★ 工程数学丛书

计算方法

Computational Methods

● 华中理工大学数学系

CHEP 高等教育出版社
Springer 施普林格出版社

工程数学丛书

计算方法

华中理工大学数学系

张诚坚　高　健　何南忠

CHEP
高等教育出版社

Springer
施普林格出版社

图书在版编目(CIP)数据

计算方法 / 华中理工大学数学系 编著. — 北京: 高等教育出版社; 海德堡: 施普林格出版社, 1999.8 (2002 重印)
(工程数学丛书)
ISBN 7-04-007597-0

Ⅰ. 计… Ⅱ. 华… Ⅲ. 计算方法-高等学校-教材 Ⅳ. 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 17643 号

书　　名　计算方法
作　　者　华中理工大学数学系

出版发行　高等教育出版社　施普林格出版社
社　　址　北京市东城区沙滩后街 55 号　邮政编码　100009
电　　话　010－64054588　传　　真　010－64014048
网　　址　http://www.hep.edu.cn

经　　销　新华书店北京发行所
印　　刷　北京民族印刷厂

开　　本　880×1230　1/32　版　　次　1999 年 9 月第 1 版
印　　张　7.25　印　　次　2002 年 2 月第 5 次印刷
字　　数　210 000　定　　价　15.00 元

序

在高等学校理工科专业的数学教育体系中,“工程数学”一直是属于具有重要地位的课程系列. 当前,革新之风正吹遍高等教育界;课程重组、内容改造与学时调整的呼声日益高涨. 在此形势下,工程数学课程经受了严峻的考验,它作为学习现代科学技术所不可缺少的重要基础课,其地位丝毫没有动摇.

然而,这绝不意味着现存的“工程数学”课程体系已经完美无缺;更不意味着数学教育界除了墨守成规之外别无所为. 恰好相反,面对现代科学技术飞速发展的形势,面对教育界对数学训练质量的愈来愈高的期待,数学工作者革新“工程数学”课程的任务更为紧迫!正是意识到时代的需要与自己的职责,我们全力推出这套“工程数学”教材呈献给读者.

华中理工大学数学系几十年来一直在组织力量探索“工程数学”课程的新的内容体系与教学方法,先后编写了百余万字的教材与讲义,在多年使用过程中不断提炼,逐步趋于完善. 应该说,本套教材正是这一长期探索过程的产物,它凝结了华中理工大学数学系几代教师的心血. 当然,具体执笔的教师对教材的最终成型作出了决定性的贡献.

本套教材先分《线性代数》、《概率论与数理统计》、《计算方法》和《复变函数与积分变换》四册出版. 编者在取材上充分考虑到新世纪对科技人员数学知识的要求;在内容处理上力求联系理工科专业的实际需要,注重培养学生的基本运算能力、分析问题与解决问题的能力;在表述上力求清晰易读,便于教学与自学. 本套教材配备了较丰富的例题与习题,它们大多源于教师在自身教学中的积累,既具有明显的启发性,又具有典型的应用意义. 书末所附的习题答案与提示供教师与学生在教学中参考. 本套教材可供高等学校理工科各专业(非数学)使用.

本套教材的编写自始至终得到华中理工大学教务处及数学系的支持,也得到华中理工大学数学系全体教师的协助与鼓励. 高等教育出版

社 CHEP-Springer 编辑室的宝贵支持,使本套教材得以顺利出版. 对此,我们一并表示衷心的感谢.

