面向21世纪课程教材

Textbook Series for 21st Century

计算机数值方法

第三版

施吉林　刘淑珍　陈桂芝　编

高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

面 向 2 1 世 纪 课 程 教 材
Textbook Series for 21st Century

计算机数值方法

第三版

施吉林　刘淑珍　陈桂芝　编

高 等 教 育 出 版 社
HIGHER EDUCATION PRESS

内容提要

本书是普通高等教育“十一五”国家级规划教材，第一版是普通高等教育“九五”国家级重点教材及面向21世纪课程教材。为适应现代计算机技术发展和变化的需要，本书在保留第二版的体系和风格的基础上，作了适当的修改和增删，增加了广义积分和求矩阵特征值的QR法，适当调整了实验和习题的内容，并对第二版中叙述和表达不妥之处进行了更正和修改。本书主要介绍计算机上求解各种数值问题的常用基本数值方法及其算法设计，包括解线性方程组的直接法，插值与最小二乘法，数值积分与微分（包括广义积分），常微分方程数值解法，逐次逼近法（包括求线性、非线性方程和矩阵特征对的数值方法）等，内容与计算机的使用密切结合。

本书可作为高等学校理工科非数学类专业计算方法课程的教材，也可作为工科专业硕士研究生的教材或教学参考书，并可供从事科学计算的科技工作者参考。

图书在版编目（CIP）数据

计算机数值方法/施吉林，刘淑珍，陈桂芝编．—3版．
北京：高等教育出版社，2009.4
ISBN 978-7-04-026126-4

Ⅰ．计…　Ⅱ．①施…②刘…③陈…　Ⅲ．电子计算机－数值计算－高等学校－教材　Ⅳ．TP301.6

中国版本图书馆CIP数据核字（2009）第032203号

策划编辑	于丽娜	**责任编辑**	李华英	**封面设计**	张　楠
责任绘图	吴文信	**版式设计**	张　岚	**责任校对**	张　颖
责任印制	宋克学				

出版发行	高等教育出版社	**购书热线**	010-58581118
社　　址	北京市西城区德外大街4号	**免费咨询**	400-810-0598
邮政编码	100120	**网　　址**	http://www.hep.edu.cn
总　　机	010-58581000		http://www.hep.com.cn
		网上订购	http://www.landraco.com
经　　销	蓝色畅想图书发行有限公司		http://www.landraco.com.cn
印　　刷	北京新华印刷厂	**畅想教育**	http://www.widedu.com
		版　　次	1999年6月第1版
开　　本	787×960　1/16		2009年4月第3版
印　　张	19.5	**印　　次**	2009年4月第1次印刷
字　　数	360 000	**定　　价**	23.20元

物料号　26126-00

第三版前言

本书自1999年出版第一版以来，被多所高校广泛采用，现已被列入普通高等教育“十一五”国家级规划教材。随着教学形势和环境的不断变化，在数值方法课程教学中，基础性的算法与编程正在被数学软件平台所替代，常用数值方法的范围和内容在不断扩大，多媒体教学的使用也越来越广泛。据此，综合第二版使用中发现的问题和不足，本书除保留原有体系和风格外，主要作了如下几方面的修改和增删：

一、适当扩充了数值方法的内容，增加了计算特征值的QR法和广义积分的数值方法等，并对数值方法中的工具性内容，如矩阵分解、正交多项式等作了调整和补充；精简了Gauss消去法的内容，并删去了逆矩阵计算和最小二乘法算法设计的大部分内容；由于内容和方法的增删和调整，对习题和实验也作了相应的调整和增删。

二、统一了每章最后的评注，并命名为“内容与方法评注”，主要评注本章可涉及但由于各种原因而未介绍的内容与方法；尽可能介绍本章内容的基础性研究现状和某些主要研究方向，并提供该方面的部分参考资料目录。

