华 章 数 学 译 丛

12

Numerical Analysis

Mathematics of Scientific Computing

(Third Edition)

数值分析（原书第3版）

（美） David Kincaid
Ward Cheney 著

王国荣 俞耀明 徐兆亮 译

机械工业出版社
China Machine Press

华 章 数 学 译 丛

12

Numerical Analysis

Mathematics of Scientific Computing

(Third Edition)

数值分析

（原书第3版）

（美） David Kincaid
Ward Cheney 著

王国荣 俞耀明 徐兆亮 译

机械工业出版社
China Machine Press

这是一本对所研究的问题作更多学术性讨论的数值分析教材，介绍了与科学计算有关的各类算法和方法以及这些方法的数学基础. 主要内容包括：计算机算术运算、非线性方程的解、解线性方程组、数值线性代数精选、函数逼近、数值微分和数值积分、常微分方程数值解、偏微分方程数值解、线性规划以及最优化等. 另外，每章配备了大量的习题，其中不乏实用性很强的计算机习题.

本书可作为数学、工程技术、自然科学、计算机科学和其他相关专业高年级本科生或研究生数值分析课程的教材，也可作为计算数学和工程技术人员的参考用书.

图书在版编目(CIP)数据

数值分析(原书第3版)/(美)金凯德(Kincaid, D.)等著；王国荣等译. —北京：机械工业出版社，2005.9

(华章数学译丛)

书名原文：Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing, Third Edition

ISBN 7-111-16845-3

Ⅰ. 数…　Ⅱ. ①金…②王…　Ⅲ. 数值计算　Ⅳ. O241

中国版本图书馆CIP数据核字(2005)第075101号

机械工业出版社(北京市西城区百万庄大街22号　邮政编码　100037)

责任编辑：方　敏　迟振春

北京诚信伟业印刷有限公司印刷・新华书店北京发行所发行

2005年9月第1版第1次印刷

787mm×1092mm 1/16・41印张

印数：0 001-4 000册

定价：75.00元

译 者 序

美国得克萨斯大学的 David Kincaid 高级讲师和 Ward Cheney 教授合著的这本书是一本内容丰富、颇有特色的教材，适合数学、工程和计算机科学等相关专业大学生和研究生使用. 它不仅介绍了科学计算中常用的算法和方法，而且十分注意讲授这些方法的数学基础. 本教材中有大量的习题可供教师和学生选用，除了有注重分析的习题外，还有计算机习题. 作者不仅鼓励学生自行编写程序，而且还建议学生使用现成的软件，使学生得到更全面的训练.

该书的翻译工作是由王国荣、俞耀明和徐兆亮合作进行的，其中第 4～5 章、第 8～11 章由王国荣翻译，第 1～3 章由俞耀明翻译，第 6～7 章由徐兆亮翻译，最后由王国荣负责统校. 本书译成后，正值加拿大 McMaster 大学乔三正教授访问我校，我们曾与他就本书部分内容的翻译工作进行了有益的讨论，在此表示感谢.

本书是应机械工业出版社之邀翻译的，并约定在一年之内完成. 由于该书内容丰富，所以深感时间紧迫. 虽然也发现原著中少量印刷错误，但是还来不及进行教学实践，所以译文难免有不妥之处，欢迎广大读者批评指正.

王国荣

2005 年 1 月于上海师范大学

前　言

本书由得克萨斯大学奥斯汀分校数学和计算机科学系高年级本科生和研究生课程使用多年的讲义演变而来．这些课程讲授科学计算中通常需要的算法和方法．我们在强调算法的同时也很看重这些方法的数学基础．学生主要是来自数学、工程技术、自然科学和计算机科学等专业的本科生，以及不同学科的研究生．数值分析中某些特殊论题的研究生课程也采用本书某些内容作为预备知识，这些课程包括微分方程数值解、数值线性代数和逼近论．我们始终从数学的观点出发来讨论本书论题，并给出众多的定理、证明及有意义的思想，从而引出许多计算方法和计算机科学中令人感兴趣的问题．当然，我们的出发点源自科学计算的实用领域，并由此来决定如何选择和讨论每个论题．例如，对某些论题，讨论其理论基础而不是详细地分析算法更有启发性．对另一些论题，则正好相反，尽管我们建议采用已经在实际应用问题上严格测试过的软件，例如程序库，但是学生仍然可从简单的算法编程和用程序作试验中得到许多知识．

本书与我们另一本较初等的教材《Numerical Mathematics and Computing，Fourth Edition》(Brooks/Cole 出版)有某些重叠部分．那本书适用于具备较少数学基础知识(有时对学科的理论不太感兴趣)的学生．它包括一组不同的论题，而且所有论题都没有进行深入的讨论．而这本书试图成为一本提供更多学术讨论的教程，对许多论题都进行了深入的讨论．有时我们提出一些在同等程度的标准课本中找不到的论题．这一类论题包括多重网格方法、多变量插值过程、同伦(或延拓)方法、延迟微分方程及最优化．

