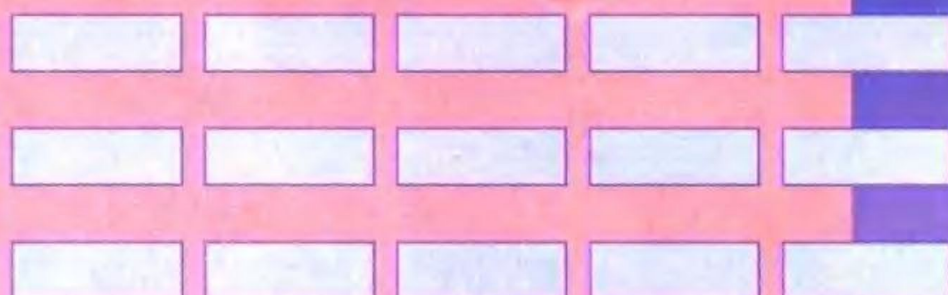


数值计算方法和算法

张韵华 奚梅成 陈长松 编著



科学出版社

数值计算方法和算法

张韵华 奚梅成 陈长松 编 著

科学出版社

2000

内 容 简 介

本书介绍各种常用的数值计算方法,描述计算方法的计算对象、计算原理和计算步骤,给出部分数值方法的算法描述,并附有一些用 C 语言编写的方法的程序和解题实例,以及符号计算语言 Mathematica 做计算方法题目的函数和实例。

本书选材适中,例题丰富,便于自学,以 * 标记有难度的内容以便取舍,适合于不同层次的读者。本书可作为普通高校本科生和计算机专科生学习计算方法的教材,也可作为工程技术人员的参考资料。

图书在版编目 (CIP) 数据

数值计算方法和算法/张韵华等编著 .-北京:科学出版社,2000
ISBN 7-03-007377-0

I. 数… II. 张… III. ①数值计算-计算方法②算法理论 IV. 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (1999) 第 65149 号

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号
邮政编码:100717

新 蕾 印 刷 厂 印 刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

2000 年 1 月第 一 版 开本: 787×1092 1/16
2000 年 1 月第一次印刷 印张: 12
印数: 1—5 100 字数: 276 000

定价: 18.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

前 言

随着现代科学技术的发展和计算机的广泛使用，数值计算方法不仅面对数学工作者、数值计算专家，还要更多地面对一般的工程技术人员和各行各业的设计人员。

为了顾及一般读者，本书力求通俗易懂、简洁实用。其内容按插值、数值微分和积分、曲线拟合、非线性方程求根、解线性方程组、计算特征值和特征向量、常微分方程数值解的顺序安排。第 9 章给出调用 Mathematica 软件直接做数值题目的部分样例。全书约需 40 学时。本书介绍的计算方法都有相对的独立性，可以根据不同的教学对象和要求选择其中的某些章、节和知识点，书中以 * 标记略有难度的内容以供选用。

本书以能正确选择计算对象的计算方法为前提，领会计算原理和掌握计算步骤为主干线，淡化数学中定理证明中的严谨性部分，强化数值方法与计算机技术的应用能力训练，为此取书名为“数值计算方法和算法”。希望读者通过本书的学习掌握数值计算中的基本思想和方法，培养自行处理常规数值计算问题的能力，为深入学习数值方法打好基础，也为部分读者调用各类程序包解决问题创造条件。

本书是作者在中国科学技术大学多年讲授计算方法课程的基础上编制而成，可作为一般理工科（非数学系和计算机系）以及工商科专业的计算方法教材，也可供工程技术人员作为参考用书。

作 者

1999 年 9 月

目 录

第 0 章 绪论	(1)
0.1 数值计算方法与算法	(1)
0.2 误差与有效数字	(1)
0.3 约束误差	(3)
0.4 范数	(3)
0.4.1 向量范数	(3)
0.4.2 矩阵范数	(5)
第 1 章 插值	(9)
1.1 插值	(9)
1.2 多项式插值的拉格朗日(Lagrange)型式	(9)
1.2.1 线性插值	(10)
1.2.2 二次插值	(11)
1.2.3 n 次拉格朗日插值多项式	(13)
1.3 多项式插值的牛顿(Newton)型式	(16)
1.3.1 差商及其计算	(17)
1.3.2 牛顿插值	(18)
1.4* Hermite 插值	(21)
1.5 分段插值	(24)
1.5.1 龙格(Runge)现象	(24)
1.5.2 分段线性插值	(25)
1.6 三次样条函数	(27)
1.6.1 三次样条插值的 M 关系式	(27)
1.6.2 三次样条插值的 m 关系式	(29)
1.7 程序示例	(30)
习题 1	(34)
第 2 章 数值微分和数值积分	(36)
2.1 数值微分	(36)
2.1.1 差商与数值微分	(36)
2.1.2 插值型数值微分	(38)
2.1.3 样条插值数值微分	(39)
2.2 数值积分	(39)
2.2.1 插值型数值积分	(40)
2.2.2 牛顿-柯特斯(Newton-Cote's)积分	(41)
2.3 复化数值积分	(44)
2.3.1 复化梯形积分	(44)

