现代数值分析

李庆扬 易大义 王能超 编

高等学校教材

高等教育出版社

高等学校教材

现代数值分析

李庆扬 易大义 王能超 编

高等教育出版社

（京）112号

内 容 提 要

本书是为在大学本科学习过“计算方法”的理工科高年级学生和研究生学习“数值分析”提高课而编写的教材．内容包括：数值逼近，数值积分补充，线性与非线性方程组常用的数值方法，最优化方法，矩阵特征值与特征向量计算，刚性常微分方程数值解法，同步并行算法等．本书内容新颖，叙述严谨，系统性强，每章后附有习题，便于教学，可作为理工科本科生、研究生“数值分析”或“现代数值分析”课的教材，也可供从事科学与工程计算的科技人员学习参考。

图书在版编目(CIP)数据

现代数值分析／李庆扬等编．—北京：高等教育出版社，1995

高等学校教材

ISBN 7-04-005386-1

Ⅰ．现… Ⅱ．李… Ⅲ．数值计算-计算方法 Ⅳ．①O241 ②TB115

中国版本图书馆CIP数据核字（95）第00431号

高等教育出版社出版

新华书店总店北京发行所发行

三河市科教印刷厂印装

开本 850×1168 1/32 印张13.75 字数350 000

1995年10月第1版 1995年10月第1次印刷

印数0001— 3 000

定价 11.75 元

前　言

我们于1981年编写的《数值分析》教材[1]，自出版以来已被许多高校用作应用数学专业本科生和其他理工科专业研究生“数值分析”课的教材，并且印数已达10多万册。但随着科学技术的迅速发展及教学改革的深入，这本教材已不能适应新的要求。

目前很多高校理工科本科生已普遍开设了“计算方法”，并且本课已列入本科生必修课，它与研究生的学位课“数值分析”内容有一半以上重复。因此，对理工科研究生“数值分析”课内容进行改革，减少重复，增加科学与工程计算需要的数值计算方法和理论，是理工科研究生“数值分析”课内容改革的必然趋势。两年来我们在清华大学和浙江大学等学校的理工科研究生中开设了“数值分析”提高班，针对在大学本科已选学了“计算方法”（约40学时）的学生，课程内容删去了“计算方法”已学的内容，增加了目前工程和科学计算中常用的计算方法及有关理论。如B-样条插值，帕德(Padé)逼近，奇异积分与振荡函数积分计算，积分方程数值解，大型稀疏线性方程组数值解，非线性方程组数值解，最优化方法，刚性常微分方程数值解以及并行算法等。这些内容已远远超出目前出版的众多“数值分析”教材的内容。为了加以区别，将本书定名为《现代数值分析》，它可作为理工科研究生“数值分析”(提高班)课教改的一种尝试，适合于在本科学过“计算方法”的研究生学习。新课仍可在总学时70小时左右完成。根据学生情况和计算机条件，教材各章可有选择地讲授。本书各章还配有习题和上机实习题，对理解和掌握本书内容是十分有益的，读者应选做其中的一部分。我们希望本书的出版有助于提高理工科

研究生“数值分析”课的水平并推动课程内容改革，希望有更多具有不同风格和特点的“数值分析”教材面世。

本书作为一本教材或教学参考书，在编写中力求做到有较强的系统性和可读性，并有一定的理论分析，但仍以介绍计算机上常用的科学计算方法为主，它只要求读者具有理工科本科生的数学基础，因此本书也可供从事工程和科学计算的科技人员学习参考。

本书的编写得到参加工科院校计算数学协作组老师们的支持和鼓励，并提出了不少宝贵意见，我们在此表示感谢。高教出版社的有关领导和编辑对本书的出版给予了大力支持和帮助，对他们付出的辛勤劳动表示衷心的感谢。我们希望使用本书的兄弟院校和广大读者对本书的缺点错误提出宝贵意见，便于今后进一步修改。

作　者

1994.9

试读结束：需要全本请在线购买： www.ertongbook.com

目　　录

试读结束：需要全本请在线购买： www.ertongbook.com

第一章 引 论

§1 现代数值分析的对象与特点

1-1 数学问题与科学计算

数学与科学技术一向有着密切关系并互相影响，科学技术各领域的问题通过建立数学模型与数学产生了紧密的联系，并以各种形式应用于科学与工程．近几十年由于计算机的发展，求解各种数学问题的数值方法愈来愈多地应用于各领域，除了自然科学外，还包括医学、经济管理和社会科学等．

