数值逼近与常微分方程数值解

程正兴　李水根

$$
B_{i,k}(x)=\begin{cases}
\dfrac{x-\tau_i}{\tau_{i+k}-\tau_i}B_{i,k-1}(x)+\dfrac{\tau_{i+k+1}-x}{\tau_{i+k+1}-\tau_{i+1}}B_{i+1,k-1}(x) \\
\qquad\qquad \tau_i\neq\tau_{i+k},\tau_{i+1}\neq\tau_{i+k+1} \\
\dfrac{x-\tau_i}{\tau_{i+k}-\tau_i}B_{i,k-1}(x), \quad \tau_i\neq\tau_{i+k},\tau_{i+1}=\tau_{i+k+1} \\
\dfrac{\tau_{i+k+1}-x}{\tau_{i+k+1}-\tau_{i+1}}B_{i+1,k-1}(x),\tau_i=\tau_{i+k},\tau_{i+1}\neq\tau_{i+k+1} \\
0, \qquad\qquad \tau_i=\tau_{i+k+1}
\end{cases}
$$

西安交通大学出版社

数值逼近与常微分方程数值解

程正兴　李水根

西安交通大学出版社

内容简介

本书包括常用的数值逼近方法与常微分方程的数值解。如多项式插值；B-样条性质、计算及样条插值；等距节点求积公式、Gauss 型求积公式、外推法及数值微分；线性赋范空间的逼近、内积空间的逼近及作为其特例且应用广泛的最佳一致逼近、平方逼近、数据最小二乘逼近；Fourier 变换与小波分析初步；解常微分方程的 Euler 法、Rung-Kutta 法、线性多步法、外推法与样条配置法等。内容丰富，重点突出，既重视算法，又重视算法的理论基础，且包含了一些较新内容。

本书可作为信息与计算科学、应用数学专业的教材，也可供有关理工科专业师生及广大科技工作者参考。

图书在版编目(CIP)数据

数值逼近与常微分方程数值解/程玉兴，李水根著.
西安：西安交通大学出版社，2000.3
ISBN 7-5605-1229-1

Ⅰ.数… Ⅱ.①程…②李… Ⅲ.①数值逼近②常微分方程-数值解 Ⅳ.O17

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2000)第 16359 号

西安交通大学出版社出版发行
(西安市咸宁西路 28 号 邮政编码:710049 电话:(029)2668316)
西安正华印刷厂印装
各地新华书店经销
*
开本:850 mm×1 168 mm 1/32 印张:11 字数:278 千字
2000 年 3 月第 1 版 2000 年 3 月第 1 次印刷
印数:0 001～3 000 定价:15.00 元

序 言

随着计算机的发展与普及,在科学研究与工程设计诸方面,以及科学实验之后,科学计算显得越来越重要。而科学计算的基础工具之一"数值逼近与常微分方程数值解"就居于一个相当重要的位置。

众所周知,分析学作为数学工具的重要一部分,所研究的对象是函数,内容主要是微积分。而对于函数来说,一方面除了一些表示比较简单的函数以外,它的求值、求微分、求积分通常都很困难;另一方面,在实际应用中,更多的函数关系是由测量或观测数值给出的。为了对这些函数进行计算,当然希望用"可计算函数"来代替(或称逼近)这些函数。

所谓可计算函数,是指在计算机上容易求值、求微分值与求积分值的函数。这些函数过去主要是指多项式,现在除多项式外还有有理多项式、样条函数、小波等。

"计算"本身是一个既古老又现代的话题。在电子计算机出现以前,人们为了"计算"而创造了许多工具,例如算盘,近代又研制了机械计算机。而早于这些计算机的出现,数值方法就已出现了。几百年来,Newton,Gauss,Euler,Lagrange 和 Chebyshev 等数学大师为其作出了杰出的贡献,尽管冠以这些数学家名字的许多理论与方法是后人逐步完善的。所以,任何一本关于本学科的教材要想企图摆脱他们是绝对不可能的。因此,我们在这本教材中仍然要叙述 Lagrange 与 Newton 插值,Gauss 型求积公式,Euler 折线法,Chebyshev 多项式等基本内容。

本书分 7 章。第 1 章引论。第 2 章为多项式插值,包括 Lagrange与 Hermite 插值,差商与 Newton 插值,以及二元插值的简单情形。第 3 章讲述样条函数,包括三次插值样条函数,样条函

