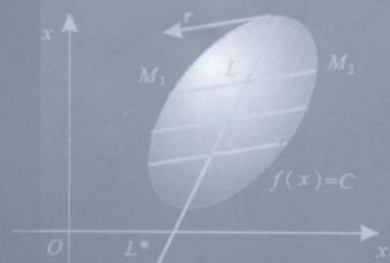


浙江大学出版社



数值分析引论

易大义 陈道琦 编

0241

Y48-2

462295

数值分析引论

易大义 陈道琦 编

3

浙江大学出版社

内 容 简 介

DV69/13

本书系统地介绍了科学和工程计算中近代的、常用的计算方法,概念及应用,着重培养学生的科学计算能力。主要内容有:插值法、函数与数据的逼近、数值积分与数值微分、解方程组的直接法、解大型稀疏线性方程组的迭代法、非线性方程(组)数值解法、常微分方程数值解法、矩阵特征值的计算方法等。

书中主要计算方法都写有算法或计算步骤,同时书内还配有较多的数值计算例子。

本书可作为高等理工院校研究生的计算方法教材,也可作为大学生、工程技术人员学习计算方法的参考书。

数值分析引论

易大义 陈道琦 编

责任编辑 贾吉柱

*

浙江大学出版社出版

(杭州玉古路 20 号 邮政编码 310027)

(E-mail: zupress@mail.hz.zj.cn)

浙江大学出版社电脑排版中心排版

浙江大学华家池印刷厂印刷

浙江省新华书店发行

*

850×1168 32 开 16 印张 430 千字

1998 年 9 月第 1 版 2000 年 4 月第 2 次印刷

印数:1001—3000

ISBN 7-308-02054-1/O · 228 定价:18.00 元

前 言

随着计算机技术的发展和科学技术的进步,科学与工程计算(简称科学计算)的应用范围已扩大到许多学科领域,已形成了一些边缘学科,例如,计算物理、计算力学、计算化学等。目前,实验、理论、计算已成为人们进行科学活动的三大方法。对从事工程与科技工作的人员,学习和掌握计算方法(数值分析)是非常必要的。

本书是为理工院校工学硕士研究生学习计算方法(数值分析)而编写的。内容为数值分析的基本概念及理论,介绍科学计算中近代的、常用的、有效的解各种数学问题的计算方法,通过学习与实习培养学生的科学计算能力。

对于大学(本科)中未学过计算方法的读者,可选学书中未带星号部分内容,学过计算方法(简单的)读者,可选学书中部分内容(包括带星号的内容)。

本书每一章的主要方法都写有算法或计算步骤,可供读者学习、应用时参考。书内还配有较多的数值例子,便于读者自学。

学习本书需要具备微积分、线性代数、常微分方程的基础知识,本书还可作为工程技术人员学习计算方法的参考书。

本书第一、二、三、五、六、九章由易大义编写,第四、七、八章由陈道琦编写。

书中缺点和错误敬请读者批评指正。

易大义 陈道琦

1996年8月于浙大求是园

目 录

第一章 数值计算引论	1
§ 1 数值分析研究对象	1
§ 2 误差来源及种类	1
§ 3 误差的基本概念	3
3.1 绝对误差和相对误差	3
3.2 有效数字	4
§ 4 求函数值的误差估计	6
§ 5 在数值计算中应注意的几个问题	9
习题 1	14
第二章 插值法	16
§ 1 引言	16
§ 2 拉格朗日插值多项式	18
2.1 插值基函数	19
2.2 拉格朗日(Lagrange)插值多项式	19
2.3 插值多项式的余项	22
2.4 算法与例子	24
§ 3 逐步线性插值法	25
3.1 列维尔算法	26
3.2 算法与例子	29
§ 4 差商与牛顿插值多项式	31
4.1 差商(均差)及性质	31
4.2 牛顿插值多项式	32
4.3 算法与例子	35

