数值分析

杨凤翔　翟瑞彩　孙　晶

天津大学出版社

数值分析

杨凤翔　翟瑞彩　孙　晶

天津大学出版社

内容提要

本书介绍科学计算中常用的数值方法，包括线性方程组的直接解法、线性与非线性方程组的迭代法、矩阵特征值计算、插值法与数值逼近、数值积分与微分、常微分方程数值解，并简单地介绍了偏微分方程的差分法与有限元方法。本书注重方法描述、分析及运用，选材精练，叙述简明。

本书可作为大学本科及硕士研究生的教科书或教学参考书，也可供工程技术人员参考。

数 值 分 析

杨凤翔 翟瑞彩 孙晶

*

天津大学出版社出版

（天津大学内）

邮编：300072

河北省昌黎县印刷厂印刷

新华书店天津发行所发行

*

开本：850×1168 毫米 1/32 印张：11 字数：286 千字

1996 年 6 月第一版 1996 年第一次印刷

印数：1--5000

ISBN7－5618－0819－4

O.77 定价：13.80 元

序

由于数学、计算机科学与技术的发展，大规模科学计算作为研究和解决问题的重要手段和途径，已在自然科学、工程技术乃至社会科学各个领域广泛地开展起来，极大地促进了科学技术的进步与发展. 本书介绍科学计算中常用的数值方法及相关理论，旨在培养读者应用计算机从事科学计算的能力.

本书是在编者多年来为天津大学理工科大学生及硕士研究生讲授数值分析课程所用讲义的基础上，经修改、整理写成的. 本书系统地介绍了线性代数方程组的直接解法、线性与非线性方程组的迭代法、矩阵特征值计算、插值与数值逼近、数值积分、常微分方程数值解法，并简单介绍了偏微分方程的差分法及有限元方法. 对于本书引用的近代数学基础中的一些概念及有关结论，在引论部分做了简单阐述，供不熟悉这些知识的读者参考. 编者认为熟悉或初步了解这些知识，对于深入理解数值方法的原理是有益的. 当然，读者略去这部分，直接阅读后面的章节，并不妨碍对现有方法的掌握和运用. 此外，为了指导读者上机实习，将实习内容及训练要求专列一章置于本书最后.

本书可作为理工科大学本科高年级大学生及硕士研究生的数值分析课程的教科书或教学参考书. 也可供从事科学计算的工程师和技术人员参考.

在编写过程中参考了国内外一些教科书、文献资料，在此向参考资料的编(著)者一并致谢.

书中不妥或谬误之处，恳请读者批评指正.

编者

1995 年 9 月

目　　录

第一章 引 论

应用数学方法解决科学研究和工程技术中的问题，首先要建立描述问题的数学模型；其次制订计算方案；进而上机计算给出原问题的解，这就是科学与工程计算的全过程. 所谓制订计算方案，就是为建立起来的数学模型确定一个切实可行的求解过程，并形成数值算法（以下简称算法）. 算法在这里泛指数学问题构造性解法的一个完备而确切的描述. 因为是在计算机上实现，所以还要严格地规定算法容许的运算是数据的加、减、乘、除运算及一些逻辑运算，算法是设计计算机程序或软件的基础，也是对计算结果进行分析的依据. 所以说制订计算方案并形成算法是科学与工程计算的一个重要环节. 数学问题的算法研究是计算数学的范畴，本书介绍科学与工程计算中的一些基本算法，包括算法的建立、运用及分析.

§1.1 算法的建立与分析

例 1.1 已知变量 y 在区间 $[a,b]$ 上 $n+1$ 个不同点处的值

$$y(x_k)=y_k \quad k=0,1,2,\cdots,n \tag{1.1}$$

$t\in[a,b]$ 且 $t\neq x_k(k=0,1,2,\cdots,n)$，求 y 在 t 处的值.

实际上(1.1)给出一个离散型函数关系

$$y=y(x) \quad x\in\{x_k\}_0^n$$

$\{x_k\}_0^n$ 中各点称为节点，问题是求 $y(x)$ 在非节点 t 处的值 $y(t)$. 为此，假设 $y(x)$ 是连续函数，选择多项式

$$p(x)=\sum_{k=0}^{n}a_kx^k \tag{1.2}$$

并令其在节点处与 $y(x)$ 重合,即

$$p(x_k)=y_k, \quad k=0,1,2,\cdots,n \tag{1.3}$$

则当 t 靠近节点时,

$$p(t)\approx y(t)$$

于是问题归结为确定多项式 $p(x)$ 的系数. 由条件(1.3)可知系数满足

$$\sum_{j=0}^{n} a_j x_k^j = y_k, \quad k=0,1,2,\cdots,n \tag{1.4}$$

这是一个 $n+1$ 阶线性代数方程组,解这个方程组可以求出多项式 $p(x)$ 的系数 $a_0,a_1,a_2,\cdots,a_n$.