2.3.2 复化辛普森积分	(46)
2.3.3 复化积分的自适应算法	(47)
2.3.4 龙贝格(Romberg)积分	(50)
2.4 重积分计算	(51)
2.5* 高斯型积分公式介绍	(52)
2.6 程序示例	(54)
习题 2	(57)
第 3 章 曲线拟合的最小二乘法	(59)
3.1 拟合曲线	(59)
3.2 线性拟合和二次拟合函数	(60)
3.3 解矛盾方程组	(63)
3.4 程序示例	(69)
习题 3	(72)
第 4 章 非线性方程求根	(74)
4.1 实根的对分法	(74)
4.2 迭代法	(75)
4.3 牛顿迭代法	(77)
4.4 弦截法	(80)
4.5 非线性方程组的牛顿方法	(81)
4.6 程序示例	(83)
习题 4	(85)
第 5 章 解线性方程组的直接法	(86)
5.1 消元法	(87)
5.1.1 三角形方程组的解	(87)
5.1.2 高斯(Gauss)消元法与列主元消元法	(88)
5.1.3 Gauss-Jordan 消元法	(93)
5.2 直接分解法	(94)
5.2.1 Doolittle 分解	(96)
5.2.2 Courant 分解	(100)
5.2.3 追赶法	(102)
5.2.4 对称矩阵的 LDL^T 分解	(103)
5.3* 矩阵的条件数	(105)
5.4 程序示例	(106)
习题 5	(114)
第 6 章 解线性方程组的迭代法	(116)
6.1 简单(Jacobi)迭代	(117)
6.1.1 Jacobi 迭代格式	(117)
6.1.2 Jacobi 迭代收敛条件	(119)
6.2 Gauss-Seidel 迭代	(120)

6.3 松弛迭代	(123)
6.4 逆矩阵计算	(124)
6.5 程序示例	(125)
习题 6	(130)
第 7 章 计算矩阵的特征值和特征向量	(132)
7.1 幂法	(132)
7.1.1 幂法运算	(132)
7.1.2 幂法的规范运算	(135)
7.1.3* 关于幂法的初始值	(137)
7.2 反幂法	(137)
7.3 实对称矩阵的 Jacobi 方法	(138)
7.4 程序示例	(144)
习题 7	(147)
第 8 章 常微分方程数值解	(148)
8.1 欧拉(Euler)公式	(148)
8.1.1 基于数值微商的欧拉公式	(148)
8.1.2* 欧拉公式的收敛性	(151)
8.1.3 基于数值积分的近似公式	(152)
8.2 龙格-库塔方法	(153)
8.2.1 二阶龙格-库塔方法	(153)
8.2.2 四阶龙格-库塔公式	(155)
8.2.3 步长的自适应	(157)
8.3 线性多步法	(157)
8.4 常微分方程组的数值解法	(160)
8.4.1 一阶常微分方程组的数值解法	(160)
8.4.2 高阶常微分方程数值方法	(162)
8.5* 常微分方程的稳定性	(163)
8.6 程序示例	(165)
习题 8	(168)
第 9 章* 在 Mathematica 中做题	(169)
9.1 符号计算系统 Mathematica 基本操作	(169)
9.2 插值	(172)
9.3 数值积分	(173)
9.4 曲线拟合	(174)
9.5 非线性方程	(175)
9.6 方程组求解	(176)
9.7 计算特征值和特征向量	(177)
9.8 常微分方程数值解	(178)
参考文献	(181)

第 0 章 绪 论

0.1 数值计算方法与算法

数值计算方法,是一种研究并解决数学问题的数值近似解方法,是在计算机上使用的解数学问题的方法,简称计算方法。它的计算对象是那些在理论上有解而又无法用手工计算的数学问题。例如,解含有 300 个未知量的线性方程组;计算 6 阶矩阵的全部特征值。