§ 5	差分,等距节点插值多项式	39
5.1	差分及性质	39
5.2	牛顿向前插值,向后插值公式	42
§ 6	埃尔米特插值	45
§ 7	分段插值法	53
7.1	高次插值的龙格(Runge)现象	53
7.2	分段线性插值	54
7.3	分段三次埃尔米特插值	55
§ 8	三次样条插值	57
8.1	引言	57
8.2	三次样条插值函数的表达式	60
8.3	三弯矩方程	63
8.4	算法与例子	68
8.5	三次样条插值函数的收敛性	73
§ 9*	B 样条函数及性质	73
9.1	半截幂函数	73
9.2	样条函数	74
9.3	B 样条函数及性质	76
习题 2		84

第三章 函数与数据的逼近

§ 1	引言	87
§ 2	连续函数空间,正交多项式理论	92
2.1	连续函数空间	92
2.2	正交多项式理论	96
§ 3	最佳平方逼近	108
3.1	法方程	108
3.2	用多项式作最佳平方逼近	113
3.3	用正交多项式作最佳平方逼近	114

§ 4 最小二乘逼近	119
4.1 一般的最小二乘逼近	119
4.2 算法与例子	126
4.3 用正交多项式作曲线拟合算法	131
4.4 非线性模型举例	136
§ 5* 用 B 样条作最小二乘逼近	142
§ 6* 近似最佳一致逼近多项式	145
6.1 函数展开为 Chebyshev 级数	147
6.2 拉格朗日插值余项的极小化	151
6.3 泰勒级数的缩减	156
习题 3	159

第四章 数值积分与数值微分

§ 1 插值型数值求积公式	162
1.1 一般求积公式及其代数精度	162
1.2 插值型求积公式	163
1.3 Newton-Cotes 求积公式	165
1.4 Newton-Cotes 求积公式的余项	168
1.5 Newton-Cotes 公式的数值稳定性和收敛性	170
§ 2 Gauss 型求积公式	171
2.1 最高代数精度求积公式	171
2.2 Gauss 点与正交多项式的联系	173
2.3 Gauss 求积公式的余项	174
2.4 Gauss 求积公式的数值稳定性和收敛性	174
2.5 几个常用的 Gauss 型求积公式	176
2.6* 低阶 Gauss 型求积公式构造方法	178
§ 3 复化数值求积公式	180
3.1 复化数值求积法	180
3.2 复化梯形公式	181

3.3	复化 Simpson 公式	182
3.4	复化求积公式的收敛阶	183
§ 4	外推方法	184
4.1	外推原理	184
4.2	复化梯形公式余项的渐近展开	185
4.3	Romberg 算法	186
4.4*	外推法的进一步讨论	187
§ 5	自适应求积方法	189
5.1	自适应计算问题	189
5.2	自适应算法	189
§ 6*	奇异积分和振荡函数积分的数值方法	191
6.1	奇异积分计算	191
6.2	振荡函数积分的计算	193
§ 7*	二元函数数值积分	195
7.1	矩形域上乘积型求积公式	196
7.2	三角形域上面积坐标积分法	197
§ 8	数值微分	199
8.1	插值函数法	199
8.2	差分算子近似微分算子法	202
8.3*	隐式方法	205
习题 4		207

第五章 解线性方程组的直接法 209

§ 1	引言	209
§ 2	初等矩阵	211
2.1	初等下三角阵(高斯变换)	212
2.2	初等置换阵	212
2.3	初等反射阵(Householder 变换)	213
2.4	平面旋转矩阵(Givens 变换)	218