本书中的算法由伪代码来表达．这些伪代码包含数学公式以外的细节，读者很容易根据这些伪代码用任何一种标准计算机语言编写计算机程序．我们相信，通过了解算法是如何从数学理论发展而来的，然后再编写和测试实现这些算法的计算机程序，学生会更好地学习和理解数值方法．当然，学生编写的计算机程序不包含在科学程序库的稳健子程序中可以见到的复杂程序和周密检查．在有关数学软件一览的附录 A 中可以找到通用的数学程序库的例子．对于大多数应用来说，这些程序库比自行编写的程序更为可取．

本书的一个重要特点(从教学法的目的来说是重要的)是为学生提供了丰富的习题．这些习题分为两类：分析性习题和计算机习题．计算机习题又分为两类：一类是学生自己编写代码，另一类是学生采用现成的软件．我们认为这两类编程实践都是必要的．使用别人的软件并不总是一件容易的事，即使软件的文档说明与大型程序库或软件包一样清楚．另一方面，比起只是采用软件包来说，学生自己编写和测试程序通常可以获得对算法更深入的理解．大部分计算机习题要求使用至少 32 位字长的计算机．

软件、勘误和教学辅助材料可以在因特网上找到，这在附录 A 中有介绍．

第 3 版包括一些新习题，重新编排了某些习题，并纠正了前一版中发现的错误．对于因特网上资料信息的更新在附录 A 中给出，参考文献也进行了更新．同时，大部分定理都给予名称和标题，便于读者记忆．对整书内容进行了许多改进．例如，在这个新版本中，我们增加了一

章关于最优化的内容，包括下降法、二次拟合算法、Nelder-Mead 算法、模拟退火法、遗传算法、帕雷托最优化以及凸规划等内容. 一个学期的标准课程可以选用第 1～4 章及第 6～8 章中的若干章节. 两个学期的课程则可选用第 1～9 章以及其他感兴趣的论题. 第 4、5 章可以作为一个数值线性代数的短课程单独讲授. 因为我们试图包括更多的内容，所以某些节要求读者具有较多的预备知识. 它们通常被安排在一章的后面，这样读者不至于在每章开始就感到困难，并且读者可自行决定是否跳过这些节.

致谢

我们感谢在本书的编写过程中帮助我们的许多人.

第 1 版

感谢得克萨斯大学奥斯汀分校的 Sheri Brice、Margaret Combs、Jan Duffy、Katherine Mueller 和 Jenny Tsao 提供的行政支持. 首先感谢数学系的 Margaret Combs，她绘制了本书的多个 TeX 版本，在接连的几年里耐心地准备了用于课堂笔记的不同版本. 没有排版的技术问题太不容易了，她掌握了精心组织 TeX 文件的神奇技术，满足了不同的需要. 在这一点上我们还要感谢 Donald Knuth 对 TeX 排版系统的贡献. 我们感谢下列对初稿提出建议的敏锐的审阅者：Thomas A. Atchison、Frederick J. Carter、Philip Crooke、Jim D'Archangelo、R. S. Falk、J. R. Hubbard、Patrick Lang、Giles Wilson Maloof、A. K. Rigler、F. Schumann、A. J. Worsey、Charles Votaw. 此外，感谢下列人员对初稿提供的技术帮助：Victoria Hunter、Carole Kincaid、Tad Liszka、Rio Hirowati Shariffudin、Laurette Tuckerman. David Young 慷慨地提出了许多建议和忠告. 许多优秀的学生也给予了很多帮助；我们特别要感谢 David Bruce、Nai-ching Chen、Ashok Hattangady、Ru Huang、Wayne Joubert、Irina Mukherjee、Bill Nanry、Tom Oppe、Marcos Raydan、Malathi Ramdas、John Respess、Phien Tran、Linda Tweedy、Baba Vemuri. Brooks/Cole 出版公司的编辑和技术人员对这个项目提供了很多合作与支持. 特别是，感谢 Jeremy Hayhurst 和 Marlene Thom 对我们的帮助. Sawyer and Williams 的 Stacey Sawyer 对手稿进行了仔细的修改，美国数学学会的 Ralph Youngen 提供了技术帮助，并监督将 TeX 文件付印成书.

第 2 版

我们感谢以下审阅者的工作：Dan Boley，明尼苏达大学；Min Chen，宾夕法尼亚州立大学；John Harper，罗切斯特大学；Ramon Moore，俄亥俄州立大学；Yves Nievergelt，东华盛顿大学；Elinor Velasquez，加州大学伯克利分校. 特别感谢 Ron Boisvert 澄清了我们对数学软件分类的理解以及提供了附录中的例子. 此外，我们感谢那些不怕麻烦对第 1 版提出建议与勘误的人，其中包括：Victor M. Afram、Roger Alexander、A. Awwal、Carl de Boor、T. P. Brown、James Caveny、George J. Davis、Hakan Ekblom、Mariano Gasca、Bill Gearhart、Patrick Goetz、Gary L. Gray、Bob Gregorac、Katherine Hua Guo、Cecilia Jea、Liz Jessup、Grant Keady、Baker Kearfott、Junjiang Lei、Teck C. Lim、Julio Lopez、C. Lu、Taketomo Mitsui、Irina Mukherjee、Teresa Perez、Robert Piche、Sherman

Riemenschneider、Maria Teresa Rodriquez、Ulf Roennow、Larry Schumaker、Wei-Chang Shann、Christopher J. van Wyk、Kang Zhao、Mark Zhou.

