

数值分析

● 陈昌明

IV
MATH
7015

厦门大学出版社

数值分析

陈昌明

厦门大学出版社

内 容 提 要

本书介绍数值求解的基本方法及基本理论。主要内容包括插值逼近、最佳逼近、数值积分、数值微分、解线性方程组的直接法和迭代法、非线性方程和非线性方程组的解法、矩阵特征值问题的计算以及常微分方程初值问题的数值解法等。

本书可作为高等学校非计算数学专业的教材,也可作为科技人员等的参考书。

目 录

第一章 引论	1
§ 1 数值分析的意义与内容	1
§ 2 误差的来源	2
§ 3 误差的基本概念	3
§ 4 数值运算的误差估计	6
§ 5 数值运算中应掌握的基本原则	9
习题.....	13
第二章 插值逼近	15
§ 1 代数多项式插值.....	16
§ 2 拉格朗日插值多项式.....	19
§ 3 逐次线性插值法.....	21
§ 4 差商与牛顿插值多项式.....	23
§ 5 埃尔米特插值.....	25
§ 6 高次多项式插值的问题.....	30
§ 7 分段低次插值.....	33
§ 8 三次样条插值.....	37
§ 9 三角插值和快速富里埃变换.....	45
习题.....	50
第三 最佳逼近	52
§ 1 正交多项式.....	52
§ 2 最佳一致逼近.....	56
§ 3 最佳平方逼近.....	66

§ 4	最小二乘法	72
	习题	78
第四章	数值积分与数值微分	81
§ 1	数值积分的基本概念与插值型求积公式	81
§ 2	牛顿-柯特斯求积公式	85
§ 3	梯形公式、抛物线公式及其复化公式	88
§ 4	李查逊外推法与龙贝格求积法	95
§ 5	高斯型求积公式	100
§ 6	振荡函数积分和奇异积分的数值计算	110
§ 7	数值微分	113
	习题	119
第五章	解线性方程组的直接法	123
§ 1	高斯消去法	123
§ 2	选主元高斯消去法	127
§ 3	三角分解法	133
§ 4	Doolittle 分解法与 Crout 分解法	135
§ 5	平方根法与改进平方根法	139
§ 6	追赶法	142
§ 7	向量范数和矩阵范数	148
§ 8	直接法的误差分析	153
	习题	159
第六章	解线性方程组的迭代法	162
§ 1	迭代法的收敛性及误差估计	162
§ 2	雅可比迭代法	165
§ 3	高斯-塞德尔迭代法	169
§ 4	松弛迭代法	172
	习题	177

第七章 矩阵特征值问题的计算	179
§ 1 特征值的估计及误差问题	179
§ 2 幂法与反幂法	184
§ 3 雅可比方法	194
§ 4 QR 方法	199
习题	212
第八章 非线性方程和非线性方程组的解法	214
§ 1 平分区间法	214
§ 2 迭代法的基本理论	216
§ 3 牛顿法	225
§ 4 斯蒂芬森法	230
§ 5 弦割法	233
§ 6 抛物线法	238
§ 7 非线性方程组的解法	241
习题	250
第九章 常微分方程初值问题的数值解法	252
§ 1 引言	252
§ 2 显式单步法的基本理论	253
§ 3 几种常见的单步法	258
§ 4 龙格-库塔方法	264
§ 5 线性多步法的基本理论	271
§ 6 线性多步法的构造	277
§ 7 步长的选取	282
§ 8 预估-校正算法	284
§ 9 高阶方程和一阶方程组的数值解法	288
习题	298
参考文献	301

第一章 引 论

本章除了对数值分析的意义与内容作一概述外,主要介绍与误差有关的概念和问题.