三、对教材在使用中发现的错误和不妥之处作了修改和更正，对内容的不协调之处作了适当的调整。

四、根据部分教材使用者的意见，将进一步制作并陆续提供本教材配套的电子课件，以满足使用者的教学需要。

本书由施吉林、陈桂芝主编，由施吉林、刘淑珍（大连理工大学）、陈桂芝（厦门大学）编写。作者对大连理工大学教务处和数学系、厦门大学数学科学学院有关领导和同志对本书出版的大力支持，表示衷心的感谢；对高等教育出版社高等理工出版中心数学分社有关同志的大力支持和辛勤劳动，表示诚挚的感谢。

作者于大连

2008年8月

第二版前言

本教材自1999年由高等教育出版社出版至今已有五年多,发行量达六万余册,并于2001年获中国高校科学技术二等奖,受到国内使用者的欢迎。但是数值计算与计算机软、硬件的发展密切相关,五年多来数学软件有了很快的发展与普及,特别是算法语言在多方面的突破:在语言上已从单纯的可执行文件发展到可执行文件与解释系统并存;在功能上从单纯的数值计算发展到数值计算与符号运算并存;特别是有些语言已取消了对变量说明和内存分配等要求,淡化了算法设计的时、空复杂性要求。程序设计方法也由面向过程为主的设计方法发展到面向对象的设计方法。算法语言的多样性、功能的扩充以及程序设计方法的发展和变化都给使用者带来了更多的方便,同时也为精简算法设计创造了条件,有些数学软件包已达到可以取消书面算法了。但是对于实时控制、计算机识别等计算程序,对时、空复杂性的要求还是很高的,不少流行的数学软件包还很难达到要求。针对这些变化与发展,以及目前的需求和授课学时紧张等矛盾,本书除保留原有体系和基本内容外,作了相应的修改和精简。

一、对算法设计进行了如下几个方面的修改:(1) 精简与计算机语言有关的浮点运算、工作单元分配,以及算法设计中技术性较高的节省时间、空间的计算细节;(2) 算法表达法中删去了数值计算工作者不常用的结构化框图,加强了使用高级语言的语句形式表达,如 for, if…else, while 等语句,这种表达形式不但表达简单易读,而且便于编码;(3) 对算法设计进行了全书统一调整,使表达式的符号与下标尽量与正文一致,对简单计算公式,一般不作详细的算法设计,这样处理不但有利于学员掌握算法的本质,节省授课学时,而且还可以充分发挥不同语言的作用;(4) 基于算法语言功能的强化与便捷,我们对原有的算法设计做了适当的删减。

二、本课程与使用计算机密切相关,这也是它与以往计算方法的区别之一。因此,在学习本课程的同时应强调上机实习。为此,新版本增加了"数值实验"附录,以便任课教师根据课程的学时和具体条件灵活安排和使用。

三、对第一版中的各种错误,以及叙述和表达中的不妥之处进行更正和修改,但还有可能遗留,诚请使用本书的教师、学员和广大读者批评指正。

大连理工大学使用本书的师生,在使用过程中提出了不少宝贵的修改意见;高等教育出版社理科分社的有关同志为本书的再版付出了辛勤的劳动,我们在此一并表示衷心的感谢。

编者

2004年8月

第一版前言

《计算机数值方法》是为高等院校理工科非数学类专业编写的“计算方法”(或称数值分析)课程教材。本书主要介绍计算机上的常用数值方法及其算法设计。内容包括代数、微积分和常微分方程等方面的主要数值方法与算法,以及数值软件方面的基本概念和算法设计基础。本书具有如下特点:1. 体系较以往的《计算方法》有所不同,它以各类数值问题间的内在联系为主线,介绍数值方法的结构,揭示方法之间的关系,使计算方法在体系上更加系统化,脉络清晰、简洁,便于教学和学生掌握知识的规律;2. 内容与以往的计算方法教材相比较,在方法的描述上,力求突出方法在计算机上实现的特点,并增加了算法设计的内容。书中对各章主要方法都给出了算法设计,并用自然语言或图示法(也有两者兼用)表达算法,从而使读者学习了数值方法后,不但能加深对方法的理解,更容易进行程序设计,为使用计算机解决数值问题打下良好的基础。在内容的取材上,以实用、常用的基本方法为主,力求少而精,使读者能用较少的学时掌握计算方法的基本理论和方法。据我们的教学实践,40 学时左右可以讲完本书的绝大部分内容(算法设计部分采取重点讲解与学生阅读相结合的方式),带(*)的内容是供选择的。各章配有一定数量的习题,并在书后附有答案,其中有可供计算实习选用的习题。