数空间与 B-样条基底,B-样条与样条函数的性质与计算。第 4 章讲述数值积分与数值微分,包括等距节点求积公式,外推法,正交多项式与 Gauss 型求积公式,数值微分公式。第 5 章讲述函数的最佳逼近,包括伯恩斯坦多项式与 Weierstrass 定理,线性赋范空间最佳逼近理论,最佳一致逼近,内积空间的最佳逼近及最小二乘与最佳平方逼近,有理逼近。第 6 章讲述函数的表示理论,包括 Fourier 级数,Fourier 变换及快速 Fourier 变换的原理,小波概念,多分辨分析,小波级数与小波变换。第 7 章是常微分方程数值解,包括 Euler 法,Rung-Kutta 法,线性多步法与外推法,收敛性与稳定性,边值问题及微分方程组的解法。

本书主要讨论数值逼近与常微分方程解数值方法的基本理论与算法构造,同时对算法的稳定性、收敛性以及误差估计等也作出了较详细的分析,为以后应用与创新打下必要的基础。书中,在插值法一章中增加了 Lagrange 插值算子范数的讨论,二元插值中介绍了最简单的张量积插值与 Coons 曲面。在样条函数一章中使用了通用的 B-样条概念、理论与算法。在最佳逼近一章中使用了线性正算子逼近,并收入了 Pade′逼近初步。在函数表示理论一章中引入了应用广泛的小波分析的内容。

本书可作为计算数学与应用软件、应用数学、信息等专业教材或参考书。在讲授中,一些内容的取舍可灵活掌握。本书内容全部讲授需 72 学时,讲授 65 学时可去掉二元插值与 Pade′逼近。上机学时数建议为 12～18 小时,上机题目可在教材内容及习题中选取。

本教材是作者在西安交通大学科学计算与应用软件系长期教学中形成的。由于作者水平所限,书中不妥与错误之处在所难免,敬请指正。

编者

于西安交通大学理学院

1998 年 8 月

目　录

第 4 章 数值积分与数值微分

第 5 章 最佳逼近

第1章　引　论

1.1　数值逼近的内容和方法

在科学研究和工程技术问题中，常常需要研究变量与变量之间的关系，而这种关系中最重要的是函数关系，所以构造可计算的函数是数值逼近的重要内容．此外，还包括作为微分与积分数值计算的数值积分与数值微分．本书作为数值微分和数值积分的应用，还进一步讨论了常微分方程的数值解．

在具体问题中，给出的函数关系常常是由一系列离散的数据给出的，或者虽然给出了函数的解析表达式，但是这些函数求值、求导与求积分都很困难．数值逼近的目的是对给出的数据进行拟合及对复杂的函数进行逼近．因为给出的数值常常可以看作是某个未知函数的函数值，所以对于给定的数值也可以讨论逼近的问题．

对于函数 $f(x)$，如果它的求值、求导及求积分等比较困难，我们就希望用一个可计算函数 $\varphi(x)$ 来逼近（近似）它．所谓一个函数 $\varphi(x)$ 是可计算函数是指这个函数求值、求导、求积分都很容易．对于用于逼近（近似）$f(x)$ 的可计算函数 $\varphi(x)$，进一步研究的问题是 $\varphi(x)$ 类型的选取，逼近所使用的方法，逼近好坏程度的度量等问题．

对于逼近函数 $\varphi(x)$ 来说，一般地，它依赖于一些参数，例如依赖参数 $c_1, c_2, \cdots, c_n$，知道这些参数也就知道了函数 $\varphi(x)$ 本身．$\varphi(x)$ 这时可以写为形如 $\varphi(x, c_1, c_2, \cdots, c_n)$．当 $\varphi(x)$ 是 c_1，$c_2, \cdots, c_n$ 的线性函数时，即 $\varphi(x)$ 可写为

$$\varphi(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x) + \cdots + c_n\varphi_n(x)$$

时,就是线性逼近问题,否则就称为非线性逼近问题．同样,对于已知数据 $y_j(j=1,2,\cdots,m)$,求拟合函数(逼近函数)$\varphi(x)$也可分为线性拟合与非线性拟合．进而,对于$\{y_j\}$来说,由它是精确数据或非精确数据而所用方法就可分为插值与最小二乘及光顺.

本书主要讲述对精确数据的线性插值,包括多项式插值与样条插值;对非精确数据的线性最小二乘,包括多项式最小二乘与样条最小二乘等．对于多元插值与最小二乘只是介绍了最简单的情形．对 $f(x)$的数值积分与数值微分所用的方法之一,是对它的可计算逼近函数 $\varphi(x)$进行积分与微分,以得到相应的数值积分和数值微分公式．另外的方法是外推法,使用正交多项式等方法．常微分方程数值解所述方法大多数是经典的方法．

1.2 Peano 核定理

设 $C^n[a,b]$是区间$[a,b]$上所有 n 次连续可微实值函数组成的空间．设 $PC^{n,p}(a,b)$是满足下述条件的所有实值函数$\varphi(x)$的集合:

1) $\varphi(x)$是 $n-1$ 次连续可微的;

2) 存在 $x_i, i=1,\cdots,m$

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_m < x_{m+1} = b$$

使 $D^{n-1}\varphi(x)$在每个开子区间$(x_i,x_{i+1})(i=0,1,\cdots,m)$上是连续可微的,且

3) $D^n\varphi$ 的 L^p 范数是有限的,即

$$\| D^n\varphi \|_p \equiv \left(\sum_{i=0}^{m}\int_{x_i}^{x_{i+1}} |D^n\varphi(x)|^p \mathrm{d}x\right)^{1/p} < \infty \quad (1.2.1)$$

对于 $p=\infty$的情形,要求

$$\| D^n\varphi \|_\infty \equiv \max_{0\leqslant i\leqslant m} \sup_{x\in(x_i,x_{i+1})} |D^n\varphi(x)| < \infty \quad (1.2.2)$$

下面讨论 Peano 核定理．设 E 是 $PC^{n+1,1}(a,b)$上的实值泛函，且对于所有的 $f,g\in PC^{n+1,1}(a,b)$，有

$$E(cf)=cE(f)$$

$$E(f+g)=E(f)+E(g)$$

则称 E 为线性空间 $PC^{n+1,1}(a,b)(n\geqslant 0)$上的线性泛函．

定理 1.2.1 如 E 是 $PC^{n+1,1}(a,b)(n\geqslant 0)$上的线性泛函，且对于所有 n 次多项式 $p(x)$，有 $E(p(x))=0$，则对于所有 $f\in PC^{n+1,1}(a,b)$，有

$$E(f)=\frac{1}{n!}E_x\left[\int_a^b D^{n+1}f(t)(x-t)_+^n\,\mathrm{d}t\right] \tag{1.2.3}$$

其中

$$(x-t)_+^n\equiv\begin{cases}(x-t)^n, & x\geqslant t\\ 0, & x<t\end{cases}$$

而 E_x 表示作用于看成 x 的函数的表达式

$$\int_a^b D^{n+1}f(t)(x-t)_+^n\,\mathrm{d}t$$

的线性泛函．

证明 具有精确余项的 Taylor 公式能写成

$$f(x)=f(a)+Df(a)(x-a)+\cdots+\frac{1}{n!}D^nf(a)(x-a)^n+$$

$$\frac{1}{n!}\int_a^b D^{n+1}f(t)(x-t)_+^n\,\mathrm{d}t \tag{1.2.4}$$

将 E 作用于恒等式(1.2.4)的两端，并且用到 E 是线性泛函与 E 作用于任何 n 次多项式为零这一事实，即得到定理 1.2.1.

由 $C^{n+1}[a,b]$的定义马上可以看到，如果 $f\in C^{n+1}[a,b]$，则必有 $f\in PC^{n+1,1}(a,b)$，即定理 1.2.1 对 $C^{n+1}[a,b]$中的函数是当然成立的．

由定理 1.2.1 的证明可以看出该定理的实质是：E 是线性泛函，且作用于任何 n 次多项式时其值为零，而函数 $f(x)$可以写为 n 次多项式与余项之和的形式，那么 E 作用于 f 就等于 E 作用于

它的余项．我们在以后更多的是运用这一结论，而不是 Peano 定理本身．

1.3 误差

数学上解决实际问题的方法是：建立数学模型；观测各种数据；建立近似计算方法（数值方法）；进行数值计算．由于从实际问题建立数学模型时往往忽略了许多次要因素，因此即使数学问题能精确求解，所得解与实际问题的解仍有误差，这个误差称为模型误差．一般数学模型（数学问题）包含若干个参数，这些参数的值往往由观测得到，而观测难免发生误差，这种误差称为观测误差．一般的数学问题经常难以求解，往往要通过建立近似方法使之容易求解，而简化所引起的误差称为方法误差（或截断误差）．在实际计算中，因为只能对有限位数字进行运算，因而往往使用舍入方法，此时产生的误差称为计算误差．

数值逼近中主要研究截断误差（即所谓的误差估计）与计算误差．计算误差是由舍入误差引起的（数值方法准确解与计算解的差）．

下面我们讨论绝对误差与相对误差．

设 x 是准确值，$\tilde{x}$ 是近似值，称

$$E(x) = x - \tilde{x} \tag{1.3.1}$$

为近似值 $\tilde{x}$ 的绝对误差．如果

$$|E(x)| = |x - \tilde{x}| \leqslant \varepsilon \tag{1.3.2}$$

则称 ε 为 $\tilde{x}$ 的绝对误差限，这时

$$\tilde{x} - \varepsilon \leqslant x \leqslant \tilde{x} + \varepsilon \tag{1.3.3}$$

