

NUMERICAL METHODS

GERMUND DAHLQVIST AKS ELMON

数值方法

★ 包雪松 译 唐述钊 校



清华大学出版社



数值方法

[瑞典] GERMUND DAHLQIST
ÅKE BJÖRCK

包雪松 译 唐述钊 校

高等教育出版社

内 容 提 要

本书共分十三章,对计算数学的各有关分支进行了论述。本书全面地介绍了计算数学中的一些思想及一些基本概念,也特别注重各类方法在实际中的应用。书中还给出了大量习题,并附有详细的习题解答。第十三章提供了一个较广泛的文献目录,以及一份比较完整的算法清单,为有兴趣而希望加深知识的读者提供了一个良好的指南。

本书可作为计算数学专业的大学生、研究生的参考书,也可供其他有关人员学习参考。

数 值 方 法

[瑞典] GERMUND DAHLQUIST
ÅKE BJÖRCK

包雪松译 唐述钊校

*

高等教育出版社出版
新华书店北京发行所发行
民族印刷厂印刷

*

开本 850×1168 1/32 印张 22.25 字数 530 000
1990 年 6 月第 1 版 1990 年 6 月第 1 次印刷
印数 0001—2 390
ISBN7-04-001075-5/TP·30
定价 6.40 元

译 者 的 话

七十年代末,瑞典Dahlquist教授来我国讲学时,表示希望把他与Björck教授合著的这本数值方法译成中文介绍给中国读者.但是由于我们动手较晚加上工作不力,迟至今日才饷读者,深感歉意.但是译者确信,此书并没有因为时间的过去而失去它应有的价值.事实上至今还没有出现一本内容如此全面、理论更为深刻、观点更加提高的同种类型书籍.

此书在翻译过程中承暨南大学吴希光同志对序言和第一章作过有益的工作,又承南京大学计算中心陈志明同志对译稿作了细致的通读、校正、补遗,更有许多热情的同志在最后的抄写工作中贡献过宝贵的时间,在此向所有这些同志表示我们深刻的谢意.

最后,由于我们水平有限,不贴切之处甚至错误在所难免,恳请读者不吝赐教,及时指正.

英译本序

本书是 CWK Gleerup 公司 1969 年出版的一本瑞典文教科书经过扩充和更新的译本。对本书的大部分章节来说,必需的预备知识是大学二年级的数学课程(特别是微积分和线性代数),以及面向问题的程序设计语言的某些知识。后者可与本书前三章并行地学习。本书有些章节是比较难的,我们希望,采用本书作为特定课程课本的教师们将很容易地确定所讲的各部分内容的深度。

我们试图挑选出这样的一些方法:它们既适用于用简单工具作小型计算,同时又对大型计算来说是重要的。虽然在大多数情形下,有一架台式计算器,或者甚至只有一把计算尺和一些数学用表就足够了,然而,如果读者能使用有分时系统的计算机来熟悉某些算法定有所裨益。

我们希望本书可作为一本科技计算手册来使用。在最后一章中有一个范围广泛的文献目录,以及一份已出版的算法的清单。

在第一章中我们介绍科学计算的一般思想和概念,第二章专讲误差分析。在这两章以及其余章节中,我们都侧重讲述在算法设计上比较重要的方面。与头两章的一般概括性叙述风格不同,本书其余部分主要是研究各类问题。

本书与瑞典文版本最重大的差别是增添了许多练习题,采用的是 Nils Hagander 和 Yngve Sundbald 编写的瑞典文习题集中的材料。对他们的慷慨谨表衷心的感谢。7.7 节的多元函数和 10.5 节的非线性最优化,这些都是新增添的内容。有关非线性方程的各节已经全面修订。对偏微分方程,除差分方法外,我们还引进了新的算法。此外,本书的材料,特别是线代数一章,已作了