本教材由施吉林、刘淑珍主编,施吉林、刘淑珍、陈桂芝编写。教材的体系改革与内容选材是编者在多年从事计算方法教学和数值软件开发工作的基础上,结合理工科非数学专业的专业特点和今后发展的要求,经多次实践后形成,并广泛征求意见后定稿的。它体现了教改的成果,不但便于教学使用,而且对从事科学计算和数值软件开发工作者也有参考价值。

全书初稿得到熊西文教授的精心审校,并提出了许多宝贵的修改意见。在大连召开的《计算机数值方法》教材研讨会上,李庆杨教授以及与会的其他同志对本书的初稿提出了宝贵而中肯的意见,对我们有目的地对初稿进行修改,以及最后定稿都有极大的帮助,对此我们深表感谢。

我们非常感谢工科数学教学指导委员会负责同志马知恩、汪国强、王绵森教授和文小西先生对出版本书的大力支持。感谢施光燕教授、贾仲孝教授和大连理工大学应用数学系以及计算方法教研室的有关领导和同志对本教材出版的关心和支持。本书在高等教育出版社编辑室胡乃冏同志的辛勤和精心编校下出版,他为保证本书的出版质量起到了关键作用。本书的出

版还得到教育部、高等教育出版社和大连理工大学的关心、支持和资助，在此特表感谢。

由于水平所限，书中难免还会有错误、缺点和不足之处，恳请广大读者、同行和有关专家提出批评指正，以便于今后进一步修改。

目　　录

第一章　引论 …… 1
§1　计算机数值方法的研究对象与特点 …… 1
§2　数值方法的基本内容 …… 3
2－1　数值代数的基本工具与方法 …… 3
2－2　数值微积分的工具与方法 …… 6
2－3　计算机数值方法 …… 7
§3　数值算法及其设计 …… 8
3－1　算法设计 …… 10
3－2　算法表达法 …… 10
§4　误差分析简介 …… 14
4－1　误差的基本概念 …… 14
*4－2　浮点基本运算的误差 …… 20
4－3　数值方法的稳定性与算法设计原则 …… 23
内容与方法评注 …… 28
习题一 …… 29
第二章　解线性方程组的直接法 …… 31
§1　直接法与三角形方程组的求解 …… 31
§2　Gauss 列主元素消去法 …… 33
2－1　主元素的作用 …… 33
2－2　带有行交换的矩阵分解 …… 35
2－3　列主元消去法的算法设计 …… 37
§3　直接三角分解法 …… 40
3－1　基本的三角分解法 …… 40
3－2　部分选主元的 Doolittle 分解 …… 45
§4　平方根法 …… 50
4－1　对称正定矩阵的三角分解 …… 50
4－2　平方根法的数值稳定性 …… 53
§5　追赶法 …… 53
内容与方法评注 …… 58
习题二 …… 59
第三章　插值法与最小二乘法 …… 64
§1　插值法 …… 64