实际应用中所导出的数学模型其完备形式往往不能方便地求出精确解，于是人们就局限于讨论问题的特殊情形或简化了的模型．例如，将复杂的非线性模型忽略一些因素，简化为线性模型，但这样做往往不能满足精度要求．因此目前更多的是用数值计算方法来处理较少简化的模型，而计算量大小往往依赖于所用的数值方法及所需精度．计算机的飞速发展为利用数值方法进行科学计算提供了条件．为适应这种需要数值方法的研究发展也很快，一批适合计算机求解并节省计算量的现代数值方法随之产生并被广泛使用，成为科学与工程计算(简称科学计算)的主要方法．而科学计算、理论研究和科学实验已并列为当今科学研究三大方法．这三种方法是相辅相成又相对独立，相互补充替代而又彼此不可缺少的．科学计算作为一门工具性、方法性及边缘交叉性的新学科已经开辟出了一条自己的发展道路，它包括近年不断形成的各个计算性学科，如计算数学，计算力学，计算物理，计算化学以及各种计算工程学等．计算数学则是它们联系的纽带和公共基础，

是数学问题与计算科学结合的产物，而现代数值分析则是计算数学中最基础的部分，是目前在科学计算中最常用的计算方法。

1-2 数值问题与算法

数值问题是指输入数据(即问题中的自变量与原始数据)与输出数据(结果)之间函数关系的一个确定而无歧义的描述。输入输出数据可用有限维向量表示。根据这种定义，“数学问题”不一定是“数值问题”，但它往往可用“数值问题”逼近。例如、解常微分方程$\frac{dy}{dx}=x^2+y^2$，$y(0)=0$，它不是数值问题，因为输出不是数据而是连续函数$y=y(x)$，但只要规定输出数据是$y(x)$在$x=h$，$2h$，…，nh处的近似值，这就是一个数值问题，它可用欧拉(Euler)折线法或其他数值方法求解，这些数值方法就是算法。一个数值问题的算法是指有明确定义的一些运算，按规定顺序执行一个或多个完整的进程，通过它们将输入数据向量变换成一个输出数据向量。这里所谓运算是指计算机能够执行的算术运算、逻辑运算以及其他与算法有关的运算，而进程是明确描述一个按规定顺序执行的并以步骤为项的有限序列。面向计算机的算法可分为串行算法与并行算法两类。只有一个进程的算法适用于串行计算机，称为串行算法；两个以上进程的算法适合于并行计算机，称为并行算法。对于一个给定的数值问题可以有许多不同的算法，它们都能给出近似答案，但所需计算量和得到精度可能相差很大。一个面向计算机，计算复杂性好，又有可靠理论分析的算法就是一个好算法。所谓计算复杂性好是指在同一精度下，计算时间少的为时间复杂性好，而占用内存空间少的为空间复杂性好。

例1 计算多项式

$$p(x)=a_0x^n+\cdots+a_{n-1}x+a_n$$

的值。

这是一个数值问题，输入数据为a_0，…，a_n及x，输出数据为

$p(x)$，若直接由x算出$x^2,\cdots,x^n$再乘相应系数a_{n-i}并相加，则要做$2n-1$次乘法和n次加法，占用$2n+1$个存储单元．若将$p(x)$改写为

$$p(x)=(\cdots(a_0x+a_1)x+\cdots+a_{n-1})x+a_n$$

用递推公式表示为

$$b_0=a_0,\quad b_i=a_i+b_{i-1}x,\quad i=1,2,\cdots,n,\quad b_n=p_n(x) \quad (1.1)$$

它只用n次乘法和n次加法，并占用$n+2$个存储单元，故(1.1)是一个好算法，它称为秦九韶方法，也称霍纳(Horner)算法(秦九韶于1247年提出此算法，比霍纳于1819年提出的算法早500多年)。

对于大型计算问题，不同算法计算复杂性差别就更大．例如解线性方程组，当$n=20$时，用克来姆(Gram)法则，其运算次数(乘除法)需9.7×10^{20}，用每秒运算1亿次的计算机也要算30多万年．而用高斯(Gauss)消去法只需乘除运算2660次，并且n愈大相差就愈大．这个例子既表明算法研究的重要性，又说明只提高计算机速度而不改进和选用好的算法也是不行的．人类的计算能力是计算工具的性能与计算方法效率的总和，因此，计算能力的提高有赖于双方．例如，1955至1975年的20年间，计算机速度提高数千倍，而同一时间解决一定规模的椭圆型偏微分方程计算方法效率提高约100万倍，这说明研究和选择好的算法对提高计算速度，在某种意义上说比提高计算机速度更重要，因为算法研究所需代价要小得多．当然，选择好算法的前提是保证计算结果的可靠性，这就要求有可靠的理论分析，使计算结果满足精度要求．