以上基于数据拟合的思想(将离散型函数拟合为连续型函数)建立了求离散型变量在非节点处之值的方法.

例 1.2 求解常微分方程初值问题

$$\begin{cases} y'=f(x,y), & a<x<b \\ y(a)=s \end{cases} \tag{1.5}$$

在 $[a,b]$ 上引进一系列节点

$$x_n=a+nh, \quad n=0,1,2,\cdots,N$$

其中 $h=(b-a)/N$ 称为步长,假设 $f(x,y(x))$ 是连续函数,对微分方程从 x_n 到 x_{n+1} 积分得

$$y(x_{n+1})-y(x_n)=\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y(x))\mathrm{d}x$$

由于

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y(x))\mathrm{d}x \approx hf(x_n,y(x_n))$$

若用 y_n 及 y_{n+1} 分别代替 $y(x_n)$ 及 $y(x_{n+1})$,则可形式地构成差分方程初值问题

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n) \\ y_0=s \end{cases} \tag{1.6}$$

这个问题很好解. 首先令 $n=0$,代入 $y_0=s$ 可计算出 y_1,再代入 y_1

又可计算出 y_2，如此继续可逐次计算出 $y_3, y_4, \cdots, y_N$，如果对于任意节点 x_n，都有

$$\lim_{\substack{h\to 0\\(n\to\infty)}} y_n = y(x_n)$$

则当 h 足够小时

$$y_n \approx y(x_n), \quad n=1,2,\cdots,N$$

即 y_n 可作为(1.5)的解 $y(x)$ 在节点 x_n 处的近似值，并称其为(1.5)的数值解.

以上经离散化途径(引进一系列节点，将连续型的微分方程初值问题化为离散型的差分方程初值问题)建立了求解常微分方程初值问题的方法.

例 1.3 求解方程

$$f(x)=0, \quad x\in(a,b) \tag{1.7}$$

其中 f 是非线性函数，并设(1.7)有唯一解.

假设 f 二次连续可微，则对任意的 $t\in(a,b)$ 有 Taylor 展开式

$$f(x)=f(t)+f'(t)(x-t)+\frac{1}{2}f''(\xi)(x-t)^2, \quad \xi\in(a,b) \tag{1.8}$$

取 $x_0\in(a,b)$，则有

$$f(x)\approx f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)$$

即在 x_0 附近将 f 简化为线性函数. 当 $f'(x_0)\neq 0$ 时线性方程 $f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)=0$有唯一解

$$x_1=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

由(1.8)又有

$$f(x)\approx f(x_1)+f'(x_1)(x-x_1)$$

即在 x_1 附近将 f 简化为线性函数. 当 $f'(x_1)\neq 0$ 时线性方程 $f(x_1)+f'(x_1)(x-x_1)=0$ 有唯一解

$$x_2=x_1-\frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

如此继续可生成序列$\{x_k\}$.若序列收敛于(1.7)的解,则当$|f(x_k)|$足够小时可取x_k作为(1.7)的近似解.

以上经逐次线性化途径(将非线性函数逐次简化为线性函数)建立了求解非线性方程的方法,是一个迭代过程,迭代公式统一为

$$x_{k+1}=x_k-f(x_k)/f'(x_k) \tag{1.9}$$

以上例题中采用的"数据拟合"、"离散化"、"逐次线性化"等处理问题的方式方法,具有一般性,是建立数学问题近似解法的基本思想和途径.当然还有许多细节问题需要深入分析,将在后面各章予以讨论.以上针对三个问题建立的解法只是用一些数学式子描述的求解过程,还不能称其为算法.为了便于编制计算机程序在计算机上完成求解过程,算法必须明确地规定计算机所要执行的运算及执行顺序.例如,上述例1.3的求解过程可以归纳为下述算法:

步0　输入$x_0,\varepsilon,M,k:=0$;

步1　计算$f(x_k)$,当$|f(x_k)|<\varepsilon$时转步6,否则执行步2;

步2　当$k>M$时转步5,否则执行步3;

步3　计算$f'(x_k)$,当$f'(x_k)=0$时转步5,否则执行步4;

步4　计算$x_{k+1}:=x_k-f(x_k)/f'(x_k),k:=k+1$,转步1;

步5　输出失败信息,停机;

步6　输出k,x_k,停机.