1-1 插值问题 …… 64
1-2 插值多项式的存在唯一性 …… 65
1-3 插值基函数及 Lagrange 插值 …… 65
§2 插值多项式中的误差 …… 67
2-1 插值余项 …… 67
2-2 高次插值多项式的问题 …… 69
§3 分段插值法 …… 70
3-1 分段线性 Lagrange 插值 …… 71
3-2 分段二次 Lagrange 插值 …… 72
§4 Newton 插值 …… 73
4-1 均差 …… 74
4-2 Newton 插值公式及其余项 …… 76
4-3 差分 …… 79
4-4 等距节点的 Newton 插值公式 …… 80
4-5 Newton 插值法算法设计 …… 83
§5 Hermite 插值 …… 85
5-1 两点三次 Hermite 插值 …… 85
5-2 插值多项式 $H_3(x)$ 的余项 …… 87
5-3 分段两点三次 Hermite 插值 …… 88
*5-4 一般 Hermite 插值 …… 90
§6 三次样条插值 …… 92
6-1 三次样条函数 …… 92
6-2 三次样条插值多项式 …… 93
6-3 三次样条插值多项式算法设计 …… 99
6-4 三次样条插值函数的收敛性 …… 102
§7 数据拟合的最小二乘法 …… 103
7-1 最小二乘法的基本概念 …… 103
7-2 法方程组 …… 104
7-3 利用正交多项式作最小二乘拟合 …… 109
内容与方法评注 …… 115
习题三 …… 116
第四章 数值积分与微分 …… 121
§1 Newton-Cotes 公式 …… 121
1-1 插值型求积公式及 Cotes 系数 …… 121
1-2 低阶 Newton-Cotes 公式的余项 …… 124
1-3 Newton-Cotes 公式的稳定性 …… 126
§2 复合求积法 …… 127

2－1　复合求积公式 …… 127
2－2　复合求积公式的余项及收敛的阶 …… 128
2－3　步长的自动选择 …… 129
2－4　复合 Simpson 求积的算法设计 …… 131
§3　Romberg 算法 …… 133
3－1　复合梯形公式的递推化 …… 133
3－2　外推加速公式 …… 135
3－3　Romberg 算法设计 …… 138
§4　Gauss 求积法 …… 139
4－1　Gauss 点 …… 139
4－2　基于 Hermite 插值的 Gauss 型求积公式 …… 140
4－3　Gauss 型求积公式的数值稳定性 …… 148
*§5　广义积分的数值方法 …… 148
§6　数值微分 …… 152
6－1　插值型求导公式 …… 152
6－2　样条求导公式 …… 157
内容与方法评注 …… 159
习题四 …… 160
第五章　常微分方程数值解法 …… 164
§1　引言 …… 164
1－1　基于数值微分的求解公式 …… 165
1－2　截断误差 …… 169
1－3　基于数值积分的求解公式 …… 170
§2　Runge－Kutta 法 …… 174
2－1　Runge－Kutta 法 …… 174
2－2　四阶 Runge－Kutta 算法 …… 180
§3　线性多步法 …… 182
3－1　开型求解公式 …… 182
3－2　闭型求解公式 …… 184
§4　常微分方程数值解法的进一步讨论 …… 187
*4－1　单步法的收敛性与稳定性 …… 187
4－2　常微分方程组与高阶常微分方程的数值解法 …… 189
4－3　边值问题的数值解法 …… 192
内容与方法评注 …… 195
习题五 …… 197
第六章　逐次逼近法 …… 200
§1　基本概念 …… 200

1－1 向量与矩阵的范数 …… 200
1－2 误差分析介绍 …… 205
§2 解线性方程组的迭代法 …… 209
2－1 简单迭代法 …… 210
2－2 迭代法的收敛性 …… 216
§3 非线性方程的迭代解法 …… 221
3－1 简单迭代法 …… 222
3－2 Newton 迭代法及其变形 …… 226
3－3 Newton 迭代算法 …… 231
3－4 多根区间上的逐次逼近法 …… 232
§4 计算矩阵特征值问题 …… 235
4－1 求代数方程根的方法 …… 235
4－2 幂法 …… 237
4－3 反幂法 …… 242
4－4 反幂算法 …… 244
4－5 求矩阵特征值的 QR 法 …… 245
§5 迭代法的加速 …… 250
5－1 基本迭代法的加速(SOR 法及其算法) …… 250
5－2 Aitken 加速 …… 253
内容与方法评注 …… 257
习题六 …… 258
部分习题答案 …… 265
附录 数值实验 …… 277
英汉人名对照表 …… 294
参考书目 …… 295

