北京工业大学研究生创新教育系列教材

数值分析与科学计算

薛　毅　编著

科学出版社

北京工业大学研究生创新教育系列教材

数值分析与科学计算

薛 毅 编著

科 学 出 版 社

北 京

内 容 简 介

本书系统地介绍了数值分析的有关内容，共十章. 内容包括：误差；非线性方程求根；线性方程组的数值解法；解线性代数方程组的迭代法；非线性方程组数值解与最优化方法；插值方法；数据拟合与函数逼近；数值积分和数值微分；常微分方程的数值解；矩阵特征值与特征向量的计算. 本书的最大特色是在书中增加了科学计算与 MATLAB 软件的内容，在介绍各种数值方法的同时，具体讲解了如何将算法编写成程序，以及如何用数学软件求解相关的数值问题.

本书可作为工科研究生以及本科生“数值分析”或“计算方法”课程的教材或教学参考书，也可作为“数值分析实验”的参考书和数学建模竞赛的辅导教材，还可供科技工作者和工程技术人员学习和参考.

图书在版编目(CIP)数据

数值分析与科学计算/薛毅编著. —北京：科学出版社，2011
（北京工业大学研究生创新教育系列教材）
ISBN 978-7-03-031346-1
Ⅰ. ①数… Ⅱ. ①薛… 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(2011) 第 104310 号

责任编辑：赵彦超 李 欣 / 责任校对：陈玉凤
责任印制：钱玉芬 / 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
新蕾印刷厂印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2011 年 6 月第 一 版 开本：B5 (720 × 1000)
2011 年 6 月第一次印刷 印张：28 3/4
印数：1—3 000 字数：561 000

定价：88.00 元

前　言

数值分析、计算方法和科学计算本质上是一个意思, 就是研究各种数学问题进行数值计算的一门学科. 本书之所以起名为 “数值分析与科学计算”, 有别于传统的数值分析 (或计算方法) 教材, 是因为在书中增加了大量的计算 (特别是用软件计算) 的内容, 在介绍各种数值方法的同时, 介绍如何用数学软件求解问题.

本教材是以工科研究生为读者群体编写的, 或者作为工科研究生 “数值分析” 课程的教材, 这部分学生不但要学习各种计算的数值方法, 而且还要学会使用这些方法解决本专业的实际问题, 这一点对工科研究生来讲尤为重要.

本书是按照传统的数值分析教材体系编排的, 共十章. 第 1 章, 误差; 第 2 章, 非线性方程求根; 第 3 章, 线性方程组的数值解法; 第 4 章, 解线性代数方程组的迭代法; 第 5 章, 非线性方程组数值解与最优化方法; 第 6 章, 插值方法; 第 7 章, 数据拟合与函数逼近; 第 8 章, 数值积分和数值微分; 第 9 章, 常微分方程的数值解; 第 10 章, 矩阵特征值与特征向量的计算. 在每一章中增加一节的内容 —— 科学计算与 MATLAB 程序, 其内容涉及以下几个方面: ① 科学计算 (特别是用软件计算) 需要注意的问题; ② 按照该章介绍的算法编写 MATLAB 程序; ③ MATLAB 软件自带函数的使用. 这部分内容单独排成一节的目的有两个: ① 不打乱传统数值分析的内容, 便于教师在课上讲授; ② 这部分内容属于拓展性质内容, 教师可以不讲授, 由学生根据自身的需要进行自学, 或者作为数值分析实验的内容.

本书有以下特点:

(1) 以工科研究生为对象, 直观、生动地向学生介绍数值分析的基本理论、算法以及相关的内容, 尽量减少繁琐的推导. 在学生弄懂算法的基础上, 加强对算法的理解与应用方面的训练, 并力图提高学生运用所学知识解决实际问题的能力.