1-3 本书的内容与特点

“现代数值分析”是研究用计算机求解各种数学问题的数值计算方法及其理论．但由于数学问题内容极广，本书只涉及微积分，高等代数，常微分方程等基础数学的现代数值计算方法，并且考虑到读者已学过最基本的“计算方法”，因此本书不再详细介绍基本的和目前不大使用的算法，而增加一些现代科学计算常用的和

较重要的算法，其内容的广度与深度均超过目前理工科硕士研究生“数值分析”课的要求．具体内容包括：（1）数值逼近与数值积分．介绍数值逼近、插值的基本方法及理论．其中B样条，有理逼近，奇异积分、振荡函数积分及重积分和积分方程数值解都是新的内容．（2）数值线代数．将介绍大型稀疏线性方程组数值方法及代数特征值计算．（3）非线性方程组与非线性最优化问题的数值方法．（4）刚性常微分方程数值方法等．

从内容可知，本课程是与计算机及其他学科有密切关系的数学课程．因此它既具有纯数学的高度抽象性与严密科学性的特点，同时又具有应用广泛性与数值试验的高度技术性．首先，它是建立在严格数学理论基础上的一门实用性很强的课程．其次，它要面向计算机，根据计算机特点提供实际可行的且计算复杂性好的有效算法．第三，它应具有可靠的理论分析与数值试验，以保证计算结果达到要求精度．

§2　误差分析与数值稳定性

2-1　误差与误差分类

在求解实际问题中，从建立数学模型、将数学问题转化为数值问题，到设计算法并在计算机上算出结果，每步都存在误差．数学模型是对被描述问题进行抽象，忽略次要因素简化得到的．一般说它是原始问题的近似，其误差称为**模型误差**．建立数学模型时涉及到的物理量如温度、比重、电压等等这些参量都是观测得到的，也是近似的，其误差称为**观测误差**．上述两种误差不属于“数值分析”的研究范围．“数值分析”主要研究的是从数学问题转化为数值问题产生的误差，称为**截断误差**或**方法误差**．例如用台劳(Taylor)展开部分和近似函数求值，其余项就是截断误差．数值问题算法确定后，由于计算是有限位运算．由此产生的误差称为**舍入误差**，这也是必须研究的．

2-2 误差分析方法

数值方法的截断误差必须结合方法讨论。这里误差分析是针对算法舍入误差估计而言的，对规模小的算法可直接用误差的四则运算估出误差绝对值的上界。更一般的方法是利用台劳展开。设数值问题算法用$y=y(x_1, \cdots, x_n)$表示，若$x_1, \cdots, x_n$的近似值为$\tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_n$，计算结果为$\tilde{y}=y(\tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_n)$，要估计$\Delta y=y-\tilde{y}$，由台劳展开的线性部分近似可得误差

$$\Delta y \approx \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial y(\tilde{x})}{\partial x_i} \Delta x_i \text{或} |\Delta y| \leqslant \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial y(\tilde{x})}{\partial x_i} \right| |\Delta x_i| \qquad (2.1)$$

这里$\Delta x_i=x_i-\tilde{x}_i$。这种估计太保守。对大规模科学计算不适合，但要进行切合实际的误差估计，至今仍是一个复杂而困难的问题。于是提出了一些误差分析方法，目前有以下三种方法可供使用，但这些方法并不理想，故只略做介绍

（1）向前误差分析与向后误差分析法。设数值算法是由若干公式表达，某个结果为y是由已知量$x_1, \cdots, x_n$经由基本算术运算得到，表达式$y=g(x_1, \cdots, x_n)$，由于计算中产生舍入误差，实际计算结果为$\tilde{y}$。向前误差分析是对每一步运算找出舍入误差界，随运算过程逐步向前分析，直至估出最后结果的舍入误差界$|y-\tilde{y}|$。这种方法仍然只能用于简单情形。向后误差分析是把舍入误差与导出$\tilde{y}$的已知量$x_1, \cdots, x_n$的某种摄动等价起来，设x_i的摄动为ε_i，使得

$$\tilde{y}=g(x_1+\varepsilon_1, \cdots, x_n+\varepsilon_n)$$

精确成立，并由此推出ε_i的界，然后用摄动理论估计最后的舍入误差界。这是一种先验估计法，它是由威尔金森（Wilkinson）于1963年在矩阵计算的误差分析中提出的，该方法被做了较系统研究并取得较大进展，可见[18]。

（2）区间分析法。将所有变量作为区间量，设x, y为准确值，a, b为其近似值，δa及δb为绝对误差界，$x \in [a-\delta a, a+\delta a]$

试读结束：需要全本请在线购买： www.ertongbook.com