第一章　引　　论

§1　计算机数值方法的研究对象与特点

计算机的飞速发展,正在日益影响着人们对传统数值分析(即计算方法)的认识.近几十年来,人们越来越认识到计算方法的学习与研究离不开计算机,仅靠数学理论的演绎和推导还不能完整地解决实际中的数值问题,只有与计算机科学相结合,才能研制出实用的好算法.而且好的算法必须变成数值软件后才有可能为社会创造更大的财富.实践证明,计算方法正在日趋明显地成为数学与计算机科学的交叉性学科.科学计算已和理论计算、实验并列为三大科学方法.

数学与计算机科学的密切关系,历史已做了回答,可以说计算机科学是吸吮着数学的乳汁而成长起来的.德国数学家 Leibniz 在研究组合数学时发现的二进制编码是电子计算机诞生的基础;Von Neumann 提出了用流程图描述计算机运行过程后,软件的开发研究才得以发展和遍地开花;流行一时的结构化程序设计也是 Bohm 和 Jacopini 证明的一条数学原理"任何单入口和单出口,且没有'死循环'的程序,都能由三种最基本的控制结构构造出来"的产物,当前流行的面向对象程序设计也与代数学密切相关.另一方面,计算机的诞生和发展,给数学增加了新的血液,对数学的发展产生了不可估量的影响.借助于计算机可以证明玄妙的数学定理、揭示某些数学规律,以及求解许多原来令人一筹莫展的数学模型问题;由于并行计算机的诞生和发展,促使数学工作者去研究适应新一代计算机发展需要的算法——并行算法.总之,计算机科学的发展,可以使数学上灵活的推演和运算变成遵循某种规律的算法设计,从而为发展数值软件奠定了基础.因此,计算方法也得到更快发展,大量适合计算机求解的现代数值方法随之产生,并被广泛使用,成为当代科学计算的主要方法.

使用传统的计算方法解决实际问题,不但要求使用者具有一定的数学修养,而且还应具有相当的编程能力,因而使计算方法的广泛应用受到了影响.为解决这些问题,科学计算工作者经过长时间努力,将数值方法设计成算法,进而编制成数值软件,并逐步形成数值软件产业,为广大用户打开了方便之门.当今,已有不少集各种数值算法和符号演算于一体的综合数学软件包,如在国内外广为流行的 Mathematica,Matlab,Maple 等,它们已成为科技工作者、

工程技术人员不可缺少的工具.

数学软件的开发技术还在不断发展,目前流行着两种软件开发方法:一是面向过程的“自顶向下,逐步细化”的结构化方法;二是面向对象的“自下向上”的组装式开发方法,其主要工具是“类”——一种特殊模块,由它可组装成数值算法和求解程序.虽然后者是最近发展起来的开发技术,但是,由于它编程简便,使用方便,已成为当前软件开发技术的主流.

数学软件包的引进与开发,给工程技术人员使用数值方法求解各种数值问题带来了极大的方便.但是,如果工程技术人员仅知道如何使用这些数学软件,一旦出现问题就难于解决;再者,有不少工程技术人员需要结合各自的具体需求灵活使用软件包,或者自己设计专用算法.因此,虽然有了各种软件包,工程技术人员掌握数值方法和算法设计基础还是很有必要的,这可以使他们真正成为使用数学软件包的“主人”.为此,我们编写了《计算机数值方法》,为即将走上工作岗位从事工程技术和科学教育工作的大学生打下使用计算机解决数值问题的基础.本教程不追求完美的数学演绎、论证以及详尽的公式推导,也不以数学课程的类别为序来讲述数值方法,而尽量以数值方法间的内在联系为主线,着重介绍数值方法及它们之间的关系与结构,力求少而精,使读者用较少的学时能对一般常用数值方法有较多的了解与掌握,并为进一步研究新算法奠定基础.