(2) 介绍与各种算法相匹配的 MATLAB 程序和求解各种问题的 MATLAB 函数. 使学生学会算法编程与问题求解, 这样有助于学生理解和掌握算法, 使学生的学习兴趣不会被复杂的计算所 “淹没”, 而将主要精力放在对求解方法的理解上.

(3) 配有大量的例题、习题和实验, 通过这些内容加深数值方法的了解与理解, 巩固所学知识.

完成本书的基本教学内容 (不包括 * 号部分) 大约需要 60 学时, 教师可根据教学大纲的要求和各专业的实际情况进行调整. 即便不讲 * 号部分, 也不会影响到教学的连贯性. 书中的实验部分可以让学生自学, 或者作为数值分析实验课程的内容.

本书的主要特色是介绍如何使用 MATLAB 软件求解各类数值计算的问题, 这样可以使学生 "站在巨人的肩膀上" 工作, 将课程中学到的知识直接用于本专业的科研工作.

本书没有专门介绍 MATLAB 软件的使用, 因为目前市面上有关 MATLAB 软件使用的教材很多, 大家可以选择一本来学习.

本书的全部程序均通过计算检验, 书中的程序已在 MATLAB 7.0 环境下运行通过, 读者所持的软件的版本可能与编者不一致, 但这基本不会影响到软件的运行. 如果读者需要本书所列例题的程序, 可发邮件至 xueyi@bjut.edu.cn, 向编者索取.

本书可作为工科研究生和本科生学习 "数值分析" 或 "计算方法" 课程的教材或教学参考书, 也可作为数学建模竞赛的辅导教材, 还可供科技工作者和工程技术人员学习和参考.

由于受编者水平限制, 可能在内容的取材、结构的编排以及课程的讲法上存在不妥之处, 希望使用本书的老师、同学以及同行专家和其他读者提出宝贵的批评和建议.

在本书出版之际, 谨向对本书提供过帮助的各位老师和专家表示感谢, 同时感谢科学出版社的编辑为本书的出版做的大量工作.

编 者

2010 年 12 月

目　录

第 1 章　误　　差

数值分析、计算方法和科学计算实际上都是一个意思, 是指研究各种数学问题数值计算的一门学科, 它属于计算数学的范畴, 是数学学科的一个重要分支. 本书强调科学计算, 是为了有别于其他的数值分析教材, 因为本书用了许多篇幅介绍如何使用 MATLAB 软件完成相应的计算工作.

随着计算机的迅速发展, 数值计算的应用已经普遍深入到各个科学领域, 很多复杂的、大规模的计算问题已成功地在计算机上得到了解决, 而且新的、有效的数值方法也不断地出现, 因此数值计算方法已成为自然科学与工程技术的重要手段, 是科学研究与实验不可缺少的环节.

数值分析并不是各种数学方法的简单罗列和堆积, 而是一门内容丰富、研究方法深刻又有自身理论体系的课程. 它除了具有数学的抽象与严谨这些理论性强的特点外, 还有应用广泛、与实际联系密切等应用性强的特点, 是一门既有理论, 又有应用并且与计算机密切结合的课程.

数值分析主要包括一些求解科学研究和工样技术领域常见的各种数学问题基本的、常用的计算方法. 这些计算方法所给出的答案一般是所求问题真解的某些近似值, 所以必须了解并估计近似值与真解之间的差异, 即误差. 进行科学计算的主要工具是计算机, 因此, 还应当了解在计算机上如何实施数值计算, 以及它与严格的数学计算的区别. 为此, 本章简要介绍误差的基本理论以及算法的数值稳定性概念, 为以后各章的学习作准备.

1.1　误差的来源

在处理数值计算的问题中, 需要与各种计算误差打交道, 因此, 本节讨论误差的来源与分类问题.

1.1.1　误差分析的重要性

在运用数值分析方法解决实际问题的过程中, 会出现各种各样的误差. 对这些误差进行分析是十分必要的. 因为如果不这样做, 一个看似合理的计算可能会得出错误的计算结果.

