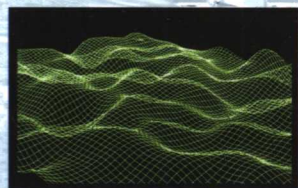


工程硕士系列教材



数值分析

杨大地 王开荣 编著

 科学出版社
www.sciencep.com

工 程 硕 士 系 列 教 材

数 值 分 析

杨大地 王开荣 编著

科 学 出 版 社

北 京

内 容 简 介

本书系统地介绍了数值计算的基本概念、常用算法及有关的理论分析和应用.全书共分10章.第1章是绪论,介绍数值分析中的基本概念;第2~9章包含了数值计算中的基本问题,如线性方程组的数值解法、矩阵特征值和特征向量的数值解法、非线性方程及方程组的数值解法、插值方法、数据拟合和函数逼近、数值积分、数值微分以及常微分方程初值问题的数值解法等;第10章介绍了 Matlab 软件,并介绍了如何将之应用于数值分析的基本问题计算.读者可将其中的算法和命令用于数值实验和工程计算实践中去.各章都给出典型例题并配有一定数量的习题,书后给出了习题答案或提示.

本书可作为理工科大学工程硕士研究生的“数值分析”课教材,还可作为大学本科及硕士生的学习参考书,同时也可供工程技术人员参考使用.

图书在版编目(CIP)数据

数值分析/杨大地,王开荣编著. —北京:科学出版社,2006

(工程硕士系列教材)

ISBN 7-03-016889-5

I. 数… II. ①杨…②王… III. 数值计算-研究生-教材 IV. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 010354 号

责任编辑:巴建芬 潘继敏/责任校对:赵桂芬

责任印制:张克忠/封面设计:耕者设计工作室

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

丽源印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2006年5月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2006年5月第一次印刷 印张: 17 1/2

印数:1—6 000 字数: 325 000

定价: 28.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

前 言

近年来,大学中工程硕士研究生教育发展迅速,在工程硕士研究生数学课程中选修“数值分析”课程的专业和学生占很大比例,这充分说明了科学计算在工程技术中的作用日益增强,对本课程的需求也越来越普遍.本书是在作者编写的《实用数值分析》的基础上修订出版的,该书在重庆大学工程硕士研究生中使用了五届,结合师生们提出的意见,作者进行了多次的整理、订正,在此基础上出版了现在的《数值分析》教材.

本书力求适应工程硕士学习的特点.相对于应届本科毕业生,工程硕士有劣势也有优势.他们在本科阶段学习过基本的大学数学课程,又经历了入学的考前复习,有一定的数学基础,无可否认的是,他们毕业多年,对于一些数学概念和方法,印象已经不太深了,记忆力也不及应届本科毕业生,因此需要在使用这些概念和方法时加以复习;而他们的优势在于,经历了多年的工作磨练,心智趋于成熟,又有工程应用背景,理解力可能更胜于本科刚毕业的时候.特别可贵的是,他们比较清楚数学知识在工程应用中的作用,学习的目的性更明确,主动性也更强.还有一个特点是,他们往往承担了比较重要的业务工作或行政工作,学习时间很难完全保证,常常需要通过自学来弥补.为适应工程硕士研究生教学,需要在教材内容和编排上重新考虑.

因此本书编写时注重了以下原则:一是保持课程体系的完整性,二是强调本课程的实用性,三是强调内容的可读性.为此,我们在系统介绍基础理论的同时,省略了一些烦琐艰深的证明过程,而主要侧重于算法叙述和算例分析.行文时注重通俗易懂,对专业术语尽量作通俗的解释,特别是避免完全用术语解释术语,以增强本书的可读性.

学习本书必需的数学基础是微积分、线性代数和常微分方程,这是一般理工科大学生都具备的.为便于自学,各章后均附有习题,书后有习题参考答案和提示,师生可根据需要安排习题练习.为便于上机计算实践,本书在第10章引入了功能强大的数学软件 Matlab,对书中涉及的大部分算法都编制了程序或提供了命令,便于读者直接使用.在习题的计算量较大时,读者可考虑使用程序计算,教师也可根据本章内容安排计算实习.这是作者为提高本书实用性的一种尝试,希望能得到师生们的认可.

全书共分10章,其中第1~4章和第10章由杨大地老师编写;第5~9章由王开荣老师编写,全书由杨大地老师统稿.两位老师的一些学生对本书稿的习题解答

和编排打印做了大量工作,在此一并表示感谢.全书设计讲授 54 学时左右.如少于此学时,对目录中带 * 的章节可以少讲或不讲.