本书的内容包括如下三个方面:

(1) 数值方法的基本内容:将微积分与代数中的数学问题化成数值问题,并进行简化后形成数值方法,数值问题简化的目标有两个:其一,使它成为计算目标的最简单形式;其二,便于在计算机上计算.为此,我们将在后面逐步详细介绍简化的方法、策略与工具.本书介绍的数值方法是计算机上的常用方法,也是本书讨论的主要内容.

(2) 算法及其设计:为缩小数值方法与程序设计间的距离,还须研究算法及其设计.通过对一些有代表性的算法设计介绍,使读者了解数值方法与算法之间的关系与差别,初步掌握算法设计技术,为使用计算机求解数学模型问题架好桥梁;通过课堂教学与数值实验,使读者尽可能多地了解算法设计与程序设计之间的关系,进而培养用计算机解决实际问题的技能.

(3) 误差分析简介:由于所属的运算一般均要求在计算机上能实现,故无论是数学模型的数值化,还是数的计算机表示和运算,它们均会出现误差,从而需要研究两大问题:其一,数值问题对误差的敏感性及其度量与判别;其二,算法出现的误差在运算过程中能否得到控制等.即问题的性态与算法的稳定性研究.由于学时有限,对误差分析的内容仅作概念性和结论性的介绍.

以计算机为工具来求解各种数学模型,无论使用何种方法,均需要经历三

个中间过程：总体设计（模型的细化等）、详细设计（主要为算法设计）和程序设计等. 计算机数值方法主要是研究将数学模型变成数值问题，并研究求解数值问题的数值方法，进而设计数值算法. 它承上启下，并与计算机科学密切相关，但是由于教学时数的限制，本教程只能偏重于介绍微积分、线性代数与微分方程等方面的数值方法. 对于算法的稳定性、计算复杂性（即时、空复杂度）和软件工程中对算法设计的要求等问题只做一般性介绍，详细内容见[11]. 对于程序设计、上机测试和调试等解题过程，及其相关内容，在数值实验中将有所体现.

根据教材的研究对象和特点等要求，在学习本教程前应掌握微积分、线性代数、微分方程等课程的基本内容，以及计算机的基本操作.

§2　数值方法的基本内容

通常将解决实际问题时应用有关科学知识和数学理论建立数学模型的过程，归属于应用数学范围. 将数学模型问题变成数值问题，进而研究求解数值问题的数值方法，并设计行之有效的数值算法的过程，归属于计算方法的范围. 但是，在解决实际问题时，两者之间的范围和任务有时很难区分，因此，数学界有时将传统的计算方法和应用数学统称为应用数学问题.

我们将求解"数值问题"的系列计算公式称为数值方法，也称为计算方法. 所谓"数值问题"是指"输入数据与输出数据之间函数关系的一个确定而无歧义的描述"；"计算机数值方法"是指它的系列计算公式中的运算与数据，必须是计算机上可执行的运算和数据.

"数值问题"主要可分三大类型：即"分析问题"（连续问题）、"代数问题"（离散问题）、"概率与统计问题"（随机问题）. 本书主要介绍解前两类问题的"数值方法". 设计解这两类问题的策略均为先将问题的计算对象简化，然后设计简化后的问题的数值方法. 为此，先介绍数值问题的简化方法，即将问题先化成便于在计算机上运算的数值问题.

2－1　数值代数的基本工具与方法

代数问题又分线性问题与非线性问题，本书介绍其中的线性方程组求解与矩阵计算、函数方程求根以及矩阵特征对的计算，后者既是非线性问题，又是线性问题.