§ 1 数值分析的意义与内容

对于刚涉足本书的读者来说,一个很自然的问题是:为什么要学数值分析呢?对这个问题作简单的回答并不难.我们清楚,可用解析方法精确求解的数学问题只是些很特殊的类型,如次数不超过四次的代数方程、特殊的积分和微分方程等.而对工程技术、科学试验、经济、军事等领域提出的许许多多数学问题来说,绝大多数是无法精确求解的,故需要进行数值求解.数值求解的方法称为数值方法.应用数值方法,就可以求得满足一定的数值要求的数值解(或称计算解).通常,数值方法只是近似方法,但也有一些数值方法是精确方法.即使是由精确方法求得的数值解,也难免带有由计算的不准确性而引起的误差,故数值解一般只是数学问题的近似解.但是,没有理由因此而轻视数值方法.试想一下,倘若没有数值方法提供的数值解,面对着成千上万无法精确求解的实际数学问题,人们除了束手无策外,还能做些什么?

数值分析亦称计算方法、数值方法等,其研究数值求解的方法和理论,包括数值方法的构造与应用、数值方法的误差估计、数值方法的收敛性和稳定性等.在这里,我们有必要地指出,许多数值方法往往是通过数值试验而构造出来的,也有些理论结果是受到数值试验启发的.而通过数值试验来验证所构造的数值方法是否

可行,是数值工作者经常采用的手段.一个好的数值方法应具有可靠的理论依据、收敛性和稳定性好、工作量少等优点.

在步入数值分析的具体内容时,可能有初学者会对某些数值现象感到既难以理解又不习惯.如对从小就熟悉的减法运算而言,竟然还存在着两相近数的减法运算的误差很大这一数值现象.类似这种既难以理解又不习惯的感受正说明:数值分析与基础数学课程毕竟有不同之处.可以相信,随着学习内容的逐步深入,不习惯的感受会逐步消失,甚至产生浓厚的学习兴趣.

§ 2 误差的来源

用数学方法求解一实际问题时,首先必须建立数学模型来描述这个问题.为避免数学模型的复杂化而造成求解困难,常常需要进行某些简化处理.如与实际问题有关的变量太多时,可把对实际问题影响不大的变量舍弃掉;有时甚至将变量当作常量处理.诸如此类的简化处理使得所建立的数学模型只是实际问题的近似,这时数学模型本身就带有一种误差,这种误差称为模型误差.

数学模型中一般均含有一些参数,这些参数是人用观测工具观测到的,故难免带有人为或观测工具引起的误差,这种误差称为观测误差.

数学模型可能很复杂,甚至即使不复杂时,我们也往往不能精确求解它,这就需要对数学模型构造数值方法进行求解.数学模型的精确解与数值方法的解之差称作方法误差,或称作截断误差.

当数值方法在计算机上实现运算时,因每次运算都可能因计算机字长的限制而引起一种误差,这种误差称作舍入误差,或称作计算误差.

因模型误差和观测误差涉及到与实际问题有关的专业知识,故这两种误差通常不在我们的考虑范围内,我们主要研究方法误

差和舍入误差.

§ 3 误差的基本概念

对于近似值而言,必须估计其对精确值的近似程度,否则,可以说近似值是毫无价值可言的.我们将引进有关概念,以用于刻划近似值的近似程度.

定义 1.1 设 x^* 是精确值 x 的近似值,称

$$E(x^*) = x - x^*$$

为近似值 x^* 的绝对误差.若已知 $|E(x^*)|$ 的一个上界,即存在 $\eta > 0$,使得

$$|E(x^*)| \leq \eta$$

则称 η 为近似值 x^* 的绝对误差限.通常亦记 η 为 $\eta(x^*)$.

绝对误差是有量纲单位的.

通常精确值 x 是不知道的,因此也就无法求得近似值 x^* 的绝对误差.但是通过实际观测或其他途径,有时候可以估计出 x^* 的绝对误差限.若求得近似值 x^* 的绝对误差限 $\eta(x^*)$,那么就可以知道精确值位于区间 $[x^* - \eta, x^* + \eta]$ 内.

