

高等工程数学中的 数值分析

陈宁 编


天津出版传媒集团

 天津科学技术出版社

高等工程数学中的 数值分析

陈宁 编

天津出版传媒集团

 天津科学技术出版社

图书在版编目 (C I P) 数据

高等工程数学中的数值分析 / 陈宁 编. -- 天津 :
天津科学技术出版社, 2013. 8

ISBN 978-7-5308-8316-7

I. ①高… II. ①陈… III. ①工程数学—数值分析—
研究生—教材 IV. ①TB11

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 211617 号

责任编辑: 石 崑 张 婧

责任印制: 白彦生

天津科学技术出版社出版

出版人: 蔡 颢

天津市西康路 35 号 邮编 300051

电话 (022) 23332391

网址: www.tjkjcs.com.cn

新华书店经销

成都白马印务有限公司印刷

开本 880×1 230 1/32 印张 7 字数 150 000

2013 年 8 月第 1 版第 1 次印刷

定价: 20.00 元

内容提要

全书包含了数值代数、数值分析和微分方程数值解的基本内容，较系统地介绍工程计算中求解各类数学问题近似解的常用、基本方法，且着重阐明应用逼近论构造算法的基本思想、联系算法程序原理。

本书力求简明、精炼和可读，能使读者在较短的时间内尽快掌握数值计算方法及相应的应用。本书既可作为工程硕士的研究生参考教材，也可作为工科类高年级使用的教学用书，还可作为专门从事工程计算的学者和涉及数值计算、数学建模的工程技术人员参考书。

前 言

随着计算机的广泛应用及科学技术的快速发展，工程中的科学计算已是科学研究、工程设计的一个重要手段，它逐渐成为与理论分析、科学实验相平行的研究方法。

高等工程数学中的数值分析就是研究用计算机解决数学问题的数值计算方法及其相关理论。数值分析主要由三部分组成，(1) 数值代数：包括线性方程组的直接法，线性方程组的迭代法，矩阵特征值和特征向量的计算。(2) 数值逼近：包括插值法，函数逼近，数值积分。(3) 常微分方程数值解。我们采用模块式与嵌入式相结合的教学方法，对这三部分既相互独立又彼此联系的体系进行有效处理，使学生学习这部分内容达到理想的效果。

数值代数和数值逼近是常微分方程数值解法的重要工具，同时又是后续课程偏微分方程数值解的重要基础。

目前，掌握和应用科学计算的基本方法，将是力学、物理学、航空航天、信息传输、能源开发、土木工程、机械设计、医药卫生及社会科学领域的科研人员和工程技术人员的重要研究工具之一。同时“数值计算方法”也将成为理工科类、社会科学类等大学硕士研究生（工程硕士）和相应专业高年级本科的必修课程。参考教育部“数值计算方法”课程的基本要求，贯彻“突出重点概念、重方法、重应用、重能力的培养”的精神，结合近年来对学术型理工科硕士研究生教学实践和工程硕士教学实践，我

们编写了《高等工程数学中的数值分析》一书。该书包含了数值代数、数值分析和常微分方程数值解的基本内容，较系统地介绍求解各类数学问题近似解的常用、基本方法，且着重阐明构造算法的基本思想及算法程序原理。我们相信该书在较短的时间里，对学生在学习和掌握“数值计算方法”并为之应用方面，将起到有益的作用。

衷心感谢电子科技大学钟守铭教授、郑克龙博士在百忙之中仔细审阅稿件，提出宝贵的建议。感谢西南科技大学理学院陈翰林教授、周自刚教授的大力支持，感谢西南科技大学研究生部和出版社的鼎力支持，使本书得以顺利出版。

作 者

2013 年 4 月

目 录

第一章 数值分析绪论	1
§ 1.1 数值分析研究对象	1
§ 1.2 误差	2
§ 1.3 数值计算中应注意的问题	6
第二章 线性方程组的数值解法	8
§ 2.1 Gauss 消元法	8
§ 2.2 直接三角分解法	11
§ 2.3 追赶法、平方根法	16
§ 2.4 方程组状态与条件数	18
第三章 用迭代法求解线性方程组	21
§ 3.1 迭代法	21
§ 3.2 Jacobi 迭代法	22
§ 3.3 Gauss - Seidel 赛德尔迭代法	24
§ 3.4 迭代法的收敛条件	27
第四章 用迭代法求解非线性方程组	35
§ 4.1 二分法	35
§ 4.2 不动点迭代法	38
§ 4.3 Newton 迭代法	42
§ 4.4 加速方法	49