§ 3	高斯消去法	221
§ 4	高斯选主元素消去法	229
4.1	完全主元素消去法	230
4.2	列主元素消去法	233
4.3	列主元高斯-约当消去法	235
§ 5	用直接三角分解法解线性方程组	240
5.1	矩阵的三角分解	240
5.2	不选主元三角分解法	243
5.3	部分选主元三角分解法	246
§ 6	解对称正定矩阵线性方程组的平方根法	249
6.1	对称正定矩阵及性质	249
6.2	平方根法	252
6.3	改进的平方根法	254
§ 7	解三对角线方程组的追赶法	258
§ 8*	用直接法解大型带状方程组	262
8.1	用分解法解大型等带宽方程组	262
8.2	用改进平方根法解大型变带宽对称正定方程组	269
§ 9	向量, 矩阵范数, 矩阵的条件数	274
9.1	向量, 矩阵范数	274
9.2	矩阵的条件数, 病态方程组	281
9.3*	关于病态方程组解法	287
§ 10	矩阵的正交分解(QR 分解)	292
习题 5		299

第六章 解大型稀疏线性方程组的迭代法

§ 1	引言、例子	302
§ 2	基本迭代法	305
2.1	雅可比(Jacobi)迭代法	306
2.2	高斯-塞德尔迭代法(G-S)	307

2.3 解大型稀疏线性方程组的逐次超松弛迭代法(SOR)	309
§ 3 迭代法的收敛性	312
3.1 一阶定常迭代法的基本定理	312
3.2 关于解特殊线性方程组迭代法的收敛性	317
3.3* 迭代法收敛速度	323
3.4 分块迭代法	327
§ 4* 梯度法	331
4.1 等价性定理	332
4.2 最速下降法	335
4.3 共轭梯度法(CG)	336
习题 6	347

第七章 非线性方程(组)数值解法

§ 1 基础知识	349
1.1 非线性方程,非线性方程组	349
1.2 非线性方程(组)求解的特点	350
1.3* 映射的 Jacobi 阵和 F 导数	351
1.4 收敛性和收敛阶	352
§ 2 非线性方程的二分法和插值法	353
2.1 二分法	353
2.2 正割法	355
2.3 抛物线法	357
2.4* 反插值法	358
§ 3 解 $x=g(x)$ 的简单迭代法	359
3.1 简单迭代法公式	359
3.2 收敛定理	361
§ 4 迭代的加速法	364
4.1 Aitken 加速方法	364

4.2 Steffenson 迭代方法	366
§ 5 解 $f(x)=0$ 的 Newton 迭代法	367
5.1 Newton 迭代公式	367
5.2 Newton 法收敛定理	368
5.3 Newton 下山法	372
5.4 Newton 迭代算法	373
§ 6* 解方程组 $x=G(x)$ 的简单迭代法	374
6.1 简单迭代法	374
6.2 简单迭代的收敛性	375
§ 7 解方程组 $F(x)=0$ 的 Newton 法	377
7.1 Newton 法迭代公式	378
7.2 收敛定理	378
7.3 Newton 下山法	380
7.4* m 步 Newton 法	381
7.5 算法	382
§ 8* quasi-Newton 法	383
8.1 Broyden 方法和一般 quasi-Newton 法	383
8.2 几个秩 2 quasi-Newton 法	384
习题 7	387

第八章 常微分方程数值解法..... 390

§ 1 基本概念	390
1.1 常微分方程初值问题的一般解法	390
1.2 初值问题数值解基本概念	392
§ 2 Euler 方法	394
2.1 显式 Euler 方法	394
2.2 隐式 Euler 方法和梯形方法	396
2.3 预估-校正 Euler 方法	398
2.4 单步法的局部截断误差、整体截断误差	399

§ 3	Taylor 方法和 Runge-Kutta 方法	402
3.1	Taylor 方法	402
3.2	Runge-Kutta 方法的一般形式	403
3.3	常用低阶 Runge-Kutta 方法	404
3.4	其它 Runge-Kutta 方法	408
§ 4	单步法的进一步讨论	409
4.1	收敛性与相容性	409
4.2	稳定性	410
4.3	均匀步长重复 Richardson 外推法	413
4.4	变步长自动选择	413
§ 5	Adams 方法和一般线性多步法	414
5.1	Adams 方法	415
5.2	一般线性多步法	420
§ 6	线性多步法的收敛性与稳定性	424
6.1*	常系数线性差分方程	424
6.2	线性多步法的方法稳定性	426
6.3*	数值稳定性	427
§ 7	一阶方程组初值问题数值方法	429
7.1	数值方法推广到方程组	429
7.2*	刚性方程组	431
§ 8*	二阶常微分方程边值问题数值方法	432
8.1	打靶法	433
8.2	有限差分法	433
习题 8		435