例 1.1 设 $x = \pi = 3.14159265\cdots$,按照四舍五入的舍入原则,分别取 x 的近似值为

$$x_1^* = 3.14, \quad x_2^* = 3.1416, \quad x_3^* = 3.141593$$

对于经四舍五入原则而得到的近似值而言,总可以取其末位半个单位作为该近似值的绝对误差限.故 x_1^* 、 x_2^* 和 x_3^* 的绝对误差限分别为

$$\eta(x_1^*) = \frac{1}{2} \cdot 10^{-2}, \eta(x_2^*) = \frac{1}{2} \cdot 10^{-4}, \eta(x_3^*) = \frac{1}{2} \cdot 10^{-6}$$

我们将在下例中看到,只用绝对误差的概念,还不能“公平”地衡量近似值的近似程度.

例 1.2 取 $x=0.1$ 和 $y=99.9$ 的近似值分别为

$$x^* = 0, \quad y^* = 100$$

显然

$$|E(x^*)| = |E(y^*)| = 0.1$$

那么,能否根据上式就说 x^* 的近似程度同 y^* 的一样吗? 显然不能! 因为后者的近似程度确实比前者好. 这个例子告诉我们,在考虑近似值的近似程度时,不能光看绝对误差的大小,还得看数值本身的大小.

定义 1.2 设 x^* 为精确值 x 的近似值,称

$$E_r(x^*) = \frac{x - x^*}{x} = \frac{E(x^*)}{x}$$

为近似值 x^* 的相对误差. 若已知 $|E_r(x^*)|$ 的一个上界,即存在 $\delta > 0$,使得

$$|E_r(x^*)| \leq \delta$$

则称 δ 为 x^* 的相对误差限. 通常亦记 δ 为 $\delta(x^*)$.

通常精确值 x 是不知道的,故实际计算中也取相对误差为

$$E_r(x^*) = \frac{x - x^*}{x^*} = \frac{E(x^*)}{x^*}$$

相对误差是无量纲单位的.

现在再回头来看例 1.2,易得

$$|E_r(x^*)| = 1 > |E_r(y^*)| = \frac{1}{999}$$

由此可见, y^* 的近似程度比 x^* 的好.

定义 1.3 若近似值 x^* 的绝对误差限是某一位上的半个单位,且该位到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位,则称 x^* 具有 n 位有效数字.

将近似值 x^* 写成

$$x^* = \pm 0. \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n \times 10^m \quad (1.1)$$

若

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

由定义 1.3 可知, x^* 具有 n 位有效数字. 其中 $a_1, a_2, \dots, a_n$ 均为 $0, 1, \dots, 9$ 中的某个数字, $a_1 \neq 0, m$ 为整数.

回到例 1.1, 由定义 1.3, x_1^*, x_2^* 和 x_3^* 分别具有 3、5 和 7 位有效数字.

关于有效数字, 应注意以下三点:

(1) 为将有效数字这一概念施用到任一实数上, 我们称精确值具有无穷多位有效数字.

(2) 近似值的有效数字位与其小数点后有几位数字并无直接关系.

例如, 取 $x = \pi$ 和 $y = 0.0537$ 的近似值分别为

$$x^* = 3.142, \quad y^* = 0.054$$

注意到, x^* 和 y^* 的小数点后均有 3 位数字, 但 x^* 有 4 位有效数字, 而 y^* 却只有 2 位有效数字.

(3) 要注意近似值的正确写法.

例如, 我们不能将 $x = 1.995$ 的具有 3 位有效数字的近似值 $x^* = 2.00$ 写成 $x^* = 2$.