全面现代化处理。图算法(诺模图)一章, 以及一些次要的细节已略去。

在与同事们的相互促进的讨论中, 我们获得很大的教益。特别要提到的是Peter Pohl, Håkan Ramsin, 和TRV(瑞典电视与无线电教育委员会)小组。

我们要特别感谢我们的同事Ned Anderson, 他不但翻译了瑞典文原文, 还对许多地方的叙述作了改进。还要感谢Maja Anderson, 她打印了大部分手稿, 而Chrisfina Landing也打印了很大一部分手稿。对他们出色的协作和宝贵的帮助深表谢意。

我们还感谢美国和瑞典的出版家们的出色协作。已故教授George E. Forsythe 勉励我们翻译这本书, 使我们受到鼓舞。

最后, 我们还要感谢我们的家属, 感谢他们的帮助及鼓励, 以及当工作挤掉了他们大量的空闲时间时所表现的耐心。

Germund Dahlquist

Åke Björck

约 定

本书共十三章, 编号方法从目录上一目了然。引文“见 4.3.3 节”意指第四章 4.3.3 节。而“(4.3.5)”意指一个公式, 它可以在节号的第一个数字是 3 的诸节中找到。(例如, 公式(4.3.5)可在 4.3.3 节内找到。)在一个名字后接着用方括号括起来的数字, 例如Fröberg[7], 表示参见第十三章文献中的一本书。

除了一般公认的数学上的缩写与记号之外(例如, 见James 和James[38], pp. 467—471), 本书还采用以下记号

$\log x$	以 10 为底的对数
$\ln x$	自然对数
e^x 及 $\exp(x)$	均表示指数函数
$\sinh x, \cosh x$	双曲正弦, 双曲余弦
$\operatorname{sgn} x$	x 的符号, 见 3.1.2 节
$fl(x+y)$	浮点运算, 见 2.3.5 节
$\operatorname{tab}(f)$	列表算符, 见 4.1.1 节
$\operatorname{En}(f)$	见 4.3.1 节
$\ \cdot\ _p, \ \cdot\ _{p,w}$	范数及半范数, 见 4.1.3 与 5.5.2
$\{x_i\}_{i=0}^n$	记集合 $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$
$[a, b]$	闭区间 ($a \leq x \leq b$)
(a, b)	开区间 ($a < x < b$), 或者表示函数 a 与 b 的标量积
$\operatorname{int}(a, b, \dots, w)$	包含 $a, b, \dots, w$ 的最小区间
$k \leq i, j \leq n$	意为 $k \leq i \leq n$ 及 $k \leq j \leq n$

记号 $\approx, \ll, <, O, o$ 在 2.1.1 节中定义. 向量和矩阵用黑斜体字母印刷. A^T 与 x^T 分别表示矩阵 A 与向量 x 的转置. (A, B) 表示分块矩阵 (见 5.2 节). 用于线性代数的其它记号可在 5.2 节中找到. 差分与差分算子的记号, 例如 $\Delta^2 y_n, f[x_0, x_1, x_2], \delta^2 y$ 等可在第七章找到.

目 录

译者的话	1
英译本序	2
约定	3
第一章 数值计算的某些一般原理	1
1.1 引言	1
1.2 数值方法中的某些共同思想和概念	2
1.3 数值问题与算法	14
1.3.1 定义	14
1.3.2 递推公式; Horner 法则	16
1.3.3 数值不稳定性的一个例子	18
第二章 怎样得到和估计数值计算中的精确度	24
2.1 误差估计中的基本概念	24
2.1.1 引言	24
2.1.2 误差的来源	25
2.1.3 绝对误差与相对误差	26
2.1.4 舍入及截断	27
2.2 误差的传播	29
2.2.1 误差分析简例	29
2.2.2 误差传播的一般公式; 最大误差及标准误差	33
2.2.3 误差估计的实际应用	38
2.2.4 试验性摄动的用途	42
2.2.5 精度的自动控制	42
2.3 数系; 浮点及定点表示	48
2.3.1 定位系统	48
2.3.2 浮点及定点表示	49
2.3.3 浮动的小数点	50