此处当f或f'为非有理函数时,还需确定求$f(x_k)$及$f'(x_k)$的算法.

同一数学问题,可以建立不同的算法,只有当根据算法在计算机上很快地计算出问题的可靠结果时,才显示出它们的实用价值.算法分析主要指效率及可靠性分析.

算法的效率以在计算机上运行所花费的时间来衡量.例如求解线性代数方程组

$$
\begin{cases}
a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n=b_1 \\
a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n=b_2 \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
a_{n1}x_1+a_{n2}x_2+\cdots+a_{nn}x_n=b_n
\end{cases}
\tag{1.10}
$$

大家熟悉的 Cramer 方法给出解的表达式

$$
x_j=D_j/D,\quad j=1,2,\cdots,n \tag{1.11}
$$

其中 D 是系数行列式，D_j 是系数行列式中第 j 列换为右端 $(b_1,b_2,\cdots,b_n)^T$ 所成的行列式，按照 Cramer 方法，解一个 n 阶线性代数方程组，需要计算 $n+1$ 个 n 阶行列式，每计算一个 n 阶行列式需要进行 $(n-1)\cdot n!$ 次乘法运算和 $n!-1$ 次加法运算. 最后还要进行 n 次除法运算才能最终求出方程组的解. 如果只计乘除法运算(在计算机上加减法运算相对于乘除法运算快得多)，解一个 20 阶的方程组大约需进行 9.7×10^{20} 次乘除法运算，如此大的计算量，对于运行速度最快的计算机也要连续工作几万年，这显然是不现实的. 若应用本书第二章将要介绍的 Gauss 消去法，解一个 n 阶线性代数方程组所需乘除法运算次数仅为 $n^3/3$ 左右. 相比之下后者计算量小得多. 又如对于迭代法，迭代序列的收敛速度是影响效率的主要因素，因而各种加速技术的研究十分有意义，这是提高效率的重要措施. 从经济角度考虑必须注重算法的效率分析.

数学问题的算法一般是近似的，又由于计算机字长的限制，计算结果通常只是问题的近似解. 特别是象例 1.2 那样的连续型问题也只能给出离散的数值解. 解是否附合客观实际，是人们最关心的问题，算法的可靠性分析，本质上是误差分析. 分析误差的产生、误差的传播及对计算结果的误差估计. 在科学与工程计算中会遇到各种误差. 例如建立数学模型通常要忽略某些次要因素，经一定的简化手续，因而数学模型与被描述的问题一般不会十分相符，这种差异称为模型误差. 又如模型中一些参数可能是观测得到的，观测值与真值的差异称为观测误差. 对于一个数学模型来说，上述误差是先天性的. 所谓误差分析，这里是指分析计算过程产生的误

差，它们是由方法或计算工具引起的. 其一是截断误差，其二是舍入误差. 截断误差的原意是指在一个无穷级数中截取前有限项代替该无穷级数时产生的误差，在这里泛指由不准确的方法造成的误差，因而截断误差又称为方法误差. 此外，由于计算机字长的限制，在算法运行过程中，参与运算的数据及每步运算结果因舍入造成的误差称为舍入误差，含入误差即依赖于计算工具也与方法有关.

科学与工程计算要求对计算结果给出误差估计. 如果这个估计不直接依赖于计算结果，可以事前做出，称其为先验估计. 如果这个估计依赖于计算结果，只当求出计算结果后才能做出，称其为后验估计. 由于截断误差只与方法有关，所以只要借助于数学的理论与分析方法便可做出估计. 如例 1.1 中设函数 $y(x)$ $n+1$ 次连续可微，可以证明

$$y(x)-p(x)=\frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{k=0}^{n}(x-x_k), \qquad x\in[a,b] \tag{1.12}$$

$\xi\in(a,b)$ 且依赖于 x. 若已知 $\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|y^{(n+1)}(x)|\leqslant M$，则有

$$|y(x)-p(x)|\leqslant\frac{M}{(n+1)!}\prod_{k=0}^{n}|x-x_k|, \qquad x\in[a,b] \tag{1.13}$$

这是截断误差的先验估计(或称先验界).

舍入误差的分析比截断误差复杂得多，因为原始数据可能带有误差，而几乎每步运算又要引进新的舍入误差，这些误差随运算过程传播必将影响最终计算结果. 如果算法能较好地抑制舍入误差的传播，则称其为数值稳定的，否则称数值不稳定. 按照运算顺序逐步分析是困难的，通常采用向后误差分析方法，即利用摄动理论借助原始数据的摄动估计计算结果的误差. 理论上的误差界一般总是保守的. 利用概率统计方法将舍入误差视为遵从某种分布的随机变量，并由此导出计算结果的误差分布，基于这种概率误差分析的方法给出的误差估计往往更接近实际.