第 3 版

我们感谢那些对第 2 版提出建议与勘误的人，他们是：Eyal Arian、Carl de Boor、Yung-Ming Chang、Antonella Cupillari Paul Eenigenburg、Leopoldo P. Franca、Henry Greenside、R. J. Gregorac、Scott A. King、Robert Piche、N. Shamsundar、Topi Urponen、Yuan Xu. 此外，感谢那些对第 3 版有帮助的人，他们是：Patrick Goetz、Shashank Khandelwal、Durene Ngo.

我们感谢数值分析中心、得克萨斯计算和应用数学学会、得克萨斯大学奥斯汀分校计算机科学系和数学系提供的技术支持和极佳的计算工具.

最后，Brooks/Cole—Thomson Learning 出版公司的编辑和技术人员在本书的修订过程中为我们提供了许多帮助和支持，特别是 Bob Pirtle、Janet Hill、Molly Nance. 我们还要感谢 Integre 技术出版公司的 Don DeLand、Leslie Galen、Joe Albrecht 等人的出色工作.

本书的软件支持可以从附录中列出的网站上在线获得.

希望广大读者不吝指教，欢迎任何评论、建议、问题、批评、指正.

David Kincaid

Ward Cheney

什么是数值分析

数值分析涉及研究、开发和分析用于获取各种数学问题的数值解的算法. 数值分析常常被称为科学计算的数学.

我们所研究的算法最终都是用于高速计算机，因此在获得一个问题的解之前牵涉另一个关键步骤：必须写出一个计算机程序或代码以便让计算机了解算法. 这当然不是不值一提的事，但是对计算机和计算机语言有那么多的选择，所以这个论题最好在数值分析学科之外讨论.

除了数学问题的数值解之外，计算机无疑还有许多其他用途：提供基本通信、保存大型数据库、玩游戏、“网上冲浪”、写小说、理财等等. 在计算机上用数值方法求解数学问题是科学计算. 开发有关的算法(程序)和研究它们的特性是科学计算的数学.

通常，一个算法的开发是由一个数学的构造性证明而引出的. 在经典分析中，常常用到非构造性方法，但是它们一般不会引出算法. 例如，存在性和唯一性定理的证明可以假设它们不成立，然后依照一系列的逻辑推导直至导出矛盾. 然而并不是每一个构造性的证明都会导出一个成功的算法，一个可能出现的困难是从一个问题的解析解到一个数值解中间可能还有好几步. 此外，或者由于缓慢的收敛速度，或者需要冗长的计算使得某个解析解完全不实用.

作为关于一个问题的存在性定理与一个数值解之间差距的例子，我们考虑普遍存在的矩阵方程 $Ax=b$. 我们知道当 A 非奇异时，它有唯一解. 但是当我们面对一个含有实验数据的大型线性方程组并且想计算一个近似的数值解时，关于唯一解的结论是意义不大的.

在本书中，每个论题都是从一个经常在实际应用中出现的基本数学问题出发. 然后为了得到一个求解这个问题的算法，我们给出一些分析. 算法通常以伪代码形式出现. 最后，给出对算法的进一步分析从而帮助理解算法的性态，例如它的收敛性或它对于舍入误差恶化的抵抗力. 这种分析采用向前误差分析形式或者向后误差分析形式.

在每一个所考虑的基本数学问题背后总是存在物理应用. 我们用一个热流问题对此加以说明. 一块具有多种边界条件的纯金属的温度由一些在任何点和任何时间都必须满足的数学方程所控制. 这里，主方程可以是热传导方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\frac{\partial u}{\partial t}$$

这是一个抛物型的二阶线性偏微分方程. 在对这个实际物理问题作某些假设后，这个方程模拟杆内的热流. 变量 x 是空间坐标，t 是时间. $u=u(x,t)$是温度. 要在计算机上解这个模型问题，可用一个格点网格离散空间-时间区域，并且在每个格点上寻找数值解. 热传导方程中的偏导数可用有限差分来逼近，如

$$\frac{\partial v(x,t)}{\partial t}\approx\frac{1}{k}[v(x,t+k)-v(x,t)]$$

$$\frac{\partial^2 v(x,t)}{\partial x^2}\approx\frac{1}{h^2}[v(x+h,t)-2v(x,t)+v(x-h,t)]$$