第五章 插值方法与曲线拟合	53
§ 5.1 插值问题基本概念	53
§ 5.2 Lagrange (拉格朗日) 插值	55
§ 5.3 插值余项	58
§ 5.4 Newton (牛顿) 插值多项式	62
§ 5.5 Hermite (埃尔米特) 插值	69
§ 5.6 三次样条插值	72
§ 5.7 曲线拟合的最小二乘法	81
第六章 数值微积分	87
§ 6.1 插值型求积公式和代数精度	87
§ 6.2 Newton - Cotes (牛顿 - 柯特斯) 求积式	92
§ 6.3 复化求积公式	95
§ 6.4 Gauss 型求积公式	101
§ 6.5 数值微分	109
第七章 常微分方程数值解法	113
§ 7.1 Euler (欧拉) 方法	114
§ 7.2 改进的 Euler 方法	117
§ 7.3 收敛性与稳定性	120
§ 7.4 Runge - Kutta (龙格 - 库塔) 法	122
第八章 矩阵特征值与特征向量的计算	129
§ 8.1 乘幂法与反幂法	130
§ 8.2 Jacobi 方法	134
§ 8.3 QR 算法	137
工程计算数值实验案例	140
习 题	171
参考文献	188

第一章 数值分析绪论

科学理论、科学实验、科学与工程计算三足鼎立，已成为人们科学活动的三大方法之一。熟练地运用计算机进行科学计算，已成为工程研究和训练的一项基本技能，这就要求人们去掌握适用于计算机上使用的数值计算方法。

正是由于数值分析是科学与工程计算中必不可少的环节，它既有纯数学高度抽象性与严密科学性的特点，又有应用的广泛性与实验的技术性的特点，它是与计算机使用密切结合的实用性很强的工程数学。

§ 1.1 数值分析研究对象

现代数值分析是研究适合于用计算机实现的数值方法，即数值算法。而求解数学问题时可采用相应的数值算法，各种算法均有其特点及使用范围。数值算法的优劣是根据运算量、储存量、收敛速度和误差大小等因素决定。利用数值算法和计算机解决科学和工程中的问题称为科学计算。当今科学研究的三大方法包括：科学计算、经典理论研究、实验研究。

数值分析即数值处理和数值算法，它包括：计算力学、计算物理、计算化学、计算生物学及其他边缘科学。

§ 1.2 误差

一、误差来源

(一) 误差的来源

数学问题的数值解与精确解是要产生误差的。其中包括：模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差。

(二) 绝对误差、相对误差和有效数值

1. 绝对误差、相对误差；2. 有效数值。

定义 1.1 设 x^* 为准确值 x 的一个近似值，称 $e = x - x^*$ 为近似值 x^* 的绝对误差。

$$|e| = |x - x^*| \leq \varepsilon$$

称 ε 为近似值 x^* 的绝对误差限，简称误差。

定义 1.2 设 x^* 为准确值 x 的一个近似值，称绝对误差与准确值之比为近似值 x^* 的相对误差。记为 e_r ，

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

若存在正数 ε_r 使得

$$e_r = \left| \frac{e}{x^*} \right| \leq \varepsilon_r,$$

称 ε_r 为 x^* 的相对误差限。

定义 1.3 若近似值 x^* 的规格化形式是

$$x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \cdots \times 10^m$$

其中 m 为整数, $a_i \neq 0, a_i (i=1, 2, \cdots)$, 为 0 到 9 间的整数, 若

$$|x - x^*| \leq (1/2) \times 10^{m-n}$$

则称近似值 x^* 有 n 位有效数字。

如: $x = 0.003400 \pm (1/2) \times 10^{-5}$ 表近似值 0.003400 准确到小数点后第 5 位, 有 5 位有效数值。 $x^* = 1452.046$ 是具有 7 位有效数字的近似值, 则它的误差限为 $|x - x^*| \leq (1/2) \times 10^{-3}$ 。