此外,算法的逻辑结构复杂性及存贮量大小也是算法分析的主要内容. 总之在设计算法时应综合考虑效率、可靠性、逻辑结构复杂性及存贮量等诸项指标.

以上简述了算法的建立与分析,这样的初步认识对理解本书各部分内容是有益的. 下面介绍近代数学基础的一些概念和有关结论,不予深入分析仅作为予备知识供读者参考.

§1.2 赋范线性空间

近代数学基础是在抽象的元素集合中引入代数结构和度量结构,从而揭示了那些初看起来似乎毫无关系的概念之间的内在联系.

定义 2.1 设 X 是非空集合,K 是数域,定义 X 中元素的加法运算:对于$\forall\ x,y\in X$,对应一个 $u\in X$,称为 x 与 y 的和,记为 $u=x+y$,且满足

(1) 对于$\forall\ x,y\in X$,

$x+y=y+x$;

(2) 对于$\forall\ x,y,z\in X$,

$(x+y)+z=x+(y+z)$;

(3) X 中存在唯一的零元素 o,对$\forall\ x\in X$,

$x+o=x$;

(4) 对于$\forall\ x\in X$,X 中相应存在一个关于加法运算的逆元素$-x$,使得

$$x+(-x)=o \quad (X\text{ 中零元素})$$

又定义 X 中元素与 K 中数的乘法运算:对于$\forall\ x\in X$ 及$\forall\ \lambda\in K$,对应一个 $v\in X$,称为 λ 与 x 的积,记为 $v=\lambda x$,且满足

(5)对于$\forall\ \lambda,\mu\in K$ 及$\forall\ x\in X$,

$\lambda(\mu x)=(\lambda\mu)x$,

$(\lambda+\mu)x=\lambda x+\mu x$;

(6)对于$\forall\ \lambda\in K,\forall\ x,y\in X$，

$$\lambda(x+y)=\lambda x+\lambda y;$$

(7)$1x=x,0x=o$(X 中零元素)

则称 X 是数域 K 上的线性空间. 设 L 是 X 的非空子集，如果对于$\forall\ x,y\in L$ 及$\forall\ \lambda\in K$，有

$$x+y\in L,\qquad \lambda x\in L$$

则称 L 是 X 的子空间.

显然线性空间的子空间仍是线性空间，由线性空间 X 的非空子集 M 中任意有限个元素的所有线性组合构成的集合是 X 的子空间，称为由 M 张成的子空间，记为 $\mathrm{Span}M$.

上述定义中，所谓数域是指对加、减、乘、除(0 不做除数)运算封闭的数集，实数集 R 或复数集 C 都是数域. 当 $K=R$ 时称 X 是实线性空间，当 $K=C$ 时称 X 是复线性空间. 显然 R 本身是实线性空间，C 本身是复线性空间，又如 R^n 表示 n 维实向量集合，按照向量加法及数乘向量运算 R^n 是实线性空间，同样 n 维复向量集合 C^n 是复线性空间. 再如 $C[a,b]$表示定义在区间$[a,b]$上的实值连续函数集合，按照函数加法及数乘函数运算 $C[a,b]$是实线性空间. P 表示实系数多项式集合，P 是 $C[a,b]$的子空间. P_n 表示次数不超过 n 次的实系数多项式集合，P_n 是 P 的子空间，当然也是 $C[a,b]$的子空间，且是由子集$\{1,t,t^2,\cdots,t^n\}$张成的子空间.

对于数域 K 上线性空间 X 的有限子集：$\{x_1,x_2,\cdots,x_n\}$，如果关系式

$$\lambda_1x_1+\lambda_2x_2+\cdots+\lambda_nx_n=o,\qquad \lambda_j\in K$$

当且仅当 $\lambda_1=\lambda_2=\cdots=\lambda_n=0$ 时才成立，则称有限集$\{x_1,x_2,\cdots,x_n\}$线性无关，否则称线性相关. 设 M 是 X 的非空子集，如果 M 中任何有限子集都线性无关，则称 M 是线性无关集，否则称线性相关集.

定义 2.2 设 X 是线性空间，如果 X 包含一个由 n 个(n 是正整数)元素组成的线性无关集，且 X 中元素多于 n 个的任何集都

是线性相关集，则称 X 是有限维线性空间，n 称为 X 的维数，记为 $\dim X=n$.