在科学研究和工程技术中都要用到各种计算方法。例如,在地质勘探、汽车制造、桥梁设计、天气预报和汉字字样设计中都有计算方法的踪影。在 70 年代,大多数学校仅在数学系的计算数学专业和计算机系开设计算方法这门课程。随着计算机技术的迅速发展和普及,现在计算方法几乎已成为所有理工科学生的必修课程。

计算方法是一门理论性和实践性都很强的学科,计算方法既有数学类课程中理论上的抽象性和严谨性,又有实用性和实验性的技术特征。计算方法的前提课程是微积分、线性代数、常微分方程和一门计算机语言。

学习计算方法的目的是为了使用方法,在学习计算方法的过程中,在套用计算公式、修改计算公式和创建计算公式中,都需要一定的专业知识和数学基础。在学习计算方法时,要注重逼近和迭代等数学思想和常用手法,获取近似计算的能力,并能触类旁通地应用到各个领域。一些有创造力的工程师不仅擅长使用某些计算方法,并能创建出简便有效的计算方法。例如,样条函数、快速傅里叶变换和有限元方法都是先由工程师们创建的,然后再由数学家们完善这些方法的理论基础,并从理论上进行提高和推广。

从方法的计算公式到在计算机上实际运行,两者之间还有距离,这是数学能力与计算机应用技术能力之间的距离,也与计算机的运行环境和编程工具有关。为了缩小两者之间的距离,本书将给出部分计算公式的算法描述。用算法容易准确而简便地描述计算公式,在算法中能简洁地表达计算公式中的“循环”和“迭代”等操作。有了方法的算法,将它转化成 C 或 PASCAL 等语言的程序,上机运行也就容易了。

在学习计算方法的过程中,建议读者能用某种语言编制该方法的程序并运行通过,这将有利于准确而深刻地掌握该方法的计算步骤和过程。书中每章后面都附有几个 C 语言程序,这些程序基于数值计算公式,没有进行优化处理,其目的是通过编程上机,加深对方法运行过程的理解,训练和提高计算机应用技术的能力和水平。

0.2 误差与有效数字

绝对误差与绝对误差界

近似计算必然产生误差,误差表示精确值与近似值的距离。

定义:设 x^* 为精确值(或准确值), x 是 x^* 的一个近似值,称 $e = x^* - x$ 为近似值 x 的

绝对误差或误差。

$$\text{绝对误差} = \text{精确值} - \text{近似值}$$

绝对误差 e 的值可正可负,如果得不到精确值 x^* ,也就算不出绝对误差 e 的值。常用限制误差绝对值的范围 ϵ 来描述和控制误差的范围。

定义:如果精确值 x^* 与近似值 x 的误差的绝对值不超过某正数 ϵ ,即

$$|e| = |x^* - x| < \epsilon$$

则称 ϵ 为绝对误差限或误差限。

精确值 x^* 也可表示为: $x^* = x \pm \epsilon$ 。通常,在误差允许的范围内的近似值 x 即认为是精确值,这也是计算中控制循环中止的常用手段。

例 0.1:若经四舍五入得到 $x = 123.456$,

对于数 123.4559, 123.4555, 123.4561, 123.4564 的近似值都是 $x = 123.456$,即第四位小数大于 5 时,必然进位到第三位小数;第四位小数小于 5 时,必然舍去。

它的误差限是:

$$|e| = |x^* - x| < 10^{-4} \cdot 5 = \frac{1}{2} \cdot 10^{-3}$$

若 $x^* = 0.0123456$,则它的误差限是:

$$|e| = |x^* - x| < 10^{-8} \cdot 5 = \frac{1}{2} \cdot 10^{-7}$$

相对误差与相对误差限

在很多情况下,绝对误差并不能全面地反映近似程度。例如,某电器公司两次进货的某型号电风扇分别为 1000 台和 2000 台,其中开箱不合格电风扇分别为 8 和 12(绝对误差的值)。不合格率分别为 $8/1000 = 0.8\%$ 和 $12/2000 = 0.6\%$ (相对误差的值),这说明该电风扇的质量有所提高。我们把绝对误差与准确值的比值定义为相对误差。