(三) 数值计算中误差的传播

1. 基本运算的误差估计

基本运算是指四则运算和常用函数的计算。

设数值计算中求解与参量 x_1, x_2, \cdots, x_n 有关, 记为 $y = f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 。设 x_1, x_2, \cdots, x_n 近似值分别是 $x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*$ 相应的解为 $y^* = f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$, 假定 f 在点 $(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$ 可微, 当数据误差较小时, 解的绝对误差为

$$\begin{aligned} e(y^*) &= y - y^* \\ &= f(x_1, x_2, \cdots, x_n) - f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*) \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i} e(x_i^*) \end{aligned}$$

解的相对误差为

$$e_r(y^*) = \frac{e(y^*)}{y^*}$$

$$\approx d(\ln f) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} \frac{x_i^*}{f(x_1^*, \dots, x_n^*)} e_r(x_i^*)$$

函数的和、差、积、商的误差公式为：

$$e(x_1 \pm x_2) = e(x_1) \pm e(x_2), e_r(x_1 \pm x_2) = \frac{x_1}{x_1 \pm x_2} e_r(x_1) + \frac{x_2}{x_1 \pm x_2} e_r(x_2)$$

$$e(x_1 x_2) \approx x_2 e(x_1) \pm x_1 e(x_2), e_r(x_1 x_2) \approx e_r(x_1) + e_r(x_2)$$

$$e(x_1 / x_2) \approx x^{-1} e(x_1) - (x_1 / x_2^2) e(x_2), e_r(x_1 / x_2) \approx e_r(x_1) - e_r(x_2)$$

$$|e(x_1 \pm x_2)| = |e(x_1) \pm e(x_2)| \leq |e(x_1)| + |e(x_2)|$$

$$|e_r(x_1 x_2)| \approx |e_r(x_1) + e_r(x_2)| \leq |e_r(x_1)| + |e_r(x_2)|$$

$$|e_r(x_1 / x_2)| \approx |e_r(x_1) - e_r(x_2)| \leq |e_r(x_1)| + |e_r(x_2)|$$

因此，和、差的误差限不超过各数的误差限的和，积、商的相对误差限不超过各数的相对误差限的和。

例 1.1 设 $y = x^n$ ，求 y 的相对误差与 x 的相对误差之间的关系。

解 由公式知， $e_r(y) = d(\ln x^n) = nd(\ln x) = ne_r(x)$ ，则 x^n 的相对误差为 x 相对误差的 n 倍。特别有 \sqrt{x} 的相对误差为 x 相对误差的 0.5 倍。

2. 算法的数值稳定性

例 1.2 计算积分值 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx, (n=0, 1, 2, \dots)$

解 (1) 由关系式

$$I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx + \int_0^1 \frac{5x^{n-1}}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n},$$

$$\text{且 } \frac{1}{6(n+1)} < I_n < \frac{1}{5(n+1)};$$

(2) 可设两种算法

(a) 取 $I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln 1.2$, 由公式有

$I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1}, (n=1, 2, \dots)$ 所求近似值依次为 I_1, I_2, \dots

(b) 取第 n 处的平均值 $I_n^* \approx \frac{1}{2} \left[\frac{1}{6(n+1)} + \frac{1}{5(n+1)} \right]$ 由公式有

$$I_k = \frac{1}{5} \left(\frac{1}{k} - I_k \right), (k=n, n-1, \dots, 1)$$

所求近似值依次为 $I_{n-1}, I_{n-2}, \dots, I_0$ 。

分别取 $I_0^* = 0.18232155, I_{14}^* = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{6*15} + \frac{1}{5*15} \right) \approx 0.01222222$,

计算结果易得。

由方法 (a), 得 $I_{10}^* < 0$, 显然是错误; 由方法 (b), 其误差限

$\varepsilon = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{75} - \frac{1}{90} \right) \approx 0.0011$, I_0^* 显然有 8 位有效数字; 设 I_0^* 的误差是 e_0