只有绝对误差还不能很好地反映近似值的精确程度．为此，需要引入相对误差概念，称

$$E_r(x) = \frac{x - \tilde{x}}{x} \tag{1.3.4}$$

为近似值 $\tilde{x}$ 的相对误差．如果

$$|E_r(x)| = |x - \tilde{x}| / |x| \leqslant \varepsilon_r \tag{1.3.5}$$

则称 ε_r 为 $\tilde{x}$ 的相对误差限．实用上，由于准确值 x 往往难以求出，相对误差常用

$$\tilde{E}_r(x) = \frac{x - \tilde{x}}{\tilde{x}} \tag{1.3.6}$$

代替．

下面讨论计算误差的影响．

由于计算机只对有限位数进行运算，而数值运算的次数常常上千万次以至更多，所以每次都分析误差是不可能的，解决的方法是：

1）分门别类研究误差的规律；

2）用不同的方法研究计算误差，例如概率方法，区间分析方法以及工程界常用的几种算法对比法；

3）针对普遍问题提出若干进行计算的原则．

下面是几个原则：

1．两数相近进行减法运算时，有效数字会严重损失，应想法避免．

例 $1 - \cos 2^\circ \approx 1 - 0.999\,4 = 0.000\,6$

从理论上讲，设 $y = x - A$（A 为准确数），在实际计算中是 $\tilde{y} = \tilde{x} - A$（这时 $E(y) = E(x)$），则

$$\tilde{E}_r(y) = \frac{E(x)}{\tilde{x} - A}$$

所以当 $\tilde{x}$ 接近 A 时，$\tilde{E}_r(y)$ 变得很大，因之有效数字大大降低．

下面几个例子说明避免的方法．例如，当 x_1 接近 x_2 时，要计算 $\lg x_1 - \lg x_2$ 就用 $\lg \dfrac{x_1}{x_2}$ 代替．当 x 接近 0 时，想计算 $(1 - \cos x)/\sin x$ 就用 $\sin x/(1 + \cos x)$ 代替．当 x 充分大时，计算 $\arctan(x+1) - \arctan x$ 时，用 $\arctan \dfrac{1}{1 + x(1+x)}$ 代替即可（注意

公式 $\tan(\alpha-\beta)=(\tan\alpha-\tan\beta)/(1+\tan\alpha\cdot\tan\beta))$. 在 x 充分大时,用 $1/(\sqrt{1+x}+\sqrt{x})$ 代替计算 $\sqrt{1+x}-\sqrt{x}$. 当 $f(x^*)$ 很接近 $f(x)$ 时用(注意 Taylor 展开)

$$(x-x^*)f'(x^*)+\frac{(x-x^*)^2}{2!}f''(x^*)+\cdots$$

代替 $f(x)-f(x^*)$.

2. 要保护重要的物理、力学等参数.

例如 $A=10^{12}, B=10, C\simeq -A$,在计算 $A+B+C$ 中,如按 $(A+B)+C$ 计算,则 $(A+B)+C=0$(吃掉了 B),如按 $(A+C)+B$ 计算,则 $(A+C)+B=10$. 避免误导的方法是:事先分析计算方案的数量等级,编写程序时加以合理安排,重要的物理、力学等参数就不致在计算中被"吃掉".

3. 注意计算步骤的简化,减少算术运算次数.

例如,求 $p_n(x)=a_nx^n+a_{n+1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0$,直接计算时需 $1+2+\cdots+n=\frac{1}{2}n(n+1)$ 次乘法及 n 次加法. 如用秦九韶—Honner 方案

$$\begin{cases} u_n = a_n \\ u_k = xu_{k+1}+a_k, \quad k=n-1,\cdots,0 \end{cases} \tag{1.3.7}$$

则 $p_n(x)=u_0$,这时用了 n 次乘法与 n 次加法.

在具体计算中,还有一个"零"的问题,也应引起注意. 例如,存在一个很小的数 $\varepsilon_f>0$,使对于所有 $0\leqslant\varepsilon\leqslant\varepsilon_f$ 时,计算中有 $1.0+\varepsilon=1.0$,但是对于所有的 $\varepsilon'>\varepsilon_f$,有 $1.0+\varepsilon'\neq1.0$. 这时在计算中要注意数 $\log_2\left(\frac{1}{\varepsilon_f}\right)$,它就是一个很大的数.

值得注意的是,计算机的算术运算和我们通常的算术运算有一些是不同的. 例如,在计算机中

(1) 加法结合律不是总成立的,如

$$(1.0+\varepsilon_f)+\varepsilon_f=1.0\neq1.0+(\varepsilon_f+\varepsilon_f)$$