定理 1.1 设形如(1.1)的近似值 x^* 具有 n 位有效数字, 则其相对误差 $E_r(x^*)$ 满足

$$|E_r(x^*)| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}$$

反之, 若 x^* 的相对误差 $E_r(x^*)$ 满足

$$|E_r(x^*)| \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{1-n}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证明 由(1.1)及 x^* 具有 n 位有效数字, 可得

$$|x^*| \geq \alpha_1 \times 10^{m-1}, \quad |E(x^*)| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

则

$$|E_r(x^*)| = \frac{E(x^*)}{|x^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{\alpha_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{1-n}$$

反之,由

$$|x^*| \leq (\alpha_1 + 1) \times 10^{m-1}, \quad |E_r(x^*)| \leq \frac{1}{2(\alpha_1 + 1)} \times 10^{1-n}$$

可得

$$\begin{aligned} |E(x^*)| &= |x^*| |E_r(x^*)| \\ &\leq (\alpha_1 + 1) \times 10^{m-1} \times \frac{1}{2(\alpha_1 + 1)} \times 10^{1-n} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \end{aligned}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字. ■

定理 1.1 表明,有效数字位越多,相对误差限越小;反之,相对误差限越小,有效数字位越多.

例 1.3 欲使 $\sqrt{3}$ 的近似值的相对误差的绝对值不超过 $\frac{1}{100}$, 那么近似值应取几位有效数字?

解 由 $\sqrt{3} = 1.7\cdots$, 可知 $\alpha_1 = 1$. 据定理 1.1, 只要取有效数字位 $n=3$, 就有

$$|E_r(x^*)| \leq \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{1-n} < \frac{1}{100}$$

§ 4 数值运算的误差估计

定理 1.2 设 x_1^* 和 x_2^* 分别是精确值 x_1 和 x_2 的近似值, 则

$$E(x_1^* \pm x_2^*) = E(x_1^*) \pm E(x_2^*) \quad (1.2)$$

$$E(x_1^* x_2^*) = x_1 E(x_2^*) + x_2^* E(x_1^*) \quad (1.3)$$

$$E\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) = \frac{E(x_1^*)}{x_2^*} - \frac{x_1 E(x_2^*)}{x_2 x_2^*} \quad (1.4)$$

$$E_r(x_1^* \pm x_2^*) = \frac{1}{x_1 \pm x_2} [x_1 E_r(x_1^*) \pm x_2 E_r(x_2^*)] \quad (1.5)$$

$$E_r(x_1^* x_2^*) = E_r(x_2^*) + \frac{x_2^*}{x_1 x_2} E(x_1^*) \approx E_r(x_1^*) + E_r(x_2^*) \quad (1.6)$$

$$E_r\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) = \frac{x_2}{x_2^* x_1} E(x_1^*) - E_r(x_2^*) \approx E_r(x_1^*) - E_r(x_2^*) \quad (1.7)$$

证明 $E(x_1^* \pm x_2^*) = (x_1 \pm x_2) - (x_1^* \pm x_2^*)$
 $= (x_1 - x_1^*) \pm (x_2 - x_2^*)$
 $= E(x_1^*) \pm E(x_2^*)$

$$E(x_1^* x_2^*) = x_1 x_2 - x_1^* x_2^*$$

$$= (x_1 x_2 - x_1 x_2^*) + (x_1 x_2^* - x_1^* x_2^*)$$

$$= x_1 E(x_2^*) + x_2^* E(x_1^*)$$

$$E\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) = x_1 E\left(\frac{1}{x_2^*}\right) + \frac{E(x_1^*)}{x_2^*} = x_1 \left(\frac{1}{x_2} - \frac{1}{x_2^*}\right) + \frac{E(x_1^*)}{x_2^*}$$

$$= \frac{E(x_1^*)}{x_2^*} - \frac{x_1 E(x_2^*)}{x_2 x_2^*}$$

$$E_r(x_1^* \pm x_2^*) = \frac{E(x_1^* \pm x_2^*)}{x_1 \pm x_2} = \frac{E(x_1^*) \pm E(x_2^*)}{x_1 \pm x_2}$$

$$= \frac{1}{x_1 \pm x_2} [x_1 E_r(x_1^*) \pm x_2 E_r(x_2^*)]$$

$$E_r(x_1^* x_2^*) = \frac{E(x_1^* x_2^*)}{x_1 x_2} = \frac{x_1 E(x_2^*) + x_2^* E(x_1^*)}{x_1 x_2}$$

$$= E_r(x_2^*) + \frac{x_2^*}{x_1 x_2} E(x_1^*) \approx E_r(x_2^*) + E_r(x_1^*)$$

$$E_r\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) = E_r\left(\frac{1}{x_2^*}\right) + \frac{x_2}{x_1 x_2^*} E(x_1^*)$$

$$\begin{aligned}
 &= -E_r(x_2^*) + \frac{x_2}{x_1 x_2^*} E(x_1^*) \\
 &\approx E_r(x_1^*) - E_r(x_2^*)
 \end{aligned}$$