2.3.4	固定的小数点	52
2.3.5	采用浮点算术运算作计算时的舍入误差	53
2.4	向后误差分析;条件数	59
2.4.1	向后误差分析	59
2.4.2	问题及算法的条件数	61
2.4.3	误差分析的几何说明	64
第三章	级数的数值应用	69
3.1	级数的初等应用	69
3.1.1	简单例子	69
3.1.2	余项的估计	71
3.1.3	幂级数	75
3.2	收敛的加速	82
3.2.1	慢收敛的交错级数	82
3.2.2	慢收敛的正项级数	83
3.2.3	加速收敛的其他简单方法	85
3.2.4	病态级数	86
3.2.5	发散级数的数值用途	87
第四章	函数逼近	93
4.1	逼近的基本概念	93
4.1.1	引言	93
4.1.2	函数空间的概念	96
4.1.3	范数及半范数	97
4.1.4	函数逼近作为函数空间中的几何问题	99
4.2	用最小二乘作函数逼近	101
4.2.1	问题的陈述	101
4.2.2	正交系	102
4.2.3	逼近问题的解	106
4.3	多项式	112
4.3.1	基本术语;Weierstrass 逼近定理	112
4.3.2	多项式的三角族	113
4.3.3	三角族及其在插值中的应用	114

4.3.4	等距插值及 Runge 现象	117
4.4	正交多项式及其应用	120
4.4.1	Tchebycheff 多项式	120
4.4.2	Tchebycheff 插值及光滑	123
4.4.3	正交多项式的一般理论	126
4.4.4	Legendre 多项式及 Gram 多项式	131
4.5	多项式逼近的补充研究	136
4.5.1	多项式用途的总结	136
4.5.2	关于 $E_n(f)$ 的某些不等式及其在线性泛函计算中的应用	140
4.5.3	最大值范数意义上的逼近	144
4.5.4	幂级数的减缩; 标准函数	146
4.5.5	最小二乘法在统计中的一些应用	147
4.6	样条函数	153
第五章	数值线性代数	159
5.1	引言	159
5.2	线性代数的基本概念	160
5.2.1	基本定义	160
5.2.2	分块矩阵	162
5.2.3	线性向量空间	163
5.2.4	特征值与相似变换	165
5.2.5	奇异值分解与广义逆	166
5.3	解线性方程组的直接法	170
5.3.1	三角形方程组	170
5.3.2	Gauss 消去法	171
5.3.3	选主元技巧	174
5.3.4	LU 分解	179
5.3.5	Gauss 消去法的紧凑方案	183
5.3.6	逆矩阵	185
5.4	特殊矩阵	189
5.4.1	对称正定矩阵	189
5.4.2	带状矩阵	192

5.4.3	大型线性方程组	196
5.4.4	其它稀疏矩阵	198
5.5	线性方程组的误差分析	203
5.5.1	一个病态的例子	204
5.5.2	向量及矩阵范数	205
5.5.3	扰动分析	206
5.5.4	Gauss 消去法的舍入误差	208
5.5.5	线性方程组的比例因子	212
5.5.6	解的迭代改进	213
5.6	迭代法	221
5.7	超定线性方程组	230
5.7.1	法方程	231
5.7.2	正交化方法	236
5.7.3	最小二乘解的改进	241
5.7.4	具有线性约束的最小二乘问题	242
5.8	特征值及特征向量的计算	244
5.8.1	幂法	247
5.8.2	基于相似变换的方法	249
5.8.3	解方程求特征值法	253
5.8.4	QR 算法	255
第六章	非线性方程	257
6.1	引言	257
6.2	初始近似值; 起步方法	258
6.2.1	引言	258
6.2.2	分半方法	259
6.3	Newton-Raphson 方法	261
6.4	割线法	267
6.4.1	方法的描述	267
6.4.2	割线法的误差分析	269
6.4.3	试位法	270
6.4.4	其他有关方法	271