其中，k 和 h 分别是 t 方向和 x 方向上的格点间距．另外，把变量换成 v 以强调我们所解的是这个模型问题的近似问题而不是模型问题本身．把偏导数用这些近似式代替并作简化，在每一个格点(x_i, t_j)，我们得到一个线性方程．用 v_{ij} 作为 $v(x_i, t_j)$的缩写，我们得到

$$v_{i,j+1} = sv_{i-1,j} + (1-2s)v_{ij} + sv_{i+1,j}$$

其中 $s=k/h^2$．数值解可以利用前一个方程逐步地在 t 方向向前推进．这个过程称为显式方法，因为每一个新值 $v_{i,j+1}$ 都是由前面的值 $v_{i-1,j}$，$v_{i,j}$，$v_{i+1,j}$ 显式确定的．所有这一切都很雅致，人们不会预感到有什么问题．但是分析和数值实验表明显式方法存在着严重的缺陷！因而我们转向隐式方法．在隐式方法中，通过求解一个特殊形式的线性方程组

$$V_{j+1} = AV_j$$

同时得到所有的新值．其中 A 是某个三对角矩阵且 $V_j=[v_{1j}, v_{2j}, \cdots, v_{nj}]^{\mathrm{T}}$．每种方法都需要通过稳定性分析去找出网格步长 h 和 k 的值的允许范围以及相关的收敛性态．在这方面，隐式方法比显式方法优越．相关的细节可以在第 9 章中找到．

目　录

译者序
前　言
什么是数值分析
第1章　数学预备知识 …… 1
1.0　概述 …… 1
1.1　基本概念和泰勒定理 …… 1
1.1.1　极限、连续性和导数 …… 1
1.1.2　泰勒定理 …… 4
1.1.3　泰勒公式的其他形式 …… 7
习题 1.1 …… 8
1.2　收敛阶及相关基本概念 …… 10
1.2.1　收敛序列 …… 10
1.2.2　收敛阶 …… 12
1.2.3　大 $\mathcal{O}$ 和小 o 记号 …… 12
1.2.4　积分中值定理 …… 14
1.2.5　嵌套乘法 …… 14
1.2.6　上界和下界 …… 15
1.2.7　显函数与隐函数 …… 15
习题 1.2 …… 17
计算机习题 1.2 …… 20
1.3　差分方程 …… 20
1.3.1　基本概念 …… 21
1.3.2　单根 …… 23
1.3.3　重根 …… 24
1.3.4　稳定的差分方程 …… 25
习题 1.3 …… 26
计算机习题 1.3 …… 27
第2章　计算机算术运算 …… 29
2.0　概述 …… 29
2.1　浮点数和舍人误差 …… 29
2.1.1　舍人 …… 30
2.1.2　规格化的科学记数法 …… 30
2.1.3　假想计算机 Marc-32 …… 31
2.1.4　零，无穷大，非数字 …… 33
2.1.5　机器舍人 …… 33
2.1.6　Fortran 90 的内部过程 …… 33
2.1.7　IEEE 标准浮点算术运算 …… 34
2.1.8　接近的机器数 …… 34
2.1.9　浮点误差分析 …… 37
2.1.10　相对误差分析 …… 38
习题 2.1 …… 40
计算机习题 2.1 …… 42
2.2　绝对误差和相对误差：有效位丢失 …… 43
2.2.1　有效位丢失 …… 43
2.2.2　几乎相等量的减法 …… 44
2.2.3　精度丢失 …… 44
2.2.4　函数求值 …… 46
2.2.5　区间算术运算 …… 46
习题 2.2 …… 46
计算机习题 2.2 …… 48
2.3　稳定计算和不稳定计算：调节 …… 50
2.3.1　数值的不稳定性 …… 50
2.3.2　调节 …… 52
习题 2.3 …… 54
计算机习题 2.3 …… 55
第3章　非线性方程的解 …… 57
3.0　概述 …… 57
3.1　对分(区间减半)法 …… 58
3.1.1　对分算法 …… 59
3.1.2　误差分析 …… 61
习题 3.1 …… 62
计算机习题 3.1 …… 63
3.2　牛顿法 …… 63
3.2.1　牛顿算法 …… 63
3.2.2　图形解释 …… 64
3.2.3　误差分析 …… 65
3.2.4　隐函数 …… 67
3.2.5　非线性方程组 …… 68
习题 3.2 …… 70
计算机习题 3.2 …… 72
3.3　割线法 …… 73