定义:设 x^* 为精确值, x 是 x^* 的一个近似值,称

$$e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$$

为近似值 x 的相对误差。

在实际计算中,有时得不到精确值 x^* ,当 e_r 较小时 x^* 可用近似值 x 代替,即

$$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x^* - x}{x}$$

$$\text{相对误差} = \frac{\text{绝对误差}}{\text{精确值}} \quad \text{或} \quad \text{相对误差} = \frac{\text{绝对误差}}{\text{近似值}}$$

相对误差 e_r 的值也可正可负,与绝对误差一样不易计算,常用相对误差限控制相对误差的范围。

定义:如果有正数 ϵ_r 使得 $e_r = \left| \frac{e}{x^*} \right| < \epsilon_r$,则称 ϵ_r 为 x^* 的相对误差限。

产生误差的因素很多,主要有:

(1)原始误差

由客观存在的模型抽象到物理模型产生的误差。包括模型误差和原始数据误差。

(2)截断误差

用有限项近似无限项时,由截取函数的部分项产生的误差,称为截断误差。

例如: $\operatorname{arctg} x = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \frac{x^7}{7} + \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1} x^{2n-1}}{2n-1}$, 在计算中用 $\operatorname{arctg} x \approx \sum_{n=1}^N \frac{(-1)^{n-1} x^{2n-1}}{2n-1}$ 作近似计算。

(3) 舍入误差

在数值计算中,通常都按有限位进行运算。例如,按照四舍五入的原则, $2/3 = 0.666667$ 或 $2/3 = 0.667$, 由舍入产生的误差,称为舍入误差。

在实际计算中的数据通常是近似值,它们由观察、估计或一些计算而得到,这些数在计算机上表示和计算后也会带来进一步误差,即误差的积累和传播。关于误差的传播似乎没有多少统一的理论,通常积累误差的界是以通例分析为基础而建立的。

有效位数

定义: 当 x 的误差限为某一位的半个单位,则这一位到第一个非零位的位数称为 x 的有效位数。

例如, $x = 12.34$, $y = 0.004067$ 均有 4 位有效数字,而 3.00 与 3.0000 分别有 3 位和 5 位有效位数。

有效位的多少直接影响到近似值的绝对误差和相对误差,因此,在计算中也应注意保持一定的有效位数。

0.3 约束误差

选择收敛的稳定的方法

对同一问题选择不同的数值计算方法,可能得到不同的计算结果。在计算方法中,除了给出方法的数值计算公式,还要讨论计算公式的收敛性、稳定性和截断误差的特性。选择收敛性要求低、稳定性好的方法是约束误差扩张的最重要的措施。例如,样条插值函数比高次多项式的效果好得多,是构造插值函数的首选方法。

提高数值计算精度

数值在计算机中存放的位数称为字长。有限位的字长是带来舍入误差和抑制数值计算精度的根源。对同一种方法,字长大的计算机上的计算效果要优于字长小的计算机。

在计算机上,对同一种数值计算方法而言,对数据选用不同的数值类型有时会直接影响到计算效果。例如,对病态的线性方程组使用消元方法,采用单精度数据时其数值解大大失真,而用双精度数据却可得到满意的数值解。

0.4 范数

0.4.1 向量范数

在一维空间中,实轴上任意两点 a, b 的距离用两点差的绝对值 $|a - b|$ 表示。绝对值是一种度量形式的定义。

范数是对函数、向量和矩阵定义的一种度量形式。任何对象的范数值都是一个非负

实数。使用范数可以测量两个函数、向量或矩阵之间的距离。向量范数是度量向量长度的一种定义形式。范数有多种定义形式,只要满足下面的三个条件即可定义为一个范数。同一向量,采用不同的范数定义,可得到不同的范数。

对任一向量 $X \in R^n$,按照一个规则确定一个实数与它对应,记该实数为 $\|X\|$,若 $\|X\|$ 满足下面三个性质:

$$\left. \begin{array}{ll} \text{(i)} \quad \forall X \in R^n, \text{有 } \|X\| \geq 0, \text{当且仅当 } X=0 \text{ 时, } \|X\| = 0 & \text{(非负性)} \\ \text{(ii)} \quad \forall X \in R^n, \text{有 } \|\alpha X\| = |\alpha| \|X\| & \text{(齐次性)} \\ \text{(iii)} \quad \forall X, Y \in R^n, \text{有 } \|X+Y\| \leq \|X\| + \|Y\| & \text{(三角不等式)} \end{array} \right\} \quad (0.1)$$

