科学版

研究生教学丛书

现代数值分析方法

蔺小林　编著

科学出版社

科学版研究生教学丛书

现代数值分析方法

蔺小林　编著

科学出版社

内 容 简 介

本书主要介绍了现代数值分析的基本方法以及数值分析方法在电路系统中的一些应用. 本书内容比较全面, 系统性较强, 基本概念清晰准确, 语言叙述通俗易懂, 理论分析科学严谨, 结构编排由浅入深, 注重启发性, 易于教学. 前8章每章都附有一定数量的习题, 供读者学习时进行练习.

本书可作为高等院校各类工科专业研究生和数学与应用数学、信息与计算科学、计算机科学等专业的高年级本科生教材或参考用书, 也可供从事科学与工程计算的科技工作者参考.

图书在版编目(CIP)数据

现代数值分析方法/蔺小林编著. —北京: 科学出版社, 2014.6
(科学版研究生教学丛书)
ISBN 978-7-03-040824-2

Ⅰ. ①现… Ⅱ. ①蔺… Ⅲ. ①数值分析-研究生-教材 Ⅳ. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 115317 号

责任编辑: 王胡权 / 责任校对: 李 影
责任印制: 阎 磊 / 封面设计: 陈 敬

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

北京中新伟业印刷有限公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2014年6月第 一 版 开本: 720×1000 1/16
2014年6月第一次印刷 印张: 24 1/2
字数: 490 000

定价: 52.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前　言

随着现代科学技术飞速发展，科学与工程计算成为科学实践的重要手段之一，其应用范围已经渗透到所有科学活动领域之中. 作为科学与工程计算的数学工具，数值分析方法已成为各高等院校工科硕士研究生的学位公共必修课和数学与应用数学、信息与计算科学、计算机科学等本科生的专业基础课.

本书系统地介绍了现代科学与工程计算中常用的数值分析方法以及这些方法在电路系统中的一些应用，对这些数值计算方法的基本理论、计算效果、稳定性、收敛效果、适用范围以及优劣性与特点等进行了比较详细的分析. 本书基本内容包括引论、线性代数方程组数值方法、非线性方程 (组) 数值方法、函数插值、函数逼近、矩阵特征值与特征向量的数值算法、数值积分及数值微分、常微分方程的数值解法以及电路方程的数值方法等.

本书内容比较全面，系统性较强. 各章内容既有相互联系，也有一定的独立性，教学过程中对内容的选择具有一定的灵活性，易于教学. 本书基本概念清晰准确，语言叙述通俗易懂. 作者长期从事数值分析的教学与研究工作，具有比较丰富的教学经验，对学生的知识层次和学习数值分析中会遇到的困难比较了解，在编写的过程中，尽量从涉及高等数学和线性代数的相关内容出发，在对问题的叙述和分析时，尽量使语言简单明了，通俗易懂. 本书理论分析科学严谨，结构编排由浅入深. 对传统的数值分析方法，在理论分析时注重启发性和科学严谨性，对新编入的电路方程数值分析方法，既考虑电路系统的知识体系，又有机地结合传统数值分析方法，以新的视角来分析电路方程. 在内容选择与安排上由浅入深，易于学生学习，例题选择具有针对性，注重实际应用效果. 本书前 8 章每章都附有一定数量的习题，供读者学习时进行练习，书后附有部分习题的解答或参考答案.

本书全部讲完需要 60 学时左右，教师可根据学习者的情况及实际学时，有选择地讲解部分内容.

本书在编写过程中受到陕西科技大学研究生院精品教材建设项目支持，科学出版社的有关同志对本书的出版也付出了辛勤的劳动，在此我们一并深表谢意. 由于我们水平有限，时间仓促，疏漏和不足之处在所难免，敬请各位同仁批评指正.

作　者

2013 年 12 月

目　　录

第1章　引　　论

1.1　现代数值分析方法的研究内容

在自然科学、工程技术、经济、医学和社会科学各个领域中产生的许多实际问题都可以通过数学语言描述为相关的数学问题, 也就是说由实际问题建立数学模型, 然后应用各种数学方法和计算机软件来求解, 最后把结果反馈到实际应用中去进行检验. 我们知道, 有许多数学问题是得不到精确解的, 此时就需要寻求解决这些问题近似解的计算方法, 我们把这样的计算方法称为数值计算方法或数值分析方法.