若 X 是数域 K 上的 n 维(n 是正整数)线性空间，则 X 中每一个由 n 个元素组成的线性无关集称为 X 的一个基，若 $\{e_1,e_2,\cdots,e_n\}$ 是 X 的一个基，则 $\forall\ x\in X$，有唯一表达式

$$x=\sum_{j=1}^{n}\alpha_j e_j$$

其中 $\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n\in K$ 称为 x 在基 $\{e_1,e_2,\cdots,e_n\}$ 下的坐标.

R^n、C^n 是 n 维线性空间，最常用的基是

$$e_1=(1,0,\cdots,0)^T$$

$$e_2=(0,1,0,\cdots,0)^T$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$e_n=(0,\cdots,0,1)^T$$

第 j 个基元的第 j 个分量为 1，其余分量均为零.

P_n 是 $n+1$ 维线性空间，最常用的基是幂函数：$1,t,t^2,\cdots,t^n$.

仅含零元素的集合 $\{o\}$ 也是线性空间，且是有限维线性空间，$\dim\{o\}=0$. 不是有限维的线性空间称为无限维的. $C[a,b]$ 及 P 是无限维线性空间.

定义 2.3 设 X 是数域 K 上的线性空间，定义实值函数 $\|\ \|:X\to R$，使得 $\forall\ x,y\in X$ 及 $\forall\ \lambda\in K$ 满足

(1) 非负性，$\|x\|\geqslant 0$，当且仅当 $x=o$ 时 $\|x\|=0$；

(2) 齐次性，$\|\lambda x\|=|\lambda|\,\|x\|$；

(3) 三角不等式，$\|x+y\|\leqslant\|x\|+\|y\|$　　(2.1)

则称 $\|\ \|$ 是 X 上的范数，X 称为数域 K 上的赋范线性空间，记为 $(X,\|\ \|)$ 或仍简记为 X. 赋范线性空间中的元素又称为点. 又定义

$$d(x,y)=\|x-y\| \tag{2.2}$$

称为 X 上由范数 $\|\ \|$ 导出的距离.

定义 2.4 设 $(X,\|\ \|)$ 是赋范线性空间，序列 $\{x_k\}\subset X$

(1) 如果$\exists\ x_0\in X$,对于$\forall\ \varepsilon>0$,存在正整数N,当$k>N$时

$$\|x_k-x_0\|<\varepsilon$$

即$\lim\limits_{k\to\infty}\|x_k-x_0\|=0$,则称$\{x_k\}$按范数$\|\ \|$收敛,$x_0$称为$\{x_k\}$的极限,记为

$$\lim_{k\to\infty}x_k=x_0,\text{或 } x_k\to x_0$$

(2) 如果对于$\forall\ \varepsilon>0$存在正整数N,当$k,m>N$时

$$\|x_k-x_m\|<\varepsilon$$

即$\lim\limits_{k,m\to\infty}\|x_k-x_m\|=0$,则称$\{x_k\}$是$X$中的Cauchy序列.

显然$(X,\|\ \|)$中的收敛序列是Cauchy序列,反之不真.若$(X,\|\ \|)$中每个Cauchy序列都是收敛序列,则称$(X,\|\ \|)$是完备的,可以证明有限维赋范线性空间是完备的.

例如对于R^n或C^n中的任意向量$x=(x_j)$,定义

$$\|x\|_2=(\sum_{j=1}^{n}|x_j|^2)^{1/2} \tag{2.3}$$

可以验证$\|\ \|_2$满足范数定义的三个条件,并称为向量2—范数,可见R^n与C^n都是赋范线性空间,由$\|\ \|_2$导出的距离

$$\|x-y\|_2=(\sum_{j=1}^{n}|x_j-y_j|^2)^{\frac{1}{2}} \tag{2.4}$$

其中$x=(x_j)$,$y=(y_j)$都是R^n或C^n上的向量.

对于R^n或C^n中的序列$\{x^{(k)}\}$:$x^{(k)}=(x_j^{(k)})$及$x=(x_j)$,

$$\lim_{k\to\infty}\|x^{(k)}-x\|_2=\lim_{k\to\infty}(\sum_{j=1}^{n}|x_j^{(k)}-x_j|^2)^{\frac{1}{2}}=0$$

的充分必要条件是

$$\lim_{k\to\infty}x_j^{(k)}=x_j \qquad j=1,2,\cdots,n$$

因而在R^n或C^n中序列按范数$\|\ \|_2$收敛即向量序列按坐标收敛,由于R^n与C^n都是有限维的,所以都是完备的赋范线性空间,从而其中任何Cauchy序列都是收敛序列.

又如对于$C[a,b]$中的任意连续函数$f(t)$,定义