那么称该实数 $\|X\|$ 为向量 X 的范数。

向量范数定义

向量 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 的 L_p 范数定义为

$$\|X\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p \leq +\infty \quad (0.2)$$

其中,经常使用的三种向量范数是 $p = 1, 2, \infty$ 。

$$\|X\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n| = \sum_{i=1}^n |x_i| \quad (0.3)$$

$$\|X\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} \quad (0.4)$$

或写成

$$\|X\|_2 = \sqrt{(X, X)}$$

$$\|X\|_\infty = \max\{|x_1|, |x_2|, \dots, |x_n|\} = \max_{1 \leq i \leq n} \{|x_i|\} \quad (0.5)$$

例 0.2: 计算向量 $X = (1, 3, -5)^T$, $p = 1, 2, \infty$ 的三种向量范数。

$$\|X\|_1 = 1 + 3 + 5 = 9$$

$$\|X\|_2 = (1^2 + 3^2 + 5^2)^{1/2} = \sqrt{35}$$

$$\|X\|_\infty = \max\{1, 3, |-5|\} = 5$$

不同向量范数的关系

有限维线性空间 R^n 中任意向量范数的定义都是等价的。若 $R_1(X), R_2(X)$ 是 R^n 上两种不同的范数定义,则必存在 $0 < m < M < \infty$, 使 $\forall X \in R^n$, 均有

$$mR_2(X) \leq R_1(X) \leq MR_2(X)$$

或

$$m \leq \frac{R_1(X)}{R_2(X)} \leq M \quad (X \neq 0) \quad (0.6)$$

(证明略。)

向量的极限

有了向量范数的定义,也就有了度量向量距离的标准,即可定义向量的极限和收敛概念了。

设 $X^{(1)}, \dots, X^{(m)} \dots$ 为 R^n 上向量序列,若存在向量 $\alpha \in R^n$ 使 $\lim_{m \rightarrow \infty} \|X^{(m)} - \alpha\| = 0$, 则称向量列 $X^{(1)}, X^{(2)}, \dots$ 是收敛的, α 称为该向量序列的极限。

由向量范数的等价性知,向量列是否收敛与选取哪种范数无关。

向量序列 $X^{(m)} = (x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, \dots, x_n^{(m)})^T; m = 1, 2, \dots$, 收敛的充分必要条件为其序列的每个分量收敛, 即 $\lim_{m \rightarrow \infty} x_i^{(m)}$ 存在。

若 $\lim_{m \rightarrow \infty} x_i^{(m)} = x_i$, 则 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 就是向量序列 $\{X^{(m)}\} = \{(x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, \dots, x_n^{(m)})^T\}$ 的极限。

例 0.3: 求向量序列 $\{X^{(k)}\} = \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{k+1} \\ \left(1 + \frac{1}{k}\right)^k \\ \frac{2k-1}{k+11} \end{pmatrix} \right\}$ 的极限向量。

解: 算出每个向量分量的极限后得

$$\lim_{k \rightarrow \infty} X^{(k)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} \frac{1}{k+1} \\ \left(1 + \frac{1}{k}\right)^k \\ \frac{2k-1}{k+11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k+1} \\ \lim_{k \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{k}\right)^k \\ \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{2k-1}{k+11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ e \\ 2 \end{pmatrix}$$

在计算方法中, 计算的向量序列都是数据序列, 当 $\|X^{(k+1)} - X^{(k)}\|$ 小于给定精度时, 取 $X^{(k+1)}$ 为极限向量 X^* 。

0.4.2 矩阵范数

矩阵范数定义

矩阵范数可用向量范数定义。设 $A \in R^{n \times n}$, 记方阵 A 的范数为 $\|A\|$, 那么

$$\|A\| = \sup_{\substack{X \in R^n \\ X \neq 0}} \frac{\|AX\|}{\|X\|} \quad \text{或} \quad \|A\| = \sup_{\substack{X \in R^n \\ \|X\|=1}} \|AX\| \quad (0.7)$$