数值分析方法是计算数学的一个主要部分, 而计算数学则是数学学科的一大分支, 它研究如何借助于数学基本理论和计算机求解各类数值问题. 应用计算机求解各类数值问题需要经历以下几个主要过程:

(1) 实际问题　在自然界的各个领域都有许多实际应用问题, 要解决这些实际问题就需要这些不同领域的专家提出具有明确意义的问题, 并给出该问题符合本领域所固有的规则或自然法则.

(2) 数学模型　对不同领域专家提出的实际问题, 用辩证唯物主义的思想方法进行分析, 在抓住事物主要因素以及在合理假设下, 运用该领域中的规律或法则, 结合数学理论、方法和工具, 建立问题中各种量之间的相互联系, 从而得到完备的数学模型.

(3) 数值分析　对数学模型先从数学理论上进行分析, 研究解的存在性、唯一性. 只有在满足解的存在唯一性条件下, 才能进行数据计算, 有些问题可以给出解析解, 但在大多数情况下, 要对数学模型进行数值计算. 把连续模型如何离散化, 用什么样的方法进行计算, 算法的相容性、收敛性、稳定性, 等等, 这些都是计算方法的研究内容.

(4) 算法设计　算法设计在应用计算机进行科学计算过程中起着非常重要的作用, 一个收敛快、精度好的算法, 有时比飞速发展的计算机硬件更具有使用价值.

例如, 在很多科学技术与工程问题中都要求解线性方程组, 在线性代数课程中介绍了求解线性方程组的理论和精确解求法, 例如, 用克拉默法则可以十分整齐简洁地给出一个非奇异线性方程组的解的表达式. 若要在计算机上按克拉默法则求解一个含有 n 个未知量 n 个方程的非齐次线性方程组, 需要计算 $n+1$ 个 n 阶行列式的值, 若按照行列式的定义来计算这 $n+1$ 个 n 阶行列式的值, 在不计加减运

算情况下, 总共要进行 $\frac{1}{2}n(n+1)n!(n+1)$ 次乘除运算, 其计算量是非常惊人的. 例如, $n=20$, 则有 $10\cdot 21\cdot 20!\cdot 21\approx 9.7\times 10^{20}$, 即使使用每秒运算 1 亿次的计算机也需要大约 30 万年的时间. 而用我们在第 2 章介绍的高斯消去法进行计算, 大约需要 3060 次乘除法运算, 并且 n 越大, 相差就越大. 这个例子表明, 算法的好坏对提高计算能力起着非常重要的作用.

从程序设计的观点来看, 算法是由一个或多个进程组成, 每个进程精确地描述了按一定顺序执行的有限指令序列, 所有进程能够同时执行并且协调地在有限个步骤内完成一个给定问题的求解. 若算法含有一个进程, 则称其为串行算法, 否则称为并行算法. 若算法在算术运算 (加减乘除) 过程中占据了总时间的绝大部分, 这种算法就称为数值型算法, 否则称为非数值型算法.

算法在保证可靠性的前提下有优劣之分. 算法的可靠性主要包括收敛性、稳定性、误差估计等. 算法的优劣主要考虑时间复杂度 (计算机运行时间)、空间复杂度 (占据计算机储存空间) 以及逻辑复杂度 (影响程序开发的周期以及维护的难易程度) 等因素.

(5) 计算求解 在计算机上求出所要的数值结果. 目前已有的数学软件可以帮助我们实现上机计算, 如 Maple、Matlab、Mathematica 等, 基本上已经将数值分析的主要内容设计成简单的函数, 只要调用这些函数进行运算便可得到数值结果.

在实际工作中, 由于面临的问题具有明确的特征, 其复杂性有时已经超出本书所述例证范围, 因而有必要深入掌握计算方法的基本思想和具体内容.

数值分析方法的内容包括线性代数方程组求解、非线性方程 (组) 求解, 矩阵的特征值与特征向量的计算、函数插值、函数逼近、数值积分与数值微分以及微分方程数值解法.