3.3.1 割线算法 …… 74
3.3.2 误差分析 …… 75
习题 3.3 …… 77
计算机习题 3.3 …… 78
3.4 不动点和函数迭代 …… 78
习题 3.4 …… 83
3.5 求多项式的根 …… 85
3.5.1 霍纳算法 …… 88
3.5.2 贝尔斯托法 …… 92
3.5.3 拉盖尔迭代 …… 95
3.5.4 复牛顿法 …… 99
习题 3.5 …… 101
计算机习题 3.5 …… 101
3.6 同伦法和延拓法 …… 102
3.6.1 基本概念 …… 102
3.6.2 跟踪路径 …… 104
3.6.3 与牛顿法的关系 …… 106
3.6.4 线性规划 …… 106
习题 3.6 …… 108
第 4 章 解线性方程组 …… 109
4.0 概述 …… 109
4.1 矩阵代数 …… 109
4.1.1 矩阵性质 …… 111
4.1.2 分块矩阵 …… 114
习题 4.1 …… 115
计算机习题 4.1 …… 116
4.2 *LU* 分解和楚列斯基分解 …… 117
4.2.1 容易求解的方程组 …… 117
4.2.2 *LU* 分解 …… 119
4.2.3 楚列斯基分解 …… 123
习题 4.2 …… 125
计算机习题 4.2 …… 128
4.3 选主元和构造算法 …… 128
4.3.1 基本的高斯消元法 …… 129
4.3.2 选主元 …… 132
4.3.3 行尺度主元高斯消元法 …… 134
4.3.4 全主元高斯消元法 …… 136
4.3.5 分解 $PA=LU$ …… 136
4.3.6 运算量 …… 138
4.3.7 对角占优矩阵 …… 139
4.3.8 三对角方程组 …… 141
习题 4.3 …… 142
计算机习题 4.3 …… 146
4.4 范数和误差分析 …… 147
4.4.1 向量范数 …… 147
4.4.2 矩阵范数 …… 148
4.4.3 条件数 …… 150
习题 4.4 …… 151
计算机习题 4.4 …… 155
4.5 诺伊曼级数和迭代细化 …… 155
4.5.1 迭代细化 …… 158
4.5.2 均衡化 …… 160
习题 4.5 …… 161
计算机习题 4.5 …… 163
4.6 用迭代法解方程组 …… 163
4.6.1 基本概念 …… 164
4.6.2 理查森方法 …… 166
4.6.3 雅可比方法 …… 167
4.6.4 分析 …… 168
4.6.5 高斯一赛德尔方法 …… 170
4.6.6 SOR 方法 …… 172
4.6.7 迭代矩阵 …… 173
4.6.8 外推 …… 174
4.6.9 切比雪夫加速 …… 176
习题 4.6 …… 180
计算机习题 4.6 …… 182
4.7 最速下降法和共轭梯度法 …… 182
4.7.1 最速下降法 …… 184
4.7.2 共轭方向 …… 185
4.7.3 共轭梯度法 …… 186
4.7.4 预处理的共轭梯度法 …… 189
习题 4.7 …… 192
计算机习题 4.7 …… 193
4.8 高斯算法中的舍入误差分析 …… 193
习题 4.8 …… 199
第 5 章 数值线性代数精选 …… 201
5.0 基本概念回顾 …… 201
5.1 矩阵特征值问题：幂法 …… 203
5.1.1 幂法 …… 203
5.1.2 算法 …… 204

5.1.3 艾特肯加速 …… 205
5.1.4 逆幂法 …… 206
5.1.5 小结 …… 207
习题 5.1 …… 207
计算机习题 5.1 …… 209
5.2 舒尔定理和 Gershgorin 定理 …… 209
5.2.1 舒尔分解 …… 210
5.2.2 特征值的定位 …… 212
习题 5.2 …… 214
5.3 正交分解和最小二乘问题 …… 216
5.3.1 基本概念 …… 216
5.3.2 格拉姆-施密特过程 …… 217
5.3.3 修正的格拉姆-施密特算法 …… 218
5.3.4 最小二乘问题 …… 220
5.3.5 豪斯霍尔德 QR 分解 …… 221
习题 5.3 …… 224
计算机习题 5.3 …… 227
5.4 奇异值分解和广义逆 …… 227
5.4.1 广义逆 …… 229
5.4.2 不相容方程组和欠定方程组 …… 230
5.4.3 Penrose 性质 …… 231
习题 5.4 …… 234
计算机习题 5.4 …… 236
5.5 特征值问题的弗朗西斯 QR 算法 …… 236
5.5.1 QR 分解 …… 236
5.5.2 约化到上海森伯格形 …… 237
5.5.3 位移 QR 分解 …… 239
5.5.4 初等行运算和列运算 …… 241
习题 5.5 …… 242
计算机习题 5.5 …… 243
第 6 章 函数逼近 …… 245
6.0 概述 …… 245
6.1 多项式插值 …… 245
6.1.1 牛顿型插值多项式 …… 245
6.1.2 拉格朗日型插值多项式 …… 247
6.1.3 多项式插值的误差 …… 250
6.1.4 切比雪夫多项式 …… 250
6.1.5 选取结点 …… 252
6.1.6 插值多项式的收敛性 …… 253
习题 6.1 …… 256
6.2 均差 …… 260
6.2.1 高阶均差 …… 261
6.2.2 均差的算法 …… 263
6.2.3 均差性质 …… 264
6.2.4 Hermite-Genocchi 公式 …… 265
习题 6.2 …… 266
计算机习题 6.2 …… 268
6.3 埃尔米特插值 …… 268
6.3.1 基本概念 …… 268
6.3.2 牛顿均差方法 …… 270
6.3.3 拉格朗日型 …… 272
6.3.4 带重复结点的均差 …… 273
习题 6.3 …… 275
6.4 样条插值 …… 276
6.4.1 三次样条 …… 277
6.4.2 张力样条 …… 282
6.4.3 高次自然样条的理论 …… 284
习题 6.4 …… 286
计算机习题 6.4 …… 289
6.5 B 样条：基本理论 …… 290
6.5.1 0 次 B 样条 …… 290
6.5.2 一次 B 样条 …… 292
6.5.3 B 样条的性质 …… 292
6.5.4 数值计算过程 …… 293
6.5.5 B 样条的导数和积分 …… 294
6.5.6 附加性质 …… 296
习题 6.5 …… 297
计算机习题 6.5 …… 299
6.6 B 样条：应用 …… 299
6.6.1 空间 S_n^k 的基 …… 299
6.6.2 插值矩阵 …… 300
6.6.3 存在性 …… 303
6.6.4 非插值逼近方法 …… 304
6.6.5 函数到样条空间的距离 …… 306
习题 6.6 …… 306
计算机习题 6.6 …… 307
6.7 泰勒级数 …… 307
习题 6.7 …… 309
计算机习题 6.7 …… 311
6.8 最佳逼近：最小二乘理论 …… 311