鉴于作者的水平有限,本书的编写又比较仓促,缺点和错误在所难免,恳请读者提出宝贵意见和建议,以期修订时改进完善.

作 者

2006 年 1 月

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 算法	1
1.1.1 算法的表述形式	2
1.1.2 算法常具有的基本特征	2
1.2 误差	5
1.2.1 误差的来源	5
1.2.2 误差的基本概念	6
1.2.3 有效数字	7
1.3 数值运算时误差的传播	8
1.3.1 一元函数计算的误差传播	8
1.3.2 多元函数计算时的误差传播	9
1.3.3 四则运算中误差的传播	9
1.3.4 设计算法时应注意的问题	10
1.3.5 病态问题和数值算法的稳定性	11
习题 1	12
第 2 章 线性方程组的直接解法	14
2.1 引言	14
2.2 Gauss 消元法	14
2.2.1 Gauss 消元法的基本思想	15
2.2.2 Gauss 消元法公式	15
2.2.3 Gauss 消元法的条件	16
2.2.4 Gauss 消元法的计算量估计	17
2.3 选主元的 Gauss 消元法	17
2.3.1 列主元消元法	18
2.3.2 全主元消元法	19
2.4 Gauss-Jordan 消元法	20
2.4.1 Gauss-Jordan 消元法	20
2.4.2 方阵求逆	21
2.5 矩阵的 LU 分解	22

2.5.1 矩阵的 LU 分解	22
2.5.2 直接 LU 分解	25
2.5.3 行列式求法	28
2.5.4 Crout 分解	28
2.6 平方根法	29
2.6.1 矩阵的 LDU 分解	29
2.6.2 对称正定矩阵的 Cholesky 分解	29
2.6.3 平方根法和改进的平方根法	30
2.7 追赶法	32
2.8 向量和矩阵的范数	36
2.8.1 向量范数	36
2.8.2 矩阵范数	37
2.8.3 谱半径	38
2.8.4 条件数及病态方程组	39
习题 2	43
第 3 章 线性方程组的迭代解法	47
3.1 迭代法的一般形式	47
3.2 几种常用的迭代法公式	47
3.2.1 Jacobi 迭代法	47
3.2.2 Gauss-Seidel 迭代法	49
3.2.3 SOR 迭代法	51
3.3 迭代法的收敛条件	53
3.3.1 迭代法的一般形式的收敛条件	53
3.3.2 从矩阵 A 判断收敛	55
* 3.4 极小化方法	59
* 3.4.1 与线性方程组等价的极值问题	59
* 3.4.2 沿已知方向求函数的极小值	60
* 3.4.3 最速下降法	60
* 3.4.4 共轭斜向法	61
习题 3	64
第 4 章 方阵特征值和特征向量计算	66
4.1 幂法和反幂法	66
4.1.1 幂法	66
* 4.1.2 幂法的其他复杂情况	68
4.1.3 反幂法	69

* 4.1.4 原点平移加速技术	70
* 4.1.5 求已知特征值的特征向量	71
4.2 Jacobi 方法	72
4.2.1 平面旋转矩阵	73
4.2.2 古典 Jacobi 方法	75
4.2.3 过关 Jacobi 方法	76
4.3 QR 方法	78
4.3.1 Householder 变换	78
4.3.2 拟上三角矩阵	79
4.3.3 矩阵的正交三角分解	81
4.3.4 基本 QR 方法	82
习题 4	83
第 5 章 非线性方程求根	85
5.1 二分法	85
5.2 迭代法	87
5.2.1 迭代法的一般形式	87
5.2.2 迭代法的收敛性	88
5.2.3 迭代法收敛速度	91
5.3 Newton 迭代法	91
5.3.1 Newton 迭代法	91
5.3.2 割线法	96
* 5.4 非线性方程组的求根	97
* 5.4.1 不动点迭代法	98
* 5.4.2 Newton 法	100
* 5.4.3 Newton 法的一些改进方案	101
习题 5	103
第 6 章 插值法	105
6.1 Lagrange 插值	106
6.1.1 线性插值	106
6.1.2 二次插值	108
6.1.3 n 次插值	109
6.1.4 插值余项	110
6.2 Newton 插值法	111
6.2.1 差商	111
6.2.2 Newton 插值多项式	112