一、矩阵化简的三种基本工具

（一）初等变换与 LU 分解

在线性代数中我们学过线性方程组

$$Ax=b,\qquad \text{其中 } A\in \mathbf{R}^{n\times n}, b\in \mathbf{R}^{n} \tag{2.1}$$

的求解. 类似于多项式方程

$$a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0=0$$

求根,先将它进行因式分解,分解成便于求根的简单因式,然后求解. 在分解过程中必须保证方程的解不变,即简单因式的解都是原方程的解.

对于求解(2.1)也一样,我们可先将矩阵 A 进行分解,分解成便于运算的"因式矩阵". 在矩阵分解的过程中应注意保证方程组(2.1)的解不变. 在线性代数中已学过方程组经初等变换后其解不变,即方程组(2.1)的两边乘上初等矩阵 L 后其解不变.

设 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm T}\in\mathbf{R}^n$ 且 $x_i\neq 0$,令

$$l_{ji}=x_j/x_i,\quad j=i+1,i+2,\cdots,n,$$

$$L_i=I-l_ie_i^{\mathrm T}, \tag{2.2}$$

其中 I 为单位矩阵,$e_i^{\mathrm T}=(0,\cdots,0,1,0,\cdots,0)$,

$$l_i=(0,\cdots,0,l_{i+1,i},l_{i+2,i},\cdots,l_{ni})^{\mathrm T},$$

则 L_i 就是线性代数中的初等矩阵.

例如,取 $n=4,i=2$,则

$$\begin{aligned}L_2&=I_4-l_2e_2^{\mathrm T}\\&=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&l_{32}&0&0\\0&l_{42}&0&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&-l_{32}&1&0\\0&-l_{42}&0&1\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

容易验证

$$\begin{aligned}L_ix&=(I-l_ie_i^{\mathrm T})x=x-x_il_i\\&=(x_1,x_2,\cdots,x_i,0,\cdots,0)^{\mathrm T},\end{aligned}$$

从而可得

$$\begin{aligned}L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1A&=\overline{L}A=U\\&=\begin{pmatrix}r_{11}&r_{12}&r_{13}&\cdots&r_{1n}\\0&r_{22}&r_{23}&\cdots&r_{2n}\\0&0&r_{33}&\cdots&r_{3n}\\\vdots&\vdots&\ddots&\ddots&\vdots\\0&0&\cdots&0&r_{nn}\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

令 $L=\overline{L}^{-1}=(L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1)^{-1}=L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1}$,即得矩阵的 LU 分解

$$A=LU, \tag{2.3}$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 为单位下三角形矩阵，$\boldsymbol{U}$ 为上三角形矩阵.

此时求解(2.1)变成求方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{LUx}=\boldsymbol{b}$ 的解，对(2.1)的求解就变成求两个三角形方程组的解

$$\begin{cases}\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b},\\ \boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y}.\end{cases} \tag{2.4}$$

(二) Givens 变换与 Householder 变换

若

$$\boldsymbol{PAP}^{-1}=\boldsymbol{B},\quad \det(\boldsymbol{P})\neq 0, \tag{2.5}$$

则 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 有相同的特征值. 因此求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值时，总是设法用相似变换将 $\boldsymbol{A}$ 变成容易求特征值的矩阵 $\boldsymbol{B}$，然后计算 $\boldsymbol{B}$ 的特征值. 从相似变换(2.5)可知，求相似变换，不但要知道变换 $\boldsymbol{P}$，而且还要求出 $\boldsymbol{P}$ 的逆变换 $\boldsymbol{P}^{-1}$；对于一般矩阵的逆矩阵也是不易求得的. 故我们必须选取易求逆的变换，而正交变换 $\boldsymbol{Q}$ 的逆变换 $\boldsymbol{Q}^{-1}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$ 容易求得.