6.8.1 存在性 …… 312
6.8.2 内积空间 …… 312
6.8.3 正规方程 …… 314
6.8.4 标准正交系 …… 315
6.8.5 广义毕达哥拉斯法则和贝塞尔不等式 …… 316
6.8.6 格拉姆-施密特过程 …… 316
6.8.7 算法 …… 318
6.8.8 格拉姆矩阵 …… 319
习题 6.8 …… 320
6.9 最佳逼近：切比雪夫理论 …… 321
6.9.1 刻画最佳逼近的特征 …… 322
6.9.2 凸性 …… 324
6.9.3 线性方程组的切比雪夫解 …… 326
6.9.4 再论特征定理 …… 326
6.9.5 哈尔子空间 …… 327
6.9.6 最佳逼近的唯一性 …… 328
6.9.7 切比雪夫交替定理 …… 329
6.9.8 算法 …… 330
习题 6.9 …… 332
6.10 高维插值 …… 333
6.10.1 插值问题 …… 333
6.10.2 笛卡儿积和网格 …… 333
6.10.3 布尔和 …… 334
6.10.4 张量积 …… 336
6.10.5 几何图形 …… 337
6.10.6 牛顿格式 …… 339
6.10.7 Shepard 插值 …… 340
6.10.8 三角剖分 …… 342
6.10.9 移动最小二乘法 …… 344
6.10.10 多重二次插值 …… 345
习题 6.10 …… 346
计算机习题 6.10 …… 347
6.11 连分式 …… 347
6.11.1 递归公式 …… 348
6.11.2 级数到连分式的转换 …… 350
习题 6.11 …… 351
计算机习题 6.11 …… 353
6.12 三角插值 …… 353
6.12.1 傅里叶级数 …… 353
6.12.2 复傅里叶级数 …… 354
6.12.3 内积，伪内积，伪范数 …… 355
6.12.4 指数多项式 …… 356
习题 6.12 …… 357
6.13 快速傅里叶变换 …… 357
6.13.1 分析 …… 359
6.13.2 算法 …… 361
6.13.3 混淆现象和奈奎斯特频率 …… 362
6.13.4 计算指数多项式的值 …… 363
习题 6.13 …… 364
计算机习题 6.13 …… 364
6.14 自适应逼近 …… 365
6.14.1 一次样条 …… 365
6.14.2 算法 …… 365
6.14.3 一般情况 …… 368
习题 6.14 …… 369
计算机习题 6.14 …… 369
第 7 章 数值微分和数值积分 …… 371
7.1 数值微分和理查森外推 …… 371
7.1.1 数值微分 …… 371
7.1.2 通过多项式插值的微分 …… 374
7.1.3 理查森外推 …… 376
习题 7.1 …… 380
计算机习题 7.1 …… 381
7.2 基于插值的数值积分 …… 382
7.2.1 通过多项式插值的积分 …… 383
7.2.2 梯形法则 …… 383
7.2.3 待定系数法 …… 385
7.2.4 辛普森法则 …… 385
7.2.5 一般积分公式 …… 386
7.2.6 区间变换 …… 387
7.2.7 误差分析 …… 388
习题 7.2 …… 389
计算机习题 7.2 …… 392
7.3 高斯求积 …… 392
7.3.1 高斯求积公式 …… 393
7.3.2 收敛性和误差分析 …… 396
习题 7.3 …… 397
计算机习题 7.3 …… 400
7.4 龙贝格积分 …… 400