1.2 误差基础知识

对数学问题进行数值求解, 求得的结果一般情况下都含有误差, 即所得结果多数情况下都是近似解. 对这些结果的误差进行分析和估计是数值分析方法的主要内容之一. 通过对它们的研究可以确切地知道误差的性态和误差的范围.

1.2.1 误差来源与分类

在数值分析方法中的数可以分为两类：一类是精确数值, 即它精确地反映了实际情况. 例如, 某班有学生 51 人, 数字 51 就是精确数值. 另一类是近似值, 它只能近似地反映实际情况. 例如, 今天早晨温度是 16 ℃, 数字 16 就仅仅是一个测量所得的近似值. 数的精确值与其近似值之差称为**误差**. 在数值计算中误差是不可避免

的, 大多数情况下不存在严格的精确数值. 因此, 分析误差产生的原因, 把误差限制在允许的范围内是非常有必要的.

一般来说, 可以把误差分为两大类: 固有误差和计算误差. 固有误差包括模型误差和观测误差, 而计算误差包括截断误差和舍入误差.

(1) 模型误差 对实际问题建立数学模型时存在不可避免的误差, 在定量分析客观事物时, 总是要抓住主要矛盾, 忽略次要矛盾, 因此建立起来的数学模型与实际客观事物之间存在一定差距, 这种差距在数学上就称为模型误差.

(2) 观测误差 在解决实际问题时, 有时需要从实验或观测中得到各种数据, 而由于观测手段的限制, 得到的数据必然存在一定误差, 这种数据误差就称为观测误差. 观测误差又称为测量误差或参数误差. 观测值的精确程度取决于测量仪器的精密程度和操作人员的测量方法等因素.

(3) 截断误差 数学模型的精确值与用数值分析方法求得的近似值的差距就称为截断误差. 截断误差又称为方法误差. 这种误差常常是在用有限过程来逼近无限过程时产生的.

例如, 用 e^x 的幂级数表达式

$$\mathrm{e}^x = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}x^n \tag{1.1}$$

计算 e^x 的值时, 常常取级数的前几项的部分和作为近似公式, 如取

$$\mathrm{e}^x \approx 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{4!}x^4 + \frac{1}{5!}x^5 = \sum_{n=0}^{5} \frac{1}{n!}x^n, \tag{1.2}$$

这样, 用式 (1.2) 代替式 (1.1) 计算 e^x 的近似值与精确值之间的误差是由于截去式 (1.1) 后无穷多项产生的, 故称为截断误差, 其截断误差为 $\sum\limits_{n=6}^{\infty} \frac{1}{n!}x^n$.

(4) 舍入误差 计算机中参加运算的数据与原始数据之间的差距称为舍入误差. 由于计算机的字长是有限的, 参加运算的数据只能具有有限位, 因此原始数据在计算机中表示时可能会产生误差, 当然每次运算后又会产生新的误差, 这些误差都是舍入误差.

例如, $\frac{1}{3} = 0.3333333\cdots$, $\mathrm{e} = 2.7182818284590\cdots$, $\pi = 3.1415926535897932\cdots$ 等都不可能用全部小数位参加计算机运算, 在参加计算机计算过程中都取这些数的近似值进行运算, 那么由此得到的近似值与精确值之间的误差就是舍入误差.

应当注意以下两点:

(1) 在数值分析方法中, 通常至少有上述一种误差出现, 而事实上在大多数数值分析方法中, 会有上述多种误差同时出现.

(2) 在数值分析方法中, 我们要研究的是计算误差而不是固有误差.

1.2.2 绝对误差和相对误差

有两种衡量误差大小的方法：一是绝对误差; 二是相对误差.