刘次华

1999 年 4 月于武汉

前　　言

随着科学技术的高速发展，大量复杂的科学计算问题呈现在人们面前，要完成这些人自身所不能及的工作，必须借助于计算机这一人类有史以来最伟大的科技发明，而使计算机有效解决科学计算问题的关键技术是数值计算方法．鉴此，数值计算方法是每一位科研人员和工程技术人员所必备的知识，也是每一位理工科大学生必修的重要课程．本书正是为顺应这一知识需求而编写的．

数值计算方法包含十分丰富的内容，但是作为一门基础课教材，不可能也不必要面面俱到，重要的是使读者通过一些典型、通用的数值方法掌握其方法构造的基本思想及其实现技巧，从而达到触类旁通的功效．在数值方法的基本概念及其基本理论方面，我们力求其严谨性，使读者通读完本书后具备一定的算法理论分析能力．

全书分绪论、方程求根、线性方程组的解法、插值方法、数值积分、常微分方程的数值解法及实习指南七部分，其中，第一、五、六章由张诚坚编写，第二、三、四章由高健编写，第七章及附录由何南忠编写．

在本书的编写过程中，得到华中理工大学数学系许多同行的支持与鼓励，他们提出了大量宝贵的建议，编者对此深表感谢．

由于编者水平所限，仓促付梓，书中必有疏漏之处，诚望读者指正．

编者

1999 年 5 月于武汉

责任编辑　徐　可　赵天夫
封面设计　李卫青
责任印制　陈伟光

目　　录

第一章　绪　论

科学技术发展到今天，电子计算机的应用已渗透到社会生活的各个领域. 而其中，数值计算是电子计算机处理实际问题的一种关键手段，从宏观天体运动学到微观分子细胞学说，从工程系统到非工程系统，无一能离开数值计算. 数值计算这门学科的诞生，使科学发展产生了巨大飞跃，它使各科学领域从定性分析阶段走向定量分析阶段，从粗糙走向精密. 由此可见，数值计算方法是每一位从事科学研究与应用的人不可缺少的知识. 本章主要介绍数值算法的基本思想及预备知识.

§1.1　数值算法概论

一个实际问题当采用计算机来求解时，主要分下面几个步骤：

$$\boxed{\text{实际问题}} \longrightarrow \boxed{\text{建立数学模型}} \longrightarrow \boxed{\text{构造数值算法}} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \boxed{\text{编程上机}} \longrightarrow \boxed{\text{获取近似结果}}$$

由此可知，**数值算法**是利用计算机求解数学问题近似解的方法. 其中，所获近似解也称为原问题的数值解或逼近解. 当构造一个数值算法时，它既要面向数学模型，使算法能尽可能地仿真问题的模型；同时，它也要面向计算机及其程序设计，要求算法具递推性、简洁性及必要的准确性，使其能借助于计算机最终在尽可能少的时间内获得合符原问题要求精度的数值解.

例 1.1　计算积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x, \quad n = 0,1,2,\cdots,20.$$

解　通过直接计算可产生递推关系

$$I_n = -5I_{n-1} + \frac{1}{n}, \quad I_0 = \ln\frac{6}{5} \approx 0.182322. \tag{1.1}$$

且由经典微积分知识可推得 I_n 具如下性质：

(1) $I_n > 0$,

(2) I_n 单调递减,

(3) $\lim\limits_{n\to\infty} I_n = 0$,

(4) $\dfrac{1}{6n} < I_{n-1} < \dfrac{1}{5n} \quad (n > 1)$.

下面我们用二种算法计算 I_n.

算法 A:按公式(1.1) 自 $n = 1$ 计算到 $n = 20$,产生如下计算结果(见表 1.1)：

表 1.1

n	1	2	3	4	5
I_n	0.0883922	0.0580389	0.0431387	0.0343063	0.0284686
n	6	7	8	9	10
I_n	0.0243239	0.0212378	0.0188109	0.0170566	0.0147169
n	11	12	13	14	15
I_n	0.0173247	− 0.00329022	− 0.0933742	− 0.395442	2.04388
n	16	17	18	19	20
I_n	− 10.1569	50.8433	− 254.161	1270.86	− 6354.23

由上表可见,该算法产生的数值解自 $n = 12$ 开始出现负值且其绝对值逐渐增加,这显然与 I_n 的固有性质相矛盾,因此本算法所得数值解不符合原问题要求.究其原因,我们在构造算法时未能充分考虑原积分模型的性态,即由公式(1.1),其计算从 I_{n-1} 到 I_n 每向前推进一步,其计算值的舍入误差便增长 5 倍,误差由此积累传播导致最终数值解与原问题真解相悖的结果.为克服这一缺陷,我们改进算法 A 为：