例 1.1　计算 $f(x)=\mathrm{e}^x$ 在 $x=0$ 处导数的近似值.

解 由导数的定义知

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \tag{1.1}$$

因此, 导数的近似值可以写成

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \tag{1.2}$$

由式 (1.1) 知, h 越小, 式 (1.2) 的近似程度越高.

事实真是如此吗? h 取不同值, 并且在计算过程, 其计算值给终保持小数点后 4 位. 分别取 $h = 0.01, 0.001, 0.0001$ 和 $h = 0.00001$, 按式 (1.2) 计算得到

$$\begin{aligned}
f'(0) &\approx \frac{f(h) - f(0)}{h} = \frac{\mathrm{e}^{0.01} - \mathrm{e}^0}{0.01} \approx \frac{1.0101 - 1}{0.01} = 1.0100, \\
f'(0) &\approx \frac{f(h) - f(0)}{h} = \frac{\mathrm{e}^{0.001} - \mathrm{e}^0}{0.001} \approx \frac{1.0010 - 1}{0.001} = 1.0000, \\
f'(0) &\approx \frac{f(h) - f(0)}{h} = \frac{\mathrm{e}^{0.0001} - \mathrm{e}^0}{0.0001} \approx \frac{1.0001 - 1}{0.0001} = 1.0000, \\
f'(0) &\approx \frac{f(h) - f(0)}{h} = \frac{\mathrm{e}^{0.00001} - \mathrm{e}^0}{0.00001} \approx \frac{1.0000 - 1}{0.00001} = 0.0000.
\end{aligned}$$

从计算结果看到, 当 $h = 10^{-5}$ 时, 计算误差反而增大.

从例 1.1 得到, 分析误差是十分必要的.

1.1.2 误差的来源

科学计算大致有以下过程: 对给定的实际问题建立数学模型; 通过已知的数据或已有的数学方法建立相应的数值方法; 设计计算机程序, 上机进行数值计算; 最后得到计算结果. 其过程如图 1.1 所示. 因此, 从实际问题到计算结果之间存在着以下几种误差.

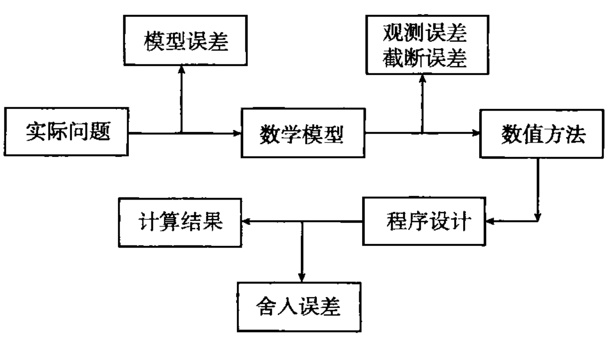

图 1.1 科学计算的过程以及误差的来源

1. 模型误差

数学模型是从实际问题经抽象和简化, 并忽略一些次要因素得到的. 例如用

$$s = \frac{1}{2}gt^2 \tag{1.3}$$

(其中 g 是重力加速度) 描述地球上某一质点自由落体运动规律, 这里忽略了空气阻力等一些次要因素, 因此将数学模型与实际问题之间出现的误差称为**模型误差** (model error).

如果用 $s = f(t)$ 表示自由落体的真实运动规律, 那么 $f(t) - \frac{1}{2}gt^2$ 为数学模型 (1.3) 的模型误差.

2. 参数误差

在给出的数学模型中往往涉及一些根据观测得到的物理量, 如电压、电流、温度、长度等, 而观测难免不带来误差, 观测值与真实值之间的误差称为**观测误差** (observational error) **或参数误差**.

例如, 在式 (1.3) 中取重力加速度为 $g \approx 9.8$ 米/秒 ^{2}, 则 $g - 9.8$ 就是参数误差.