设某一个量的精确值是 x, 其近似值为 x^*, 则 x 与 x^* 之差

$$e\left(x^*\right) = x - x^*, \tag{1.3}$$

称为近似值 x^* 的**绝对误差**, 简称**误差**. 式 (1.3) 也可以写成

$$x = e\left(x^*\right) + x^*. \tag{1.4}$$

注意, $e\left(x^*\right)$ 可正也可负, 也与量纲有关. 当 $e\left(x^*\right) > 0$ 时, x^* 称为 x 的弱 (不足) 近似值; 当 $e\left(x^*\right) < 0$ 时, x^* 称为 x 的强 (过剩) 近似值. $|e\left(x^*\right)|$ 的大小标志着 x^* 的精确度, 一般地, 对同一个量的不同近似值, $|e\left(x^*\right)|$ 越小, x^* 的精确度就越高.

实际上, 一般情况下不能得到精确值 x, 只能知道近似值 x^*, 但可以根据测量与计算的情况, 对绝对误差的大小范围做出估计, 也就是说, 可以指出一个正数 ε, 使

$$|e\left(x^*\right)| = |x - x^*| \leqslant \varepsilon, \tag{1.5}$$

称 ε 为近似值 x^* 的一个绝对误差界, 简称误差界.

式 (1.5) 还可以写成

$$x^* - \varepsilon \leqslant x \leqslant x^* + \varepsilon, \tag{1.6}$$

这表明精确值 x 在区间 $[x^* - \varepsilon, x^* + \varepsilon]$ 内.

例如, $\pi = 3.14159265358979 32\cdots$, 取 $\pi^* = 3.141$, 则

$$|e(\pi^*)| = |\pi - \pi^*| < 0.0006,$$

那么 0.0006 就是 π^* 的绝对误差界.

在许多情况下, 绝对误差的大小是不能完全刻画近似值的精确程度.

例如, $x = 10(\text{cm})$, $x^* = 9.9(\text{cm})$, 则 $e(x^*) = 0.1(\text{cm})$; 而 $y = 1000000(\text{cm})$, $y^* = 999900(\text{cm})$, 则 $e(y^*) = 100(\text{cm})$. 从表面上看后者的绝对误差是前者的 1000 倍. 但是, 前者每 1cm 长度产生了 0.01cm 的误差, 而后者每 1cm 长度仅产生 0.0001cm 的误差. 看来, 后者要比前者精确度高得多. 因此, 要确定一个量的近似值的精确程度, 除了要看误差的大小外, 往往还应该考虑该量本身的大小.

定义

$$e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x} = \frac{x - x^*}{x} \tag{1.7}$$

称为近似值 x^* 的**相对误差**.

相对误差说明了近似值 x^* 的绝对误差 $e(x^*)$ 与 x 本身比较时所占的比例, 它反映了一个近似数的精确程度, 相对误差越小、精确度就越高, 相对误差是用百分

数表示的, 是一个没有量纲的量. 事实上, 因为一个量的精确值 x 往往是不知道的, 因此还常常将 x^* 的相对误差 $e_r(x^*)$ 定义为

$$e_r(x^*)=\frac{e(x^*)}{x^*}=\frac{x-x^*}{x^*}, \tag{1.8}$$

这是因为当 $e_r(x^*)=\dfrac{e(x^*)}{x^*}$ 较小, 比如 $|e_r(x^*)|=\left|\dfrac{e(x^*)}{x^*}\right|<\dfrac{1}{2}$ 时, 有

$$\left|1+\frac{e(x^*)}{x^*}\right|\geqslant 1-\left|\frac{e(x^*)}{x^*}\right|\geqslant\frac{1}{2},$$

从而

$$\left|\frac{e(x^*)}{x^*}-\frac{e(x^*)}{x}\right|=\left|\frac{e(x^*)(x-x^*)}{xx^*}\right|=\left|\frac{e^2(x^*)}{x^*(x^*+e(x^*))}\right|=\left|\frac{\left(\dfrac{e(x^*)}{x^*}\right)^2}{1+\dfrac{e(x^*)}{x^*}}\right|<2\left|\frac{e(x^*)}{x^*}\right|^2,$$

当 $\left|\dfrac{e(x^*)}{x^*}\right|$ 很小时, $\dfrac{e(x^*)}{x^*}-\dfrac{e(x^*)}{x}$ 是 $\dfrac{e(x^*)}{x^*}$ 的平方数量级, 故可忽略不计.