第九章	矩阵特征值与特征向量计算方法	437
§ 1	引言	437
§ 2	幂法及反幂法	442
2.1	幂法	442

2.2	加速方法	447
2.3	反幂法(或逆迭代)	450
§ 3	豪斯荷尔德方法	454
3.1	正交相似变换约化一般矩阵为上 Hessenberg 阵	455
3.2	正交相似变换约化对称阵为对称三对角阵	460
§ 4	QR 算法	462
4.1	引言	462
4.2	QR 算法及收敛性	463
4.3	带原点位移的 QR 方法	465
4.4	用单步 QR 方法计算上 Hessenberg 阵特征值	467
4.5*	稳式对称 QR 方法	471
§ 5*	计算对称矩阵特征值的 Jacobi 方法	480
5.1	引言	480
5.2	古典 Jacobi 方法	481
5.3	Jacobi 过关法	489
习题 9		490
参考文献		494

第一章 数值计算引论

§ 1 数值分析研究对象

随着计算机技术的发展,科学技术的进步,科学与工程计算(简称科学计算)的应用范围已扩大到许多学科领域,形成一些边缘学科,例如计算物理、计算化学、计算力学等。目前,实验、理论、计算已成为人类进行科学活动的三大方法。

为了解某科学与工程实际问题,首先是依据物理、力学规律建立问题的数学模型,这些模型一般为代数方程、微分方程等。科学计算的一个重要方面就是要研究解这些数学问题的数值计算方法(适合计算机计算的计算方法),然后通过计算软件在计算机上计算出实际需要的结果。数值分析内容包括:函数的插值与逼近方法,微分与积分计算方法,线性方程组与非线性方程组计算方法,常微分与偏微分数值解等。

本书将介绍数值分析的基本概念、理论及解各种数学问题的有效计算方法。

§ 2 误差来源及种类

在工程和科学计算中需要估计计算结果的精确度,而下述几种误差可能影响计算结果的精确度。

1. 模型误差

由实际问题建立数学模型,要忽略一些次要因素的影响,要简化许多条件。因此,数学模型是实际问题理想化、简化得到的,是实际问

题的近似。把实际问题的解与数学模型的解之间的误差称为模型误差。

2. 观测误差

数学模型中包含有一些物理量(例如时间、温度、长度、电压等)(初始数据)大多都是由观察、测量得到的。由于受到测量工具的限制,测量的数据只能是近似的,称测量值与真值之间误差为观测误差。

3. 截断误差

在求解某数学问题时,用有限的过程代替无限过程所产生的误差称为截断误差(或方法误差)。

例1 用 $f(x)$ 的 Taylor 展开计算 $f(x)$ 函数值。

$$\begin{aligned} \text{设有 } f(x) &= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \\ &\dots \\ &+ \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + R_n(x) \end{aligned}$$

其中 $R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}$, ξ 在 x_0 与 x 之间。

当我们用近似公式来代替 $f(x)$ 进行计算时,即

$$f(x) \approx P_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k \quad (\text{当 } |x - x_0| \text{ 较小})$$

时)

则数值方法的截断误差为

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}$$

4. 舍入误差

有了求解数学问题的计算公式后,用计算机进行数值计算时,由于计算机字长的位数有限,原始数据只能用有限位数表示,即要舍入。且当两数进行算术运算时,其结果也要进行舍入,这种由舍入产生的误差称为舍入误差。