7.4.1 递推梯形法则 …… 400
7.4.2 龙贝格算法 …… 402
7.4.3 分析 …… 402
习题 7.4 …… 404
计算机习题 7.4 …… 405
7.5 自适应求积 …… 405
习题 7.5 …… 408
计算机习题 7.5 …… 409
7.6 逼近泛函的 Sard 定理 …… 410
习题 7.6 …… 414
7.7 伯努利多项式和欧拉-麦克劳林公式 …… 414
习题 7.7 …… 417
第 8 章 常微分方程数值解 …… 419
8.0 概述 …… 419
8.1 解的存在性和唯一性 …… 419
8.1.1 存在性 …… 419
8.1.2 唯一性 …… 420
习题 8.1 …… 421
计算机习题 8.1 …… 422
8.2 泰勒级数方法 …… 422
8.2.1 实例 …… 423
8.2.2 权衡利弊 …… 425
8.2.3 误差 …… 425
8.2.4 欧拉方法 …… 426
8.2.5 延迟微分方程 …… 426
习题 8.2 …… 427
计算机习题 8.2 …… 428
8.3 龙格-库塔方法 …… 430
8.3.1 二阶龙格-库塔方法 …… 430
8.3.2 四阶龙格-库塔方法 …… 432
8.3.3 误差 …… 433
8.3.4 自适应龙格-库塔-费尔贝格方法 …… 434
习题 8.3 …… 436
计算机习题 8.3 …… 437
8.4 多步法 …… 439
8.4.1 亚当斯-巴什福思公式 …… 439
8.4.2 亚当斯-莫尔顿公式 …… 440
8.4.3 线性多步法的分析 …… 441
习题 8.4 …… 443
计算机习题 8.4 …… 444
8.5 局部误差和整体误差：稳定性 …… 445
8.5.1 隐式/显式以及收敛方法 …… 445
8.5.2 稳定性和相容性 …… 446
8.5.3 米尔恩方法 …… 447
8.5.4 局部截断误差 …… 447
8.5.5 整体截断误差 …… 448
习题 8.5 …… 450
8.6 方程组和高阶常微分方程 …… 451
8.6.1 向量记号 …… 451
8.6.2 方程组的泰勒级数方法 …… 453
8.6.3 方程组的其他方法 …… 454
习题 8.6 …… 455
计算机习题 8.6 …… 456
8.7 边值问题 …… 457
8.7.1 存在性 …… 458
8.7.2 变量替换 …… 458
习题 8.7 …… 462
8.8 边值问题：打靶法 …… 464
8.8.1 割线法 …… 465
8.8.2 线性函数 …… 465
8.8.3 牛顿方法 …… 467
8.8.4 多重打靶 …… 467
8.8.5 二阶线性方程 …… 468
习题 8.8 …… 469
计算机习题 8.8 …… 470
8.9 边值问题：有限差分法 …… 471
8.9.1 二阶微分方程 …… 471
8.9.2 线性情况 …… 471
8.9.3 收敛性 …… 472
习题 8.9 …… 473
计算机习题 8.9 …… 473
8.10 边值问题：配置法 …… 474
8.10.1 施图姆-刘维尔边值问题 …… 474
8.10.2 三次 B 样条 …… 475
计算机习题 8.10 …… 476
8.11 线性微分方程 …… 477
8.11.1 特征值和特征向量 …… 477
8.11.2 矩阵指数 …… 479
8.11.3 对角阵和可对角化阵 …… 480
8.11.4 若尔当块 …… 480

8.11.5 完全一般性解 …… 482
8.11.6 非齐次问题 …… 483
习题 8.11 …… 485
8.12 刚性方程 …… 486
8.12.1 欧拉方法 …… 486
8.12.2 修正的欧拉方法 …… 487
8.12.3 微分方程组 …… 487
8.12.4 一般的线性多步法 …… 488
8.12.5 A 稳定性 …… 488
8.12.6 绝对稳定性区域 …… 489
8.12.7 非线性方程 …… 490
习题 8.12 …… 490
计算机习题 8.12 …… 490
第 9 章 偏微分方程数值解 …… 491
9.0 概述 …… 491
9.1 抛物型方程：显式方法 …… 491
9.1.1 热传导方程 …… 491
9.1.2 有限差分法 …… 492
9.1.3 算法 …… 493
9.1.4 稳定性分析 …… 494
9.1.5 稳定性分析：傅里叶方法 …… 496
习题 9.1 …… 496
计算机习题 9.1 …… 497
9.2 抛物型方程：隐式方法 …… 497
9.2.1 算法 …… 498
9.2.2 克兰克-尼科尔森方法 …… 499
9.2.3 分析 …… 500
9.2.4 小结 …… 501
习题 9.2 …… 501
计算机习题 9.2 …… 502
9.3 定常问题：有限差分法 …… 502
9.3.1 狄利克雷问题 …… 502
9.3.2 有限差分 …… 502
9.3.3 算法 …… 504
习题 9.3 …… 505
计算机习题 9.3 …… 506
9.4 定常问题：伽辽金法 …… 506
9.4.1 伽辽金法 …… 506
9.4.2 狄利克雷问题 …… 507
9.4.3 泊松方程 …… 509
9.4.4 瑞利-里茨方法 …… 509
9.4.5 有限元素法 …… 511
习题 9.4 …… 511
计算机习题 9.4 …… 512
9.5 一阶偏微分方程：特征线法 …… 512
9.5.1 一阶方程组 …… 512
9.5.2 特征曲线 …… 513
9.5.3 特征曲线的一般理论 …… 514
习题 9.5 …… 517
9.6 拟线性二阶方程：特征线法 …… 518
9.6.1 特征曲线 …… 518
9.6.2 分类 …… 519
9.6.3 算法 …… 520
9.6.4 另一种特征线法 …… 524
习题 9.6 …… 525
计算机习题 9.6 …… 525
9.7 双曲型问题的其他方法 …… 525
9.7.1 拉克斯-温德罗夫方法 …… 526
9.7.2 方程组 …… 527
9.7.3 温德罗夫隐式方法 …… 527
9.7.4 伽辽金法 …… 529
习题 9.7 …… 530
计算机习题 9.7 …… 531
9.8 多重网格方法 …… 531
9.8.1 作为说明的例子 …… 531
9.8.2 误差的阻尼 …… 533
9.8.3 分析 …… 534
9.8.4 限制和网格校正 …… 535
9.8.5 V 循环算法 …… 536
9.8.6 运算量 …… 537
习题 9.8 …… 538
计算机习题 9.8 …… 538
9.9 泊松方程的快速方法 …… 538
9.9.1 模型问题 …… 538
9.9.2 快速傅里叶正弦变换 …… 539
9.9.3 附加的细节 …… 540
计算机习题 9.9 …… 541
第 10 章 线性规划及其相关论题 …… 543
10.1 凸性和线性不等式 …… 543
10.1.1 基本概念 …… 543

