空间 R^n 上的一个非负函数 $\|\cdot\|$, 若满足下列条件:

- (1) $\|x\| \geq 0$ 当且仅当 $x = 0, \|x\| = 0, x \in R^n$.
- (2) $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|, \forall \alpha \in R, \forall x \in R^n$.
- (3) $\|x - y\| \leq \|x\| + \|y\|, \forall x, y \in R^n$, 则称 $\|\cdot\|$ 为 R^n 上的范数.

对一维实空间 R , $\|x\|$ 即为绝对值 $|x|$.

空间 $e^p (p = 1, 2, \dots)$ 的范数:

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}},$$

其中 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in R^n$. 特别地, e^∞ 范数即为

$$\|x\|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \|x\|_p = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|.$$

对于 R^n 上的任意两种范数有如下等价性定理:

定理 1.1 若 $\|\cdot\|$ 与 $\|\cdot\|'$ 为 R^n 上的任意两种范数, 则存在正常数 $c_2 \geq c_1$, 使得

$$c_1 \|x\| \leq \|x\|' \leq c_2 \|x\|, \forall x \in R^n.$$

在范数概念下, 即可讨论向量序列的收敛性问题.

定义 1.2 设有向量序列 $\{x^{(k)} \in R^n \mid x^{(k)} = (x_1^k, x_2^k, \dots, x_n^k)^T\}$,

若 $\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i (i = 1, 2, \dots, n)$

则称序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于向量 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$.

定理 1.2 在空间 R^n 中, 序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于向量 x 的充要条件是存在范数 $\|\cdot\|$, 使得

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x\| = 0.$$

证 由于序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于向量 x , 则

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x\|_\infty = 0;$$

若存在范数 $\|\cdot\|$, 使得 $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x\| = 0$,

则由定理 1.1, 存在常数 $c_2 \geq c_1 > 0$, 使得

$$c_1 \|x^{(k)} - x\| \leq \|x^{(k)} - x\|_\infty \leq c_2 \|x^{(k)} - x\|.$$

因此由两边夹定理知 $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x\|_{\infty} = 0$, 故 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于向量 x .

定义 1.3 设 A 为 n 级方阵, $\|\cdot\|$ 为 R^n 中的某范数, 则称

$$\max_{\|x\|=1} \|Ax\| \quad (x \in R^n)$$

为矩阵 A 的从属于该向量范数的范数, 记为 $\|A\|$.

利用定义 1.3 可直接推得矩阵范数具有如下性质:

- (1) 对任意 n 级方阵 A , 有 $\|A\| \geq 0$; 且 $\|A\| = 0$ 当且仅当 $A = 0$.
- (2) 对任意实数 k 及任意 n 级方阵 A , 有 $\|kA\| = |k|\|A\|$.
- (3) 对任意两个 n 级方阵 A, B , 有 $\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|, \|AB\| \leq \|A\|\|B\|$.
- (4) 对 $x \in R^n$ 及任意 n 级方阵 A , 有 $\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|$.

由矩阵范数的定义及性质可知, 矩阵范数与向量范数之间存在着一定的对应关系, 特别地, 性质 (4) 称为二者之间的相容性.

定理 1.3 设有 n 级方阵 $A = (a_{ij})$, 则与 $\ell_1, \ell_2, \ell_{\infty}$ 范数相容的矩阵范数分别为:

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad (1.2.1)$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)} \quad (1.2.2)$$

$$\|A\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad (1.2.3)$$

其中, $\rho(\cdot)$ 为相应矩阵的谱半径, 其满足

$$\rho(B) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i^B|$$

λ_i^B 为方阵 B 的特征值.

证 此处仅证(1.2.2), 其余两式类似可证.