Givens 变换 $\boldsymbol{J}(i,R,\theta)$（详见第六章(4.21)）和 Householder 变换

$$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{\omega}\in\mathbf{R}^{n}\text{ 且 }\|\boldsymbol{\omega}\|_2=1$$

正好具有所要求功能的正交变换，经过这两种变换后，可使求矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的特征值比求 $\boldsymbol{A}$ 的特征值简单. 但是将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 化成对角矩阵 $\overline{\boldsymbol{B}}$（对角线上的元素即为特征值），对于一般矩阵是不可能的，但是对于对称矩阵等特殊矩阵是有可能做到的. 这是因为求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值就是求特征方程 $\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=0$ 的根，而一般五次及以上的代数方程没有一般求根公式，即无法通过有限次四则运算求出它的精确根，实际上矩阵求特征值与多项式方程求根是贯通的，求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值即为求代数方程 $\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=0$ 的根，而求代数方程 $x^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0=0$ 的根，可以通过它的友矩阵

$$\boldsymbol{A}_n=\begin{pmatrix}-a_{n-1} & -a_{n-2} & \cdots & -a_1 & -a_0\\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0\end{pmatrix}$$

化为求 $\boldsymbol{A}_n$ 的特征值，因为 $\boldsymbol{A}_n$ 的特征方程 $\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}_n)=0$，即为代数方程

$$x^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0=0.$$

实矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{n\times n}$，通过一系列的正交变换 $\boldsymbol{Q}$ 可化成上三角形矩阵 $\boldsymbol{R}$，即

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}, \tag{2.6}$$

其中 $\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵，$\boldsymbol{R}$ 为上三角形矩阵，矩阵的这种分解称 QR 分解.

在此必须注意 $\boldsymbol{RQ}=\overline{\boldsymbol{A}}$ 就不一定是上三角形矩阵，但 $\overline{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{RQ}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AQ}$，即 $\overline{\boldsymbol{A}}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 有相同的特征值.

二、直接法与迭代法

由于一般的函数方程

$$f(x)=0 \tag{2.7}$$

没有一般求根公式，但是有方法算出或估出它的近似根，那么可否使近似根越来越接近精确根呢？这就是形成“迭代法”的设想. 由于求矩阵特征值和求函数方程的根具有共同的特性，无法通过有限次运算求出它们的精确结果，故求解这些问题的有效方法为逐次逼近法，也可称为迭代法.

对于线性方程组的求解，从前面可以看到，经过有限次四则运算可以求出方程组的精确解，此法我们称为直接法. 但是从求解中也可以看出它的时、空复杂度较高，故对于大型方程组，特别是大型稀疏方程组会碰到困难，而迭代法有可能克服这些困难. 而且线性方程组通过变分还可以化成非线性问题，因此，迭代法也适用于解线性问题.

2－2 数值微积分的工具与方法

数值微积分主要是研究函数在计算机上进行微分、积分、微分方程求解的运算，而微分方程的求解也可归为微分与积分运算. 因此，数值微积分的主要运算是微分与积分演算①的数值化，但是对于一般函数的微分与积分演算不能在计算机上通过有限步运算得到它的精确解，因此，对于一般函数的微分与积分运算只有逐步接近精确值，这就是一种逐步逼近的方法.

多项式具有很多优点，特别它具有四方面的特点可作为数值微积分的工具：(1) 多项式的运算中都是四则运算，并可在计算机上执行；(2) 它的微分和原函数演算后仍为多项式；(3) 它可以逼近各种函数，而且还可以估算逼近的误差；(4) 它可以用别的多项式为基函数进行表达，特别可用正交多项式为基函数进行表达，从而可以简化求表达式系数的运算. 在数值微积分中，这些特点将分别发挥各自的作用. 故在数值微积分中我们采用多项式替代要运算的函数，然后对多项式进行有关数值运算. 用多项式逼近要运算函数的方法主要有插值法、数值逼近法和 Taylor 展开法等几种，对于具体运算中选用什么逼近方法，这要看问题的具体要求. 有些求解问题两种方法均可选用，因人而异.

正交多项式的正交性会给不少运算带来方便，它们将在最小二乘法和数值积分中大显“身手”.

---

① 为加深理解普通计算与数值计算的区别，特将前者称为演算，后者称为运算，后面将逐步取消此区分.