算法 B:第 1 步,由性质(4),取

$$I_{20} \approx \frac{\dfrac{1}{6\times 21} + \dfrac{1}{5\times 21}}{2} = 0.00873016.$$

第 2 步，用递推公式

$$I_{n-1} = -\frac{I_n}{5} + \frac{1}{5n} \tag{1.2}$$

自 $n=20$ 计算到 $n=1$. 由于该算法每向后推进一步，其舍入误差便减少 5 倍，因此获得合符原积分模型性态的数值结果(见表 1.2).

表 1.2

n	19	18	17	16	15
I_n	0.00825397	0.00887552	0.00933601	0.00989750	0.0105205
n	14	13	12	11	10
I_n	0.0112292	0.0120399	0.0129766	0.0140713	0.0153676
n	9	8	7	6	5
I_n	0.0169265	0.0188369	0.0212326	0.0243250	0.0284684
n	4	3	2	1	0
I_n	0.0343063	0.0431387	0.0580389	0.0883922	0.182322

对上述例子，我们采用的是由原模型精确解的递推关系来实现计算机求解的，这种数值求解方法称为**直接法**. 在大多数情况下，我们只能获得原模型解的近似递推关系，即将连续系统离散化，这种求解方法称为**离散变量法**. 如在后继章节中将要学习的代数方程(组)的迭代法、微分方程(组)的数值积分法及差分法等均属这类方法.

作为离散变量方法的实例，我们考察结构力学、热传导问题中经常出现的数学定解问题 —— 两点边值问题

$$\begin{cases} y'' + p(x)y' + q(x)y = f(x), & x \in (a,b) \\ y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta, \end{cases} \tag{1.3}$$

的数值解法，其中 $p(x)$、$q(x)$ 及 $f(x)$ 是$[a,b]$上的给定函数，α、β 为已知常数，且设问题(1.3)在$[a,b]$上恒有唯一解 $y(x)$. 其解法步骤如下：

(1) 将区间$[a,b]$离散化，即将$[a,b]N$ 等分，所得节点为

$$x_i = a + ih \quad (i = 0,1,2,\cdots,N; x_0 = a, x_N = b),$$

其中 $h=\dfrac{b-a}{N}$ 称为方法的步长.

(2) 将问题(1.3)离散化. 由于

$$\frac{y(x_{i+1})-y(x_{i-1})}{2h}=y'(x_i)+O(h^2),$$

$$\frac{y(x_{i+1})-2y(x_i)+y(x_{i-1})}{h^2}=y''(x_i)+O(h^2),$$

故可略去上两式中的余项 $O(h^2)$,并取 $y_i\approx y(x_i)$,即得

$$y'(x_i)\approx\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2h}\quad（一阶中心差商）,\tag{1.4}$$

$$y''(x_i)\approx\frac{y_{i+1}-2y_i+y_{i-1}}{h^2}\quad（二阶中心差商）.\tag{1.5}$$

将(1.4)、(1.5)代入(1.3)中得差分格式

$$\begin{cases}\dfrac{y_{i+1}-2y_i+y_{i-1}}{h^2}+p_i\dfrac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2h}+q_iy_i=f_i,\\ \qquad\qquad i=1,2,\cdots,N-1,\\ y_0=\alpha,\ y_N=\beta,\end{cases}\tag{1.6}$$

其中 $p_i=p(x_i)$, $q_i=q(x_i)$ 及 $f_i=f(x_i)$. (1.6)实质是含 $N-1$ 个未知数 $y_1,y_2,\cdots,y_{N-1}$ 的线性方程组,由此可解得数值解 $y_1,y_2,\cdots,y_{N-1}$.

§1.2 预备知识

在后面算法理论的学习中,我们将考虑多种问题的解的误差估计、稳定性及收敛性等,为此我们有必要学习一些相关的基础知识.