分析原因是由法 (a) $e_n = I_n - I_n^* = -5I_{n-1} + 5I_{n-1}^* = -5e_{n-1}$, 可有

$e_n = (-5)^n e_0$, 说明计算一次误差扩大 5 倍, 从而可得相应结论。

§ 1.3 数值计算中应注意的问题

1. 避免两相邻数相减

如: $u = x - y, e_r(u) = e_r(x - y) = \frac{e(x) - e(y)}{x - y}$, 当 x 和 y 很接近

时, u 的相对误差很大, 有效数字位数严重丢失。如求

$x = \sqrt{1 + 10^{-7}} - 1$ 的近似值时, 取 8 位有效数字则有 $x \approx 0.5 * 10^{-7}$, 只

有一位有效数字。为避免这种情况出现, 我们改写 $x = \frac{10^{-7}}{\sqrt{1 + 10^{-7}} + 1}$,

则有 $x \approx 0.49999999 * 10^{-7}$ 仍有 8 位有效数字。

2. 避免大数“吃”小数

例 1.3 求解二次方程 $x^2 - (10^9 + 1)x + 10^9 = 0$ 的根。

解 利用因式分解易得 $x_1 = 10^9, x_2 = 1$, 若用求根公式得

$$x = \frac{10^9 + 1 \pm \sqrt{(10^9 + 1)^2 - 4 * 10^9}}{2}$$

用 8 位小数的机器运算处理时，由于对阶，有

$10^9 + 1 \approx 10^9$, $\sqrt{(10^9 + 1)^2 - 4 * 10^9} \approx 10^9$ 易得 $x_1 = 10^9$, $x_2 = 0$ 显然是错误的。为避免这种情况处理方法是改变计算公式，可得有效结果。

3. 除数的绝对值远小于被除数的绝对值

如： $e\left(\frac{x}{y}\right) = \frac{ye(x) - xe(y)}{y^2}$, $|y| \ll |x|$ 舍入误差可增大。

4. 要化减计算，减少运算次数，提高效率

如：计算多项式 $P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$

若直接计算，共需 $\frac{n(n+1)}{2}$ 次乘法和 n 次加法。若按秦氏算法

$$\begin{cases} u_n = a_n \\ u_k = x u_{k+1} + a_k, (k = n-1, n-2, \cdots, 1, 0) \\ P_n(x) = u_0 \end{cases}$$

计算，改写多项式为

$$P_n(x) = a_0 + x \{ a_1 + x [\cdots x (a_{n-2} + x (a_{n-1} + a_n x)) \cdots] \}$$

只需作 n 次乘法和 n 次加法。

5. 选用数值稳定性好的算法

第二章 线性方程组的数值解法

线性方程组的求解在科学研究与工程计算中经常遇到。有些复杂的数学模型可经过变换、数值求解，将相应的问题进行“离散化”或“线性化”使之成为线性方程组，比如电学网络问题、热传导问题、质谱仪数据分析、样条插值法、矩阵的特征值问题、微分方程数值解法等。因此求解线性方程组是数值分析中的基本内容。

求解线性方程组的一些经典的理论方法，如 Cramer 法则，虽给出了解的表达式，但计算量太大，当方程组阶数较高时，用计算机处理也难以实现。寻求计算量小、存储少、算法简便能保证具有一定精度的求解线性方程组的方法是十分必要的。

我们将在下面讨论直接法，包括 Gauss 消取法及其变形。这里，我们假设线性方程组的系数矩阵是非奇异的。

§ 2.1 Gauss 消元法

直接法的关键思想是将原方程组的求解转化为解三角形方程组，而三角形方程组求解是很容易的。Gauss 消元法是一个古老的直接法，它恰是把线性方程组化为等价的上三角线性方程组，用它改进得到的主元素法，是目前计算机用于求解低阶稠密矩阵方程组的有效方法。

一般求解 n 阶线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots \quad \quad \quad \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (1)$$

高斯消去法的步骤:

消元过程, 第 k 步: ($k=1, 2, \dots, n$) 设第 $k-1$ 次消元完成后得方程组 (1) 的同解方程组为

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1k}^{(1)}x_k + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2k}^{(2)}x_k + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ \cdots \quad \quad \quad \cdots \\ a_{kk}^{(k)}x_k + \cdots + a_{kn}^{(k)}x_n = b_k^{(k)} \\ \cdots \quad \quad \quad \cdots \\ a_{nk}^{(k)}x_k + \cdots + a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)} \end{cases} \quad (2)$$

记 $A^{(k)}x = b^{(k)}$ 。设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 记 $l_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$, ($i = k+1, \dots, n$) 将 (2) 中第 i 个方程减去第 k 个方程乘以 l_{ik} , 完成第 k 次消元, 最后化成同解的上三角方程

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1k}^{(1)}x_k + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2k}^{(2)}x_k + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ \cdots \quad \quad \quad \cdots \\ a_{kk}^{(k)}x_k + \cdots + a_{kn}^{(k)}x_n = b_k^{(k)} \\ \cdots \quad \quad \quad \cdots \\ a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)} \end{cases} \quad (3)$$