显然, 自变量的误差必然引起函数的误差, 以下给出函数的误差估计.

设 x_i 的近似值为 x_i^* ($i=1, 2, \dots, n$), 则 $y=f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 的近似值为 $y^*=f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$. 利用泰勒展开式, 可得 y^* 的绝对误差为

$$\begin{aligned}
 E(y^*) &= y - y^* \\
 &= f(x_1, x_2, \dots, x_n) - f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) \\
 &\approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} (x - x_i^*) \\
 &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} E(x_i^*)
 \end{aligned} \tag{1.8}$$

y^* 的相对误差为

$$\begin{aligned}
 E_r(y^*) &= \frac{E(y^*)}{y^*} \\
 &\approx \frac{1}{y^*} \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} E(x_i^*) \\
 &= \frac{1}{y^*} \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} x_i^* E_r(x_i^*)
 \end{aligned} \tag{1.9}$$

例 1.4 设 $u^* = \frac{x^*}{y^* z^*}$, 求 $E_r(u^*)$.

解 由(1.7)和(1.6)可得

$$\begin{aligned}
 E_r(u^*) &\approx E_r(x^*) - E_r(y^* z^*) \\
 &\approx E_r(x^*) - E_r(y^*) - E_r(z^*)
 \end{aligned}$$

例 1.5 测得某圆锥体的底面半径 $r^*=10$ 米, 高 $h^*=50$ 米, 已知 r^* 和 h^* 的绝对误差限分别为 0.1 米和 0.2 米, 求测得的圆锥体的体积的绝对误差限和相对误差限.

解 已知 $|E(r^*)| \leq 0.1$ 米, $|E(h^*)| \leq 0.2$ 米. 而测得的圆锥体的体积为

$$V^* = \frac{1}{3} \pi r^{*2} h^*$$

由(1.8)可得

$$\begin{aligned} E(V^*) &\approx \frac{\partial V(r^*, h^*)}{\partial r} E(r^*) + \frac{\partial V(r^*, h^*)}{\partial h} E(h^*) \\ &= \frac{2}{3} \pi r^* h^* E(r^*) + \frac{1}{3} \pi r^{*2} E(h^*) \end{aligned}$$

从而

$$\begin{aligned} |E(V^*)| &\leq \frac{2}{3} \pi r^* h^* |E(r^*)| + \frac{1}{3} \pi r^{*2} |E(h^*)| \\ &= 40\pi (\text{立方米}) \end{aligned}$$

即体积的绝对误差限为 40π 立方米. 而由

$$|E_r(V^*)| = \left| \frac{E(V^*)}{V^*} \right| \leq \frac{40\pi}{V^*} = 0.024$$

可知, 体积的相对误差限为 0.024.

§ 5 数值运算中应掌握的基本原则

一个好的数值方法不但方法误差要小, 而且舍入误差也应能得到控制. 舍入误差若得不到控制, 往往泛滥成灾, 灾难性地影响数值解的精度, 因此对舍入误差千万不可掉以轻心. 但是对舍入误差进行分析是项既复杂而又困难的工作. 试想一下, 面对着大量的运算, 能够对每次运算都进行舍入误差分析吗? 况且舍入误差不但有大小之分, 而且有正负之别, 因此要估计舍入误差积累实际上有多大, 几乎是办不到的. 虽然可以对每次运算的舍入误差做保守的估计, 但由此而求得的舍入误差积累因比舍入误差的实际积累偏大得多, 而显得没有什么实际意义. 因此寻找能较好地接近实际情

况的误差估计方法,是迫切需要的.有关舍入误差的估计方法,在这里就不介绍了.