一般来说, 计算出相对误差是比较困难的, 然而, 像绝对误差那样, 可以估计它的大小范围, 即可以指出一个正数 ε_r, 使得

$$|e_r(x^*)|\leqslant\varepsilon_r, \tag{1.9}$$

称 ε_r 为 x^* 的一个相对误差界.

根据以上定义, 上面例子中 $e_r(x^*)=1\%$ 与 $e_r(y^*)=0.01\%$ 分别是 x^* 与 y^* 的相对误差, 由此可见, y 的近似值 y^* 远比 x 的近似值 x^* 的精确程度要高.

1.2.3 有效数字

设 x 是一个实数, 一般来说, 它具有无限的十进制表达式. 由于在计算机上只能处理一定位数的数, 因此有必要引入舍入原则.

我们在表示一个近似值时, 为了能反映它的精确程度, 经常用到 “有效数字” 的概念.

设一个实数 x, 其十进制规范化表达式是

$$x=\pm 0.a_1a_2\cdots a_na_{n+1}\cdots\times 10^m,$$

其中 $a_i(i=1,2,\cdots,n,n+1,\cdots)$ 是 $0\sim 9$ 内的任一个数, 但 $a_1\neq 0$, n 为正整数, m 为整数. 人们规定 x 的保留 n 位的近似值 x^* 为

$$x^*=\begin{cases}\pm 0.a_1a_2\cdots a_n\times 10^m, & a_{n+1}\leqslant 4,\\ \pm 0.a_1a_2\cdots(a_n+1)\times 10^m, & a_{n+1}\geqslant 5.\end{cases}$$

这个原则即为“四舍五入”.

对“四舍五入”原则有一个补充, 即如果 $|e(x^*)| = |x - x^*| = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$ 时, 按上述原则都应进入, 实际上既可“舍”也可“入”, 在一个冗长的计算过程中, 为了避免舍入误差过大, 常常规定舍入使得最后一位数的数字为偶数. 例如, $x = 0.2665501\cdots$, 保留四位的近似值为 $x^* = 0.2666$, 而 $x = 132.02511\cdots$ 保留五位的近似值为 $x^* = 132.02$.

若 x 的某一近似值 x^* 的绝对误差界是某一位的半个单位, 则从这一位直到左边第一个非零数字为止的所有数字都称为 x^* 的**有效数字**.

具体地说, 对于数 x 经四舍五入后得到它的近似值 x^* 为

$$x^* = \pm 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m,$$

其中$x_i(i = 1, 2, \cdots, n)$ 是 $0 \sim 9$ 内的任一个数, 但 $x_1 \neq 0$, n 为正整数, m 为整数, 若 $|x - x^*| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$, 则 x^* 是 x 具有 n 位有效数字的近似值, 或称 x^* 精确到第 n 位, $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 都是 x 的有效数字.

例如, $\pi = 3.14159265\cdots$, 取 $\pi_1^* = 3.142$ 作为 π 的近似值时,

$$|e(\pi_1^*)| = |\pi - 3.142| = 0.00040735\cdots < 0.0005 = \frac{1}{2} \times 10^{-3},$$

即 $m - n = -3, m = 1, n = 4$, 所以 3.142 作为 π 的近似值有 4 位有效数字.

当取 $\pi_2^* = 3.141$ 作为 π 的近似值时,

$$|e(\pi_2^*)| = |\pi - 3.141| = 0.00059265\cdots < 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2},$$

即 $m - n = -2, m = 1, n = 3$. 所以 3.141 作为 π 的近似值有 3 位有效数字.

综上可知, 若近似值 x^* 的绝对误差的绝对值小于某一位的半个单位, 而由该位到 x^* 的第一位非零数字一共有几位, 那么 x^* 就有几位有效数字.

关于有效数字, 我们还要注意以下几点:

(1) 若用四舍五入法取准确值 x 的前 n 位作为近似值 x^*, 则 x^* 必有 n 位有效数字. 但是, 若 x^* 仅准确到某位数字, 而将这位数字以后的数字进行四舍五入则得到的不一定是有效数字.