6.5	迭代法的一般理论	274
6.6	迭代法的误差估计及可达到的精度	280
6.6.1	误差估计	280
6.6.2	可达到的精度; 迭代终止判别	282
6.7	重根	285
6.8	代数方程	286
6.8.1	引言	286
6.8.2	紧缩法	289
6.8.3	病态代数方程	290
6.9	非线性方程组	292
6.9.1	迭代法	293
6.9.2	Newton-Raphson方法及某些修正	294
6.9.3	其他方法	296
第七章	有限差分及其在数值积分、微分以及 插值方面的应用	300
7.1	差分算子及其最简单的性质	300
7.2	推导近似公式及误差估计的简单方法	310
7.2.1	问题的陈述及某些典型例子	310
7.2.2	重复的 Richardson 外推法	317
7.3	插值	324
7.3.1	引言	324
7.3.2	什么时候线性插值就足够了?	325
7.3.3	Newton的一般插值公式	326
7.3.4	等距插值公式	329
7.3.5	关于插值法的补充说明	332
7.3.6	Lagrange 插值公式	335
7.3.7	Hermite 插值	336
7.3.8	反插值法	337
7.4	数值积分	342
7.4.1	矩形法则, 梯形法则和 Romberg 方法	343
7.4.2	梯形公式的截断误差	347

7.4.3	数值积分中的某些困难及可能性	347
7.4.4	Euler-Maclaurin求积公式	352
7.4.5	Euler-Maclaurin公式的用途	355
7.4.6	数值积分的其他方法	358
7.5	数值微分	361
7.6	算子的运算	369
7.6.1	算子代数	369
7.6.2	算子级数及其应用	371
7.7	多变量函数	378
7.7.1	一次用一个变量计算	379
7.7.2	矩形网格点	380
7.7.3	不规则三角形网格点	384
第八章	微分方程	392
8.1	理论背景	392
8.1.1	常微分方程的初值问题	392
8.1.2	误差传播	395
8.1.3	其它微分方程问题	400
8.2	Euler方法; 重复的 Richardson 外推法	401
8.3	常微分方程初值问题的其它方法	405
8.3.1	改进的中点公式	405
8.3.2	幂级数方法	409
8.3.3	Runge-Kutta方法	410
8.3.4	隐式方法	412
8.3.5	Stiff 问题	414
8.3.6	步长控制	416
8.3.7	二阶方程的有限差分法	418
8.4	常微分方程边值问题及特征值问题的概况	425
8.4.1	引言	425
8.4.2	打靶法	426
8.4.3	带状矩阵法	428
8.4.4	特征值问题的数值例子	431

8.5	差分方程	435
8.5.1	常系数齐次线性差分方程	436
8.5.2	一般线性差分方程	439
8.5.3	以试验问题分析数值方法	441
8.5.4	线性多步法	444
8.6	偏微分方程	454
8.6.1	引言	454
8.6.2	初值问题的例子	455
8.6.3	边值问题的例子	461
8.6.4	待定系数法及变分方法	464
8.6.5	有限元方法	468
8.6.6	积分方程	470
第九章	Fourier 方法	480
9.1	引言	480
9.2	Fourier分析的基本公式和定理	482
9.2.1	单变量函数	482
9.2.2	多变量函数	488
9.3	快速Fourier分析	490
9.3.1	一个重要的特殊情况	490
9.3.2	快速Fourier分析,一般情况	492
9.4	非周期函数的周期延拓	495
9.5	Fourier积分定理	498
第十章	最优化	502
10.1	问题的陈述,定义,及标准形	502
10.2	单纯形方法	506
10.3	对偶性	516
10.4	运输问题与某些其它优化问题	518
10.5	非线性最优化问题	520
10.5.1	基本概念和介绍性的例子	520
10.5.2	线寻查	523