* 6.3 差分插值	115
* 6.3.1 差分的概念	115
* 6.3.2 差分的性质	116
* 6.3.3 常用差分插值多项式	116
* 6.4 Hermite 插值	118
* 6.4.1 带一阶导数的 Hermite 插值	119
* 6.4.2 两种常用的三次 Hermite 插值	121
6.5 分段插值	123
6.5.1 Runge 振荡现象	123
6.5.2 分段线性插值	124
6.5.3 分段三次 Hermite 插值	125
6.6 样条插值	126
6.6.1 样条插值的基本概念	127
6.6.2 三转角插值法	127
习题 6	130
第 7 章 数据拟合和最佳平方逼近	133
7.1 拟合和逼近的概念	133
7.2 数据拟合	134
7.2.1 最小二乘函数拟合	134
7.2.2 多项式拟合	135
7.3 最佳平方逼近	140
7.3.1 函数的最佳平方逼近	140
7.3.2 最佳平方逼近多项式	141
习题 7	145
第 8 章 数值积分与数值微分	148
8.1 求积公式	148
8.1.1 问题的提出	148
8.1.2 数值积分的基本思想	148
8.1.3 代数精度	149
8.1.4 插值型求积公式	149
8.2 Newton-Cotes 公式	150
8.2.1 Newton-Cotes 公式	150
8.2.2 常见的 Newton-Cotes 公式	151
8.3 复化求积公式	154
8.3.1 复化梯形公式	154

8.3.2 复化 Simpson 公式	155
8.3.3 复化 Cotes 公式	156
* 8.3.4 变步长方法	157
8.4 Romberg 求积公式	158
* 8.4.1 Richardson 外推法	158
8.4.2 Romberg 积分法	159
8.5 Gauss 求积公式	161
8.5.1 Gauss 求积公式及其性质	161
8.5.2 常见的 Gauss 型求积公式	162
* 8.5.3 复化 Gauss 型求积公式	168
8.6 数值微分	169
8.6.1 数据的数值微分	169
8.6.2 函数的数值微分	171
习题 8	172
第 9 章 常微分方程的数值解法	175
9.1 引言	175
9.2 Euler 方法	176
9.2.1 Euler 方法的推导	176
9.2.2 几何意义	177
9.2.3 Euler 方法的改进	177
9.3 Runge-Kutta 方法	180
9.3.1 R-K 方法的构造	180
9.3.2 四阶经典 R-K 公式	182
* 9.3.3 步长的选取	184
9.4 线性多步法	185
9.4.1 线性多步法的一般形式	185
9.4.2 利用数值积分构造线性多步法	188
9.5 高阶的预测-校正公式	189
9.5.1 四阶 Adams 预测-校正公式	190
* 9.5.2 局部截断误差估计和修正	191
* 9.5.3 修正的 Adams 预测-校正法	191
9.6 一阶常微分方程组与高阶常微分方程	192
9.6.1 一阶常微分方程组	192
9.6.2 高阶常微分方程	193
* 9.7 收敛性与稳定性	194

* 9.7.1 收敛性	194
* 9.7.2 稳定性	194
习题 9	196
第 10 章 Matlab 软件与数值计算	198
10.1 矩阵与数组	198
10.2 函数运算和作图	201
10.2.1 基本初等函数	201
10.2.2 多项式函数	201
10.2.3 矩阵函数	202
10.2.4 绘图命令	207
10.2.5 Matlab 编程	210
10.3 线性方程组的数值解	212
10.3.1 直接法	212
10.3.2 迭代法	213
10.3.3 迭代法收敛理论	218
10.3.4 SOR 法的松弛因子	220
10.3.5 病态方程组和条件数	222
10.4 方阵的特征值和特征向量	223
10.4.1 幂法	223
10.4.2 古典 Jacobi 旋转法	224
10.4.3 基本 QR 算法	226
10.4.4 Matlab 中求特征值和特征向量的命令	228
10.5 方程和方程组求根	229
10.5.1 二分法	229
10.5.2 Newton 法	230
10.5.3 Matlab 关于方程(组)求根的命令	231
10.6 插值方法	233
10.6.1 Lagrange 插值	233
10.6.2 Newton 插值	233
10.6.3 用拟合函数 polyfit 作插值	234
10.6.4 Matlab 中的插值命令	235
10.7 数据拟合与函数逼近	237
10.7.1 多项式数据拟合	237
10.7.2 非线性拟合	238
10.7.3 最佳平方逼近	240

10.8 数值积分	242
10.8.1 非复化的数值积分	242
10.8.2 复化数值积分计算	243
10.8.3 Romberg 积分计算	245
10.8.4 Matlab 中的积分公式	246
10.9 常微分方程初值问题数值解	247
10.9.1 单步法	248
10.9.2 线性多步法	250
10.9.3 预测-校正法	254
10.9.4 Matlab 中求解常微分方程初值问题数值解的命令	255
习题参考答案或提示	257
参考文献	265

第 1 章 绪 论

数学与其他科学技术学科有着密切联系和相互促进的关系.后者通过建立数学模型将实际问题化为各种数学问题,求解这些数学问题需要使用各种数学方法.