由于 $A^T A$ 为对称非负定阵, 则其特征值 $\lambda_i (i=1, 2, \dots, n)$ 非负, 且存在 n 维正交方阵 H , 使得

$$A^T A = H^T \text{diag}(\lambda_i) H$$

其中

$$\text{diag}(\lambda_i) = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_n \end{bmatrix}$$

$\forall x \in \{x \mid \|x\|_2 = 1\}$, 若记 $Y = Hx = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$, 则有

$$\|y\|_2^2 = x^T H^T H x = \|x\|_2^2 = 1$$

$$\text{及 } \|Ax\|_2^2 = x^T A^T A x = (Hx)^T \text{diag}(\lambda_i)(Hx) = \sum_{i=1}^n \lambda y_i^2 \leq (\max_{1 \leq i \leq n} \lambda_i) \|y\|_2^2.$$

$$\text{从而 } \|Ax\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}.$$

另一方面, 若 $\rho(A^T A)$ 对应矩阵 $A^T A$ 的单位特征向量为 $\tilde{x}$, 则

$$\|A\|_2^2 \geq \|A\tilde{x}\|_2^2 = \tilde{x}^T A^T A \tilde{x} = \tilde{x}^T \rho(A^T A) \tilde{x} = \rho(A^T A) \|\tilde{x}\|_2^2 = \rho(A^T A),$$

即 $\|A\|_2 \geq \sqrt{\rho(A^T A)}$, 即(1.2.2)得证.

定理 1.4 设 A 为任意 n 级方阵, 则对任意正阵范数 $\|\cdot\|$, 有

$$\rho(A) \leq \|A\|.$$

证 设 λ 为矩阵 A 的任一特征值, x 为其相应的特征向量, 则

$$|\lambda| \|x\| = \|\lambda x\| = \|Ax\| \leq \|A\| \|x\|,$$

即 $|\lambda| \leq \|A\|$, 故 $\rho(A) \leq \|A\|$.

此外, 矩阵范数与谱半径之间还存在如下关系:

定理 1.5 $\forall \varepsilon > 0$, 必存在 $R^{n \times n}$ 中的某范数 $\|\cdot\|$, 使得

$$\|A\| \leq \rho(A) + \varepsilon, \quad A \text{ 为任意 } n \text{ 级方阵.}$$

记 $R^{n \times m}$ 为全体实 $n \times m$ 级矩阵的集合, 在矩阵范数的概念下, 可讨论矩阵序列的收敛性.

定义 1.4 设 $R^{n \times m}$ 中有矩阵序列 $\{A^{(k)} | A^{(k)} = (a_{ij}^{(k)})\}$, 若

$$\lim_{k \rightarrow \infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij} \quad (i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, \dots, m)$$

则称矩阵序列 $\{A^{(k)}\}$ 收敛于矩阵 $A = (a_{ij})$, 记为 $\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = A$.

矩阵序列有类似于向量序列的收敛性结果.

定理 1.6 设有矩阵序列 $\{A^{(k)}\} \subset R^{n \times n}$, 则 $\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = A$ 的充要条件是存在矩阵范数 $\|\cdot\|$, 使得

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|A^{(k)} - A\| = 0.$$

定理 1.7 $\forall A \in R^{n \times n}$, $\lim_{m \rightarrow \infty} A^m = 0$ 的充要条件是 $\rho(A) < 1$.

证 由定理 1.6, 本定理仅需证明: 对某矩阵范数 $\|\cdot\|$, $\lim_{m \rightarrow \infty} \|A^m\| = 0$ 的充要条件是 $\rho(A) < 1$. 事实上, 一方面由定理 1.4, 有

$$(\rho(A))^m = \rho(A^m) \leq \|A^m\| \rightarrow 0 (m \rightarrow \infty)$$

从而 $\rho(A) < 1$; 另一方面, 由于 $\rho(A) < 1$, 则存在 $\varepsilon > 0$, 使得

$$\rho(A) + \varepsilon < 1.$$

进一步, 由定理 1.5 存在 $R^{n \times n}$ 中某范数 $\|\cdot\|$, 使得