10.5.3	无约束优化的算法	524
10.5.4	超定非线性方程组	526
10.5.5	约束优化	528
第十一章	Monte Carlo 方法	532
11.1	引言	532
11.2	随机数字和随机数	533
11.3	应用;方差的缩减	540
11.4	伪随机数	549
第十二章	习题解答	552
第十三章	文献目录和已发表的算法	661
13.1	引言	661
13.2	数值分析的一般文献	661
13.3	数表,公式集,和习题	665
13.4	误差分析及函数逼近	667
13.5	线性代数和非线性方程组	669
13.6	插值,数值积分及微分方程数值处理	673
13.7	最优化;模拟	676
13.8	评论、文摘及别的期刊	679
13.9	对已发表的算法评介	681
	1960~1970年按课题分类的算法索引	682

第一章

数值计算的某些一般原理

1.1 引言

数学以各种形式应用于科学和工业的大多数领域中。数学与科学技术一向有着密切的相互影响。在本世纪，先进的数学模型与方法甚至也愈来愈多地在其它领域，例如医学、经济学和社会科学中，得到应用。

实际应用中所导致的数学问题，其完备的形式往往不能方便地用精确公式来求解。于是，人们就局限于讨论问题的特殊情形或简化了的模型，它们能够精确地加以分析。因此，在大多数情形下，人们把要研究的问题简化成线性问题——例如，简化成线性微分方程。这种处理方法可以是很有效的，并且往往会导出一些概念和观点，它们至少在定性上可用于分析未简化的问题。

然而，上述的处理方法有时不能满足要求。相反，人们可以用大量数值计算来处理较少简化的问题。计算量的大小依赖于所需的精度。由于计算机在过去二十五年中有了很大的发展，这就大大地增加了利用数值方法的可能性。人们对数值方法的看法也随之改变。

发展一种数值方法，大多数场合下指的是，应用少量而又相对简单的思想。人们把这些思想创造性地互相结合起来，并且与来自其它途径与所研究的问题有关的知识，例如与数学分析的方法结合起来。与问题背景有关的一些知识也很有用，其中应当考虑

到问题中某些数值数据的数量级.

在本书中, 我们将举例说明在某些问题的数值方法背后的一般思想的用途. 这些问题往往是作为较大问题的子问题或计算的细节而出现的. 一般而言, 他们实际上比本书中叙述的规模要大些, 形式上也没有这么单纯. 当我们提出和分析一些数值方法时, 我们程度不同地利用上面最初叙述过的处理方法: 先详细地研究特殊情形和简化了的情形, 目的是揭示更一般的可适用的概念和观点, 以便作为解决较难问题的指南.

在这一章中, 我们将简要地阐明一些重要的思想和问题. 更系统的论述放在以后各章中.

1.2 数值方法中的某些共同思想和概念

在数值方法中最经常出现的思想之一就是迭代法 (英文是 iteration, 它来源于拉丁文 iteratio, 意思是“重复”) 或逐次逼近法. 广义地说: 迭代是指一种行为或过程的模式的重复. 例如, 这种意义下的迭代出现在为了逐次改进前面的结果而重复应用一个数值过程, 它可以是非常复杂的且本身就包含了许多在下面要介绍的在较窄意义上使用迭代的例子. 为了说明迭代思想的更为具体的运用, 研究一个形如

$$x = F(x) \quad (1.2.1)$$

的方程的求解问题. 这里 $F(x)$ 是可微函数, 对在某个区间内给定的任何实变数 x 我们能够计算出 $F(x)$ 的值. 在利用迭代法时, 总是从某个初始近似值 x_0 出发, 并计算出序列

$$x_1 = F(x_0), \quad x_2 = F(x_1), \quad x_3 = F(x_2), \dots \quad (1.2.2)$$

每个型如

$$x_{n+1} = F(x_n)$$

的计算称为一次迭代. 若序列 $\{x_n\}$ 收敛于一个极限值 α , 则我们