§1.2.1 范数

定义 1.1 称 n 维实空间 $\mathbf{R}^n$ 上的一个非负函数 $\|\cdot\|$ 为范数,若其满足

(1) $\|\boldsymbol{x}\|=0$ 当且仅当 $\boldsymbol{x}=\mathbf{0}(\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n)$,

(2) $\|\alpha \boldsymbol{x}\| = |\alpha| \|\boldsymbol{x}\|$, $\forall \alpha \in \mathbf{R}$ 及 $\forall \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n$,

(3) $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\|$, $\forall \boldsymbol{x},\boldsymbol{y} \in \mathbf{R}^n$.

对一维实空间 R 而言,$\|\boldsymbol{x}\|$ 即为绝对值 $|x|$. 下面我们将主要涉及 $l_p(p=1,2,\cdots)$ 范数:

$$\|\boldsymbol{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}},$$

其中 $\boldsymbol{x} = (x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbf{R}^n$. 特别地,$l_\infty$ 范数即为

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \lim_{p\to\infty} \|\boldsymbol{x}\|_p = \max_{1\leqslant i\leqslant n} |x_i|.$$

对于 $\mathbf{R}^n$ 上的任意两种范数有如下等价性定理:

定理 1.1 若 $\|\cdot\|$ 与 $\|\cdot\|'$ 为 $\mathbf{R}^n$ 上的任意两种范数,则存在正常数 $C_2 \geqslant C_1$ 使得

$$C_1 \|\boldsymbol{x}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}\|' \leqslant C_2 \|\boldsymbol{x}\|, \quad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n.$$

在范数概念下,我们即可讨论向量序列的收敛性问题.

定义 1.2 设有向量序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)} \in \mathbf{R}^n \mid \boldsymbol{x}^{(k)} = (x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)})^{\mathrm{T}}\}$,若

$$\lim_{k\to\infty} x_i^{(k)} = x_i, \quad i=1,2,\cdots,n,$$

则称序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 收敛于向量 $\boldsymbol{x} = (x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$.

定理 1.2 在空间 $\mathbf{R}^n$ 中,序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 收敛于向量 $\boldsymbol{x}$ 的充要条件是存在范数 $\|\cdot\|$,使得

$$\lim_{k\to\infty} \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}\| = 0.$$

证 一方面,由于序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 收敛于向量 $\boldsymbol{x}$,则

$$\lim_{k\to\infty} \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}\|_\infty = 0;$$

另一方面,若存在范数 $\|\cdot\|$ 使得

$$\lim_{k\to\infty} \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}\| = 0,$$

则由定理 1.1,存在常数 $C_2 \geqslant C_1 > 0$,使得

$$C_1 \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}\|_\infty \leqslant C_2 \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}\|.$$

因此由夹逼定理知 $\lim\limits_{k\to\infty} \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}\|_\infty = 0$,故 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 收敛于 $\boldsymbol{x}$.

定义 1.3 设 A 为 n 级方阵,$\|\cdot\|$ 为 $\mathbf{R}^n$ 中的某范数,则称

$$\max_{\|\boldsymbol{x}\|=1} \|A\boldsymbol{x}\| \quad (\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n)$$

为矩阵 A 的从属于该向量范数的范数,记为 $\|A\|$.

利用定义 1.3 可直接推得矩阵范数具有如下性质:

(1) 对任意 n 级方阵 A 有 $\|A\| \geqslant 0$;且 $\|A\| = 0$ 当且仅当 $A = 0$;

(2) 对任意实数 k 及任意 n 级方阵 A,有

$$\|kA\| = |k| \|A\|;$$

(3) 对任意两个 n 级方阵 A、B,有

$$\|A+B\| \leqslant \|A\| + \|B\|, \quad \|AB\| \leqslant \|A\| \|B\|;$$

(4) 对 $\forall x \in \mathbf{R}^n$ 及任意 n 级方阵 A,有

$$\|Ax\| \leqslant \|A\| \|x\|.$$

由矩阵范数的定义及其性质可知,矩阵范数与向量范数之间存在着一定的对应关系,特别地,性质(4) 称为二者之间的相容性.