称为矩阵的范数。这样定义的矩阵范数满足下列性质:

$$\left. \begin{array}{ll} \text{(i)} \quad \|A\| \geq 0, \text{ 当且仅当 } A=0 \text{ 时, } \|A\|=0 & \text{(非负性)} \\ \text{(ii)} \quad \|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|, \text{ 其中 } \lambda \text{ 为复数} & \text{(齐次性)} \\ \text{(iii)} \quad \text{对于任意两个阶数相同的矩阵 } A, B \text{ 有} & \\ \quad \|A+B\| \leq \|A\| + \|B\| & \text{(三角不等式)} \\ \text{(iv)} \quad A, B \text{ 为同阶矩阵 } \|AB\| \leq \|A\| \|B\| & \\ \text{(v)} \quad A \text{ 为 } n \text{ 阶矩阵, 对 } \forall X \in R^n, \text{ 恒有 } \|AX\| \leq \|A\| \cdot \|X\| & \text{(相容性)} \end{array} \right\} \quad (0.8)$$

常用矩阵范数

向量有三种常用范数, 相对应的矩阵范数的三种形式为:

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad (0.9)$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad (0.10)$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_1} \quad (\lambda_1 \text{ 是 } A^T A \text{ 的最大特征值}) \quad (0.11)$$

证明*:既然矩阵的范数是 R^n 上满足 $\|X\| = 1$ 向量范数 $\|AX\|$ 的上确界,那么,找到这个上确界也就找到了矩阵的范数。

(1) 任取 $X \in R^n$, $\|X\|_1 = 1$, 则

$$\begin{aligned}\|AX\|_1 &= \sum_{i=1}^n |(AX)_i| = \sum_{i=1}^n \left| \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} x_j \right| \leq \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |\alpha_{ij}| |x_j| \\ &= \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^n |\alpha_{ij}| \right) |x_j| \leq \left(\max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |\alpha_{ij}| \right) \sum_{j=1}^n |x_j| = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |\alpha_{ij}|\end{aligned}$$

即

$$\|A\|_1 \leq \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |\alpha_{ij}|$$

另一方面设极大值在 k 列达到, 即 $\max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |\alpha_{ij}| = \sum_{i=1}^n |\alpha_{ik}|$, 取 $X = e = (0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$, e 除第 k 个分量为 1 外, 其余分量均为 0, 于是有

$$\|Ae\|_1 = \|(\alpha_{1k}, \alpha_{2k}, \dots, \alpha_{nk})^T\|_1 = \sum_{i=1}^n |\alpha_{ik}| = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |\alpha_{ij}|$$

由于 $\|e\|_1 = 1$, 故 $\|A\|_1 \geq \sum_{i=1}^n |\alpha_{ik}| = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |\alpha_{ij}|$, 因此有

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |\alpha_{ij}|$$

(2) 任取 X , $\|X\|_\infty = 1$, 则

$$\begin{aligned}\|AX\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq n} |(AX)_i| = \max_{1 \leq i \leq n} \left| \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} x_j \right| \\ &\leq \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |\alpha_{ij}| |x_j| \leq \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |\alpha_{ij}|\end{aligned}$$

即

$$\|A\|_\infty \leq \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |\alpha_{ij}|$$

另一方面设极大值在 k 行达到, 取 $X = e = (\text{sign} \alpha_{k1}, \text{sign} \alpha_{k2}, \dots, \text{sign} \alpha_{kn})^T$, 这里

$$\text{sign} \alpha = \begin{cases} 1, & \alpha \geq 0 \\ -1, & \alpha < 0 \end{cases}$$

于是

$$\|Ae\|_\infty = \sum_{j=1}^n |\alpha_{kj}|$$

即

$$\|A\|_\infty \geq \sum_{j=1}^n |\alpha_{kj}|$$

故

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |\alpha_{ij}|$$

(3) $A^T A$ 为对称非负矩阵, 具有非负特征值, 并具有 n 个相互正交的单位特征向量。

设 $A^T A$ 的特征值为 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$, 相应的特征向量为 u_i , 其中 u_i 为相互正交的单位向量。设 $X = x_1 u_1 + x_2 u_2 + \dots + x_n u_n$, 并且 $\|X\|_2 = 1$, 即 $\sum_{i=1}^n x_i^2 = 1$, 则

$$A^TAX = \lambda_1 x_1 u_1 + \lambda_2 x_2 u_2 + \cdots + \lambda_n x_n u_n$$

$$\|AX\|_2^2 = (AX, AX) = (A^TAX, X) = \sum_{i=1}^n \lambda_i x_i^2 \leq \lambda_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \lambda_1$$