例如, $x = 5.01445$, $x_1^* = 5.01$, $x_2^* = 5.015$, x_1^*, x_2^* 分别是 x 的不同近似值, 由上可知, x_1^* 有三位有效数字, 而 x_2^* 也仅有三位有效数字, 其中由四舍五入得到 x_2^* 的千分位上的 5 就不是有效数字.

(2) 有效数字位数相同的两个近似数, 绝对误差界不一定相同.

例如, 假设已知 $x_1^* = 10706$, $x_2^* = 11.104$ 二者都有 5 位有效数字, 那么, x_1^* 的绝对误差界 $\frac{1}{2} \times 10^0$, x_2^* 的绝对误差界为 $\frac{1}{2} \times 10^{-3}$, 显然不同.

(3) 把任何数字乘 $10^p(p=0,\pm1,\pm2\cdots)$ 等于移动该数的小数点, 它并不影响其有效数字的位数.

例如, $g=9.80\text{m/s}^2$ 具有 3 位有效数字, 而 $g=0.00980\times10^3\text{m/s}^2$ 也同样具有 3 位有效数字. 但是 9.8m/s^2 与 9.80m/s^2 的有效数字是不同的, 9.8m/s^2 有两位有效数字, 9.80m/s^2 有 3 位有效数字. 同理 0.1, 0.10, 0.100 等含义也是不同的.

如果整数并非全是有效数字, 则可以用浮点数表示. 如 8000000 的绝对误差限不超过 500, 即 $\dfrac{1}{2}\times10^3$, 则应把 8000000 表示为 $x^*=8000\times10^3$ 或 0.8000×10^7. 若记为 $x^*=8000000$, 则表示其绝对误差限不超过 $\dfrac{1}{2}\times10^0$.

例 1.1 某地粮食产量为 888 万吨, 表示方式不同, 绝对误差也不同.

888 万吨 $=888\times10^4$ 吨 $=0.888\times10^7$ 吨, 此时绝对误差为 $\dfrac{1}{2}\times10^4$ 吨, 即 $\dfrac{1}{2}$ 万吨.

888 万吨 =8880000 吨, 此时绝对误差为 $\dfrac{1}{2}$ 吨.

(4) 有效数字越多, 绝对误差就越小, 相对误差也就越小.

设$x^*=\pm0.x_1x_2\cdots x_n\times10^m$, $x_1\neq0$. 可以确定近似值 x^* 具有 n 位有效数字, 其绝对误差限为$\varepsilon=\dfrac{1}{2}\times10^{m-n}$, 在 m 相同的情况下, n 越大 ε 就越小, 所以, 有效数字位数越多误差就越小.

同样地, 可以对具有 n 位有效数字的近似值 x^* 的相对误差做出如下估计.

$$x_1\cdot10^{m-1}\leqslant|x^*|\leqslant(x_1+1)\cdot10^{m-1},$$

所以

$$|e_r(x^*)|=\left|\frac{x-x^*}{x^*}\right|\leqslant\frac{\dfrac{1}{2}\times10^{m-n}}{x_1\times10^{m-1}}=\frac{1}{2x_1}\cdot10^{-(n-1)},\tag{1.10}$$

可见, 有效数字越多, 相对误差也就越小.

例 1.2 要使 $\sqrt{20}$ 的近似值的相对误差限小于 0.1%, 要取几位有效数字?

设取 n 位有效数字, 由式 (1.10) 可得 $|e_r(x^*)|\leqslant\dfrac{1}{2x_1}\times10^{-(n-1)}$, 由于 $\sqrt{20}=4.4\cdots$, 因此 $x_1=4$, 由于要求

$$|e_r(x^*)|\leqslant0.125\times10^{-(n-1)}<10^{-3}=0.1\%,$$

即只要 n 取 4 就行, 故对 $\sqrt{20}$ 的近似值取 4 位有效数字, 其相对误差限就小于 0.1%. 此时由开方表得 $\sqrt{20}\approx4.472$.

1.2.4 数据误差在运算中的传播

设 x^* 和 y^* 分别是初始数据 x 和 y 的近似值, 即

$$x=x^*+e(x^*),\quad y=y^*+e(y^*),$$