定理1.3 设有 n 级方阵 $A = (a_{ij})$,则与 l_1、l_2、l_∞ 范数相容的矩阵范数分别为

$$\|A\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|, \tag{1.7}$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^{\mathrm{T}}A)}, \tag{1.8}$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|, \tag{1.9}$$

其中 $\rho(\cdot)$ 为相应矩阵的谱半径,其满足

$$\rho(B) = \max_{1\leqslant i\leqslant n} |\lambda_i^B|,$$

λ_i^B 为方阵 B 的特征值.

证 此处仅证(1.8),其余两式类似可证. 由于 $A^{\mathrm{T}}A$ 为对称非负定阵,则其特征值 $\lambda_i (i = 1,2,\cdots,n)$ 非负,且存在 n 维正交方阵 H,使得

$$A^{\mathrm{T}}A = H^{\mathrm{T}}\mathrm{diag}(\lambda_i)H,$$

其中

$$\mathrm{diag}(\lambda_i) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix}.$$

$\forall\, \boldsymbol{x} \in \{\boldsymbol{x} \mid \|\boldsymbol{x}\|_2 = 1\}$,若记 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{H}\boldsymbol{x} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^{\mathrm{T}}$,则有

$$\|\boldsymbol{y}\|_2^2 = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{x}\|_2^2 = 1,$$

及

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2 &= \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \\ &= (\boldsymbol{H}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\mathrm{diag}(\lambda_i)(\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}) \\ &= \sum_{i=1}^{n}\lambda_i y_i^2 \\ &\leqslant (\max_{1\leqslant i\leqslant n}\lambda_i)\|\boldsymbol{y}\|_2^2.\end{aligned}$$

从而

$$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2 \leqslant \sqrt{\rho(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})}.$$

另一方面,若 $\rho(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})$ 对应矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的单位特征向量为 $\tilde{\boldsymbol{x}}$,则

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{A}\|_2^2 &\geqslant \|\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}\|_2^2 \\ &= \tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}} \\ &= \tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}}\rho(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})\tilde{\boldsymbol{x}} \\ &= \rho(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})\|\tilde{\boldsymbol{x}}\|_2^2 \\ &= \rho(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}),\end{aligned}$$

即 $\|\boldsymbol{A}\|_2 \geqslant \sqrt{\rho(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})}$. 式(1.8)得证.

定理 1.4 设 $\boldsymbol{A}$ 为任意 n 级方阵,则对任意矩阵范数 $\|\cdot\|$ 有 $\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant \|\boldsymbol{A}\|$.

证 设 λ 为阵 $\boldsymbol{A}$ 的任一特征值,$\boldsymbol{x}$ 为其相应的特征向量,则

$$|\lambda|\,\|\boldsymbol{x}\| = \|\lambda\boldsymbol{x}\| = \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}\|\,\|\boldsymbol{x}\|,$$

即 $|\lambda| \leqslant \|\boldsymbol{A}\|$. 故 $\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant \|\boldsymbol{A}\|$.

此外矩阵范数与谱半径之间还存在如下关系:

定理 1.5 $\forall\, \varepsilon > 0$,必存在 $\mathbf{R}^{n\times n}$ 中的某范数 $\|\cdot\|$,使得

$$\|\boldsymbol{A}\| \leqslant \rho(\boldsymbol{A}) + \varepsilon, \quad \boldsymbol{A} \text{ 为任意 } n \text{ 级方阵}.$$

记 $\mathbf{R}^{n\times m}$ 为全体实 $n \times m$ 级矩阵的集合,在矩阵范数的概念下,我们可讨论矩阵序列的收敛性.

定义 1.4 设 $\mathbf{R}^{n\times m}$ 中有矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}^{(k)} \mid \boldsymbol{A}^{(k)} = (a_{ij}^{(k)})\}$,若

$$\lim_{k\to\infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij}, \quad i = 1,2,\cdots,n;\ j = 1,2,\cdots,m,$$