例如, $\pi = 3.1415926\cdots$

如用 3.1416 代替 π , 则产生的舍入误差

$$\pi - 3.1416 = -0.0000073\cdots$$

数值分析主要研究截断误差、舍入误差对计算结果的影响。

§ 3 误差的基本概念

3.1 绝对误差和相对误差

定义 1

(1) 设某量的准确值为 x , x^* 是 x 的近似值, 称 $e(x) = x^* - x$ 为 x^* 的绝对误差 (简称误差)。如果 $|e(x)| = |x^* - x| \leq \epsilon$, 称 ϵ 为 x^* 的绝对误差限, 即 $x^* - \epsilon \leq x \leq x^* + \epsilon$, 在应用上常记为 $x = x^* \pm \epsilon$ 。

(2) 绝对误差与准确值比值, 即

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

称为 x^* 的相对误差, 如果 $|e_r(x)| = \left| \frac{x^* - x}{x} \right| \leq \delta$, 称 δ 为 x^* 的相对误差限。

例 2 设 $\pi = 3.1415926\cdots$, 用四舍五入方法取 4 位小数得近似数 $\pi^* = 3.1416$, 求 π^* 绝对误差限。显然有,

$$|e(\pi)| = |\pi - \pi^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

例 3 设 $x_1 = 1.234, x_2 = 0.002$

$$x_1^* = 1.233, x_2^* = 0.001$$

估计近似数 x_1^*, x_2^* 的绝对误差及相对误差。

解 显然 $|e(x_1)| = |x_1^* - x_1| = 10^{-3}$,

$$|e(x_2)| = |x_2^* - x_2| = 10^{-3}$$

这两个近似数绝对误差都是 10^{-3} , 但 x_1^* 是 x_1 一个较好的近似值, 而 x_2 本身就很小时, 而 x_2^* 绝对误差较小不能说明 x_2^* 是 x_2 的一个较好的

近似值,两数的相对误差为:

$$|e_r(x_1)| = \frac{10^{-3}}{1.234} \approx 8.1 \times 10^{-4} = 0.81\%$$

$$|e_r(x_2)| = \frac{10^{-3}}{0.002} = 0.5 = 50\%$$

由此可见,要确定一个量的近似数的精确度,除了要看近似数绝对误差大小之外,还必须考虑该量本身的大小。因此近似数的相对误差是近似数精确度的基本度量,一个近似数 x^* 的相对误差越小,说明近似数越精确。

相对误差是个无名数,它没有量纲。在实际计算中,由于准确值 x 一般是不知道的,通常将

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

作为 x^* 相对误差。事实上,当 $|e_r^*(x)| = |\frac{e(x)}{x^*}|$ 较小时有

$$\frac{e(x)}{x} - \frac{e(x)}{x^*} = \frac{e^2(x)}{xx^*} = \frac{e^2(x)}{x^*(x^* - e(x))} = \frac{(\frac{e(x)}{x^*})^2}{1 - \frac{e(x)}{x^*}} \approx 0$$

3.2 有效数字

定义 2 设 x 为准确值, x^* 为 x 的近似值且 x^* 表示为

$$x^* = \pm (0.a_1a_2\cdots a_n)10^m (m \text{ 为整数})$$

其中 $a_1 \neq 0, a_1 \sim a_n$ 为 $0, 1, \cdots, 9$ 中一个数字。如果 x^* 误差满足

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2}10^{m-n}$$

即 x^* 误差不超过某位的半个单位。称该位到 x^* 的第一位非零数字为 x^* 的有效数字,即 x^* 有 n 位有效数字。或者说 x^* 准确到该位。

1. 当 x^* 是 x 的 a_{n+1} 按四舍五入原则得到的近似数,则 x^* 具有 n 位有效数字。设

$$x = \pm (0.a_1a_2\cdots a_na_{n+1}\cdots)10^m, \text{ 其中 } a_1 \neq 0$$

x^* 是 x 的 a_{n+1} 按四舍五入原则得到的近似数,则有