因对一个给定的数值方法的舍入误差积累进行定量分析极其困难,故人们为了判断舍入误差积累对数值结果的影响程度,对舍入误差进行了定性分析,建立了所谓数值稳定的概念.

定义 1.4 对于给定的数值方法,假设初始数据有舍入误差 ϵ_0 ,并设运算过程中产生的误差仅由 ϵ_0 引起.若由 ϵ_0 引起的误差积累可以得到控制,则称该数值方法数值稳定,否则称该数值方法数值不稳定.

数值不稳定的数值方法是不可取的,而数值稳定的数值方法可以放心地应用.为尽量减少误差造成的危害,应掌握如下几个基本原则:

(1) 避免做除数绝对值很小的除法运算.

设 $|x_2^*|$ 很小,由(1.4)有

$$\left| E\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) \right| \leq \frac{|E(x_1^*)|}{|x_2^*|} + \frac{|x_1 E(x_2^*)|}{|x_2 x_2^*|} \approx \frac{|E(x_1^*)|}{|x_2^*|} + \frac{|x_1 E(x_2^*)|}{|x_2^*|^2}$$

由此可见,除法运算 $\frac{x_1^*}{x_2^*}$ 的绝对误差可能较大.

(2) 避免做两相近数的减法运算.

设 x_1^* 和 x_2^* 是两相近数,那么由

$$|E_r(x_1^* - x_2^*)| = \frac{|E(x_1^* - x_2^*)|}{|x_1^* - x_2^*|}$$

可知,减法运算 $x_1^* - x_2^*$ 的相对误差很大.有时,对计算公式做适当的等价变换,可避免做两相近数的减法运算.若无法避免做两相近数的减法运算,就应该让这两相近数多取几位有效数字,以使得减法运算 $x_1^* - x_2^*$ 能有一定的有效数字位.

(3) 尽量简化计算步骤,减少运算次数.

由于每次运算均可能产生舍入误差,所以简化计算步骤,减少运算次数,可以减少产生舍入误差的机会,这对减少舍入误差具有

重要的意义。

(4) 防止较大数“吃掉”较小数可能造成的危害。

由于计算机上字长的限制,所以当参加运算的数在数量级上悬殊时,可能产生较大数“吃掉”较小数的数值现象。有时较大数“吃掉”较小数对数值结果影响不大,但有时却对数值结果造成严重危害,此时数值结果的精度大大降低。因此必须对具体情况作具体分析。有时,对计算公式做适当的等价变换,或对运算次序做适当的调整,可避免较大数“吃掉”较小数。

例 1.6 当 x 很大时,将 $\frac{1}{\sqrt{x+1}-\sqrt{x}}$ 变换成 $\sqrt{x+1}+\sqrt{x}$,可避免做两相近数的减法运算及除数绝对值很小的除法运算。

当 x_1 与 x_2 相近,并且 x_2 不是很小时,将 $\lg x_1 - \lg x_2$ 变换成 $\lg \frac{x_1}{x_2}$,可避免做两相近数的减法运算。

当 x 与零相近时,将 $\frac{1-\cos x}{\sin x}$ 变换成 $\frac{\sin x}{1+\cos x}$,可避免做两相近数的减法运算及除数绝对值很小的除法运算。

例 1.7 求解一元二次方程

$$ax^2 + bx + c = 0 (a \neq 0, b \neq 0)$$

时,若采用如下求解公式:

$$\begin{cases} x_1 = \frac{-b - \operatorname{sgn}(b) \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \\ x_2 = \frac{c}{ax_1} \end{cases}$$

可避免可能产生的两相近数的减法运算。

例 1.8 若将求和公式 $\sum_{i=1}^n ha_i$ 改写成 $h \sum_{i=1}^n a_i$,可节省 $n-1$ 次乘法计算量。