即对任意 $\|X\|_2 = 1$ 均有 $\|AX\|_2 \leq \sqrt{\lambda_1}$, 故

$$\|A\|_2 \leq \sqrt{\lambda_1}$$

取 $X = u_1$, 则有

$$\|Au_1\|_2^2 = \lambda_1$$

故

$$\|A\|_2 \geq \sqrt{\lambda_1}$$

于是

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_1}$$

如果 A 是对称矩阵, 那么 $A^T A = AA$, 设 A 的特征值是 t_i , 则有

$$\|A\|_2 = \max \sqrt{\lambda_i} = \max |t_i|$$

按式(0.7)定义的矩阵范数满足矩阵范数的各种条件, 并称它为从属于该向量范数的矩阵范数。由式(0.7)对一切非零向量 X , 有

$$\|AX\| \leq \|A\| \|X\| \quad (0.12)$$

使得式(0.12)成立的矩阵与向量范数称为相容性。根据定义, 对任一种从属范数有 $\|I\| = 1$, 即单位矩阵的范数是 1。

还有一种与向量范数 $\|X\|_2$ 相容的矩阵范数, 称为 Euclid 或 Schur 范数, 用 $\|A\|_E$ 表示, 其定义为

$$\|A\|_E = \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |\alpha_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (0.13)$$

因为 Euclid 范数易于计算, 在实用中是一种十分有用的范数。但它不能从属于任何一种范数, 因为 $\|I\|_E = n^{\frac{1}{2}}$ 。

与向量范数的等价性质类似, 矩阵范数之间也是等价的。

例 0.4: $A = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 3 & 7 \end{pmatrix}$, 分别求 $\|A\|_1$, $\|A\|_\infty$, $\|A\|_2$, $\|A\|_E$ 。

解: $\|A\|_1 = \max\{|-1| + 3, 2 + 7\} = 9$

$$\|A\|_\infty = \max\{|-1| + 2, 3 + 7\} = 10$$

$$A^T A = \begin{pmatrix} -1 & 3 \\ 2 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 3 & 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 & 19 \\ 19 & 53 \end{pmatrix}$$

$A^T A$ 的特征值 $\lambda_1 = 60.19, \lambda_2 = 2.81$

$$\|A\|_2 = \sqrt{60.19}$$

$$\|A\|_E = (1 + 4 + 9 + 49)^{1/2} = \sqrt{63}$$

矩阵特征值与范数

若 λ 是矩阵 A 的特征值, $AX = \lambda X$, 对任一对相容的矩阵与向量范数有

$$\begin{aligned} \|\lambda\| \|A\| &= \|\lambda X\| = \|AX\| \leq \|A\| \|X\| \\ \|\lambda\| &\leq \|A\| \end{aligned} \quad (0.14)$$

即矩阵特征值的模不大于矩阵的任一范数。

谱半径

若 A 有特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, 记 $\rho(A) = \max |\lambda_r|$, 则称 $\rho(A)$ 为 A 的谱半径。

有了谱半径的定义, 矩阵的 2 范数可记为: $\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$ 。

谱半径与矩阵范数

由矩阵谱半径定义, 可得到矩阵范数的另一重要性质, $\rho(A) \leq \|A\|$ 。

本节内容的要点是学会计算向量和矩阵的范数, 其中向量范数部分可放在第 3 章中, 矩阵范数部分可放在第 6 章中。

第 1 章 插 值

1.1 插 值

什么是插值? 简单地说, 用给定的未知函数 $f(x)$ 的若干函数值的点构造 $f(x)$ 近似函数 $\varphi(x)$, 称函数 $\varphi(x)$ 为插值函数。例如: 在服装店订做风衣时, 选择好风衣的样式后, 服装师量出并记下你的胸围、衣长和袖长等几个尺寸, 这几个尺寸就是风衣函数的插值点数值, 在衣料上画出的裁剪线就是服装师构造的插值函数 $\varphi(x)$, 裁剪水平的差别就在于量准插值点和构造合乎身材的插值函数。

在实际问题中, 有时只能给出函数 $f(x)$ 在平面上的一些离散点的值 $\{(x_i, f(x_i))\}$, $i = 0, 1, \dots, n$, 而不能给出 $f(x)$ 的具体解析表达式, 或者 $f(x)$ 的表达式过于复杂而难于运算。这时我们需要用近似函数 $\varphi(x)$ 来逼近函数 $f(x)$, 在数学上常用的函数逼近的方法有:

- 插值。
- 一致逼近。
- 均方逼近或称最小二乘法。

本章讨论用插值逼近函数的方法。

定义: $f(x)$ 为定义在区间 $[a, b]$ 上的函数, $x_0, x_1, \dots, x_n$ 为 $[a, b]$ 上 $n+1$ 个互不相同的点, Φ 为给定的某一函数类。若 Φ 上有函数 $\varphi(x)$, 满足

$$\varphi(x_i) = f(x_i), i = 0, 1, \dots, n$$

则称 $\varphi(x)$ 为 $f(x)$ 关于节点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 在 Φ 上的插值函数; 称点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 为插值节点; 称 $\{(x_i, f(x_i))\}, i = 0, 1, \dots, n$ 为插值型值点, 简称型值点或插值点; $f(x)$ 称为被插函数。

这样, 对函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上的各种计算, 就用对插值函数 $\varphi(x)$ 的计算取而代之。

构造插值函数需要关心下列问题:

- 插值函数是否存在?
- 插值函数是否唯一?
- 如何表示插值函数?
- 如何估计被插函数与插值函数的误差?

1.2 多项式插值的拉格朗日 (Lagrange) 型式

可对插值函数 $\varphi(x)$ 的类型作多种不同函数的选择, 由于代数多项式具有简单和一些良好的特性, 例如, 多项式是无穷光滑的, 容易计算它的导数和积分, 故常选用代数多项

式作为插值函数。

1.2.1 线性插值

问题 1.1: 给定两个插值点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$, 其中 $x_0 \neq x_1$, 怎样做通过这两点的一次插值函数?

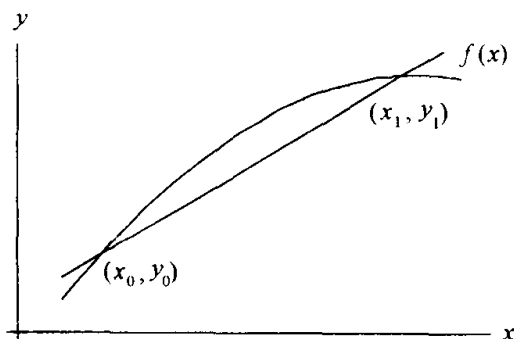


图 1.1 线性插值函数 $L_1(x)$

过两点作一条直线, 这条直线就是通过这两点的一次多项式插值函数, 简称线性插值。如图 1.1 所示。

在初等数学中, 可用两点式、点斜式或截距式构造通过两点的一条直线。

下面先用待定系数法构造插值直线。

设直线方程为 $L_1(x) = ax + b$, 将 $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$ 分别代入直线方程 $L_1(x)$ 得:

$$\begin{cases} ax_0 + b = y_0 \\ ax_1 + b = y_1 \end{cases}$$

当 $x_0 \neq x_1$ 时, 因 $\begin{vmatrix} x_0 & 1 \\ x_1 & 1 \end{vmatrix} \neq 0$, 所以方程组有解, 而且解是唯一的。这也表明, 平面上

两个点, 有且仅有一条直线通过。用待定系数法构造插值多项式的方法简单直观, 容易看到解的存在性和唯一性, 但要解一个方程组才能得到插值函数的系数, 因工作量较大和不便向高阶推广, 故这种构造方法通常不宜采用。

当 $x_0 \neq x_1$ 时, 若用两点式表示这条直线, 则有:

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1 \quad (1.1)$$

这种型式称为拉格朗日插值多项式。

记 $l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}, l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$, $l_0(x), l_1(x)$ 称为插值基函数, 计算 $l_0(x), l_1(x)$ 的值, 易见

$$l_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (1.2)$$

在拉格朗日插值多项式中可将 $L_1(x)$ 看做两条直线 $\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0, \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1$ 的迭加, 并可看到两个插值点的作用和地位都是平等的。

拉格朗日插值多项式型式免了解方程组的计算, 易于向高次插值多项式型式推广。

线性插值误差

定理 1: 记 $L_1(x)$ 为以 $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$ 为插值点的插值函数, 这里 $y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1)$, 设 $f(x)$ 一阶连续可导, $f''(x)$ 在 (a, b) 上存在, 则对任意给定的 $x \in [a, b]$, 总存在一点 $\zeta \in [a, b]$, 使

$$R(x) = f(x) - L_1(x) = \frac{f''(\zeta)}{2!} (x - x_0)(x - x_1), \zeta \in [x_0, x_1] \quad (1.3)$$