3. 截断误差

在计算中常常遇到只有通过无限过程才能得到的结果, 但实际计算时, 只能用有限过程来计算. 这种用有限过程代替无限过程的误差称为**截断误差** (truncation error). 而这种误差是由计算方法本身引起的, 因此也称为**方法误差**.

例 1.2 计算定积分 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$ 的近似值.

解 由高等数学的知识可知, 不定积分 $\frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$ 找不到由初等函数构成的原函数, 所以不能用 Newton-Leibniz 公式计算.

考虑用 Taylor (泰勒) 级数求解. 由 $\sin x$ 的 Taylor 展开式得

$$\frac{\sin x}{x} = \frac{1}{x}\left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots\right).$$

若从第二项后"截断", 则有

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x \approx \int_0^1 \frac{1}{x}\left(x - \frac{x^3}{3!}\right)\mathrm{d}x = \int_0^1 \left(1 - \frac{x^2}{6}\right)\mathrm{d}x = 1 - \frac{1}{18} = \frac{17}{18},$$

这时 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x - \frac{17}{18}$ 为截断误差.

4. 舍入误差

在计算中遇到的数据可能位数很多, 也可能是无穷小数，如 $\sqrt{2}, \dfrac{1}{3}$ 等, 但计算时只能对有限位数进行计算, 因此往往进行四舍五入, 这样产生的误差称为**舍入误差** (rounding error).

少量的舍入误差是微不足道的, 但在电子计算机上完成了千百万次运算之后, 舍入误差的累积有时可能是十分惊人的.

在上述讨论的误差来源中, 前两种误差是客观存在的, 后两种误差是由计算方法所引起的. 本教材所研究的数学问题是数值方法, 因此只涉及后两种误差.

1.2 误 差

1.2.1 绝对误差与相对误差

1. 绝对误差

定义 1.1 设 x 是准确值, x^* 是它的一个近似值, 则称 $x-x^*$ 为 x^* 的**绝对误差** (absolute error), 简称误差, 记作 e^*, 即 $e^*=x-x^*$.

例如, 用 1.414 近似 $\sqrt{2}$, 其绝对误差为 $\sqrt{2}-1.414=1.414213\cdots-1.414=0.000213\cdots$.

通常无法知道准确值 x, 因而也不可能知道误差 e^* 的准确值. 但可以很容易得到 e^* 的取值范围. 例如用 1.414 作为 $\sqrt{2}$ 的近似值, 其绝对误差不会超过 0.0003, 因此可以给出绝对误差的上限.

定义 1.2 设 x 为准确值, x^* 是它的一个近似值, 称 x^* 的绝对误差的绝对值的上限 ε^* 为 x^* 的**绝对误差限**, 简称**误差限**, 即 $|e^*|=|x-x^*|\leqslant\varepsilon^*$.

显然, 如果 ε^* 是 x 的近似值 x^* 的绝对误差限, 那么 x 仅位于区间 $[x^*-\varepsilon^*, x+\varepsilon^*]$ 之间. 在工程技术上常用 $x=x^*\pm\varepsilon^*$ 表示. 例如用毫米刻度的直尺测量某一长度为 x 的物体, 测量其长度的近似值为 $x^*=52\text{mm}$, 由于直尺以毫米为刻度, 其误差不超过 0.5mm, 即 $x=52\pm0.5$.

2. 相对误差

在许多情形下, 绝对误差限并不能完全刻画一个数的近似精确程度. 例如, 比较 $x=10\pm1$ 和 $y=10000\pm10$ 两种情形. 从绝对误差限来看, y^* 的绝对误差限是 x^* 的绝对误差限的 10 倍; 但从实际情况来看, y^* 的精确程度要高于 x^* 的精确程度. 因此, 一个近似值的精确程度不仅与绝对误差限有关, 而且还与其本身的大小有关. 由此给出以下定义.

定义 1.3 设 x 为准确值, x^* 是它的一个近似值, 称比值 $\dfrac{e^*}{x^*}$ 为近似值 x^* 的