10.1.2 凸集和凸包 …… 544
10.1.3 极值点 …… 546
习题 10.1 …… 547
10.2 线性不等式 …… 548
10.2.1 齐次方程组 …… 549
10.2.2 线性不等式 …… 549
10.2.3 相容系统和不相容系统 …… 550
10.2.4 矩阵-向量形式 …… 551
习题 10.2 …… 552
10.3 线性规划 …… 553
10.3.1 转换问题的方法 …… 553
10.3.2 对偶问题 …… 554
习题 10.3 …… 556
10.4 单纯形法 …… 557
10.4.1 基本概念 …… 557
10.4.2 抽象形式 …… 558
10.4.3 表格法 …… 561
10.4.4 表格法则 …… 562
10.4.5 进一步说明 …… 562
10.4.6 小结 …… 563
10.4.7 工作量估计 …… 563
10.4.8 其他算法 …… 564
习题 10.4 …… 564
第 11 章 最优化 …… 565
11.0 概述 …… 565
11.1 单变量情况 …… 566
习题 11.1 …… 568
11.2 下降法 …… 568
习题 11.2 …… 570
11.3 二次目标函数的分析 …… 571
11.4 二次拟合算法 …… 572
习题 11.4 …… 573
11.5 Nelder-Mead 算法 …… 573
11.6 模拟退火法 …… 574
11.7 遗传算法 …… 575
11.8 凸规划 …… 576
11.9 约束极小化 …… 577
11.10 帕雷托最优化 …… 577
习题 11.10 …… 578
附录 A 数学软件一览 …… 579
参考文献 …… 590
索引 …… 615

第 1 章　数学预备知识

1.0　概述

本章从回顾微积分的一些重要的主题开始，这些主题在后继的章节中将会用到．我们鼓励读者大胆地略过已熟悉的内容．事实上，有些人也许希望从第 2 章开始．

1.1　基本概念和泰勒定理

首先回顾微积分的一些基本概念．有人可能要问：我们只是对科学计算和数值算法感兴趣，为什么还要讨论这样的主题？熟知基本数学概念是理解大多数数值算法由来的基础．但是，高深的数学概念并非必要，各种形式的泰勒定理既是许多数值计算过程的基础，又是研究科学计算的极佳切入点．

1.1.1　极限、连续性和导数

若 f 是一元实变函数，则函数 f 在 c 处的**极限**(如果存在)定义如下：等式

$$\lim_{x\to c} f(x) = L$$

表示对于每个正数 ε，存在对应的一个正数 δ，使得当 x 与 c 的距离小于 δ 时，$f(x)$ 与 L 的距离就小于 ε，即

$$\text{当 } 0 < |x - c| < \delta \text{ 时，有 } |f(x) - L| < \varepsilon$$

若具有这样的性质的 L 不存在，则 f 在 c 处的极限就不存在． 3

例如，考虑函数

$$f(x) = x^2$$

由图 1-1 中 $f(x)=x^2$ 的图形显示，当 x 接近 2 时，$f(x)$ 接近 4，因而等式

$$\lim_{x\to 2} x^2 = 4$$

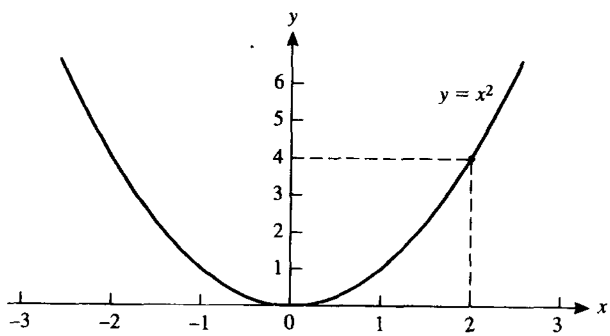

图 1-1　$y=f(x)=x^2$