虽然我们已经学习过多门数学课程,但遇到实际的数学模型时往往会发现,大多数数学模型的完备解(公式解或称解析解)很难甚至不能用现有的数学方法求出.人们往往只能求出其近似解或者说数值形式的解.

人们运用数学方法解决科学研究或工程技术问题,一般按如下途径进行:

实际问题→模型设计→算法设计→程序设计→上机计算→问题的解

其中算法设计是数值分析课程的主要内容.

数值分析研究最基本最通用的数值算法,即研究基本数学问题的适合计算机求解的数值方法.它是计算数学的基础课程.

数值分析课程研究常见的基本数学问题的数值解法,包含了数值代数(线性方程组的解法、矩阵特征值计算等)、非线性方程的解法、数值逼近、数值微分与数值积分、常微分方程的数值解法等.它的基本理论和研究方法建立在数学理论基础之上,研究对象是数学问题,因此它是数学的分支之一.

它又与计算机科学有着密切的关系.我们在考虑算法时,往往要同时考虑计算机的特性,如计算速度、存储量、字长等技术指标,考虑程序设计时的可行性和复杂性.如果我们具备了一定的计算机基础知识和程序设计方法,学习数值分析的理论和方法就会更深刻、更实际,选择或设计的算法也会更合理、更实用.

在科学研究、工程实践和经济管理等工作,存在着大量的科学计算、数据处理等问题.应用计算机解决数值计算问题是工程技术人员应当具备的基本能力.

1.1 算 法

解决某类数学问题的数值方法称为数值算法,它是求解数学问题过程的完整而准确的描述.本书将数值算法简称为算法(注意它有别于软件工程中更广义的算法概念).为使算法能在计算机上实现,它必须将一个数学问题分解为有限次的四则运算,即 $+$ 、 $-$ 、 $\times$ 、 $\div$ 运算.有时在算法中也引用一些简单的基本函数运算,但这些函数运算实际上在计算机语言编译系统中也事先转化成了有限次的四则运算.

1.1.1 算法的表述形式

(1) 用数学公式和文字说明描述. 这种方式符合人们的理解习惯, 和算法的推证相衔接, 易于学习接受, 但离上机应用距离较大. 它是面向人的算法.

(2) 用框图描述. 这种方式清楚描述计算过程流向, 易于编制程序, 但对初学者有一个习惯过程. 此外框图描述格式不很统一, 详略难以掌握.

(3) 算法描述语言. 它是表述算法的一种通用的语言, 有特定的表述程序和语句. 它独立于计算机的硬件和软件系统, 但它可以很容易地转换某种实用的计算机高级语言, 同时也具有一定的可读性.

(4) 算法程序. 即用计算机语言描述的算法, 它是面向计算机的算法, 计算机可直接运行. 它可以是印刷文本, 也可以是存储器上存储的文件, 它们常常组装成算法软件包. 我们以后讨论的算法, 通常都有现成的程序文本和软件可资利用. 一个合格的计算工作者, 应当能熟练地应用这些已有的软件工具. 但从学习算法的角度看, 这种描述方式并不有利.

上面介绍的几种算法描述方式, 第一种面向人, 第四种面向机器, 第二、三种可视为中间过渡形式. 我们将主要采用第一种描述方式表述各种算法, 有时也采用第二、三种方式进一步说明.

1.1.2 算法常具有的基本特征

算法要准确而全面地描述整个解题过程, 它常具有如下特征:

1. 算法常表现为一个无穷过程的截断

例 1.1 计算 $\sin x, x \in \left[0, \frac{\pi}{4}\right]$.

解 根据 Taylor 公式

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \cdots \quad (1.1)$$

这是一个无穷级数, 我们只能在适当的地方“截断”, 使计算量不太大, 而精度又能满足要求. 如取 $n=3$, 计算 $\sin 0.5 \approx 0.5 - \frac{0.5^3}{3!} + \frac{0.5^5}{5!} - \frac{0.5^7}{7!} = 0.479426$, 根据 Taylor 余项公式, 它的误差应为

$$R = (-1)^4 \frac{\xi^9}{9!}, \quad \xi \in \left[0, \frac{\pi}{4}\right] \quad (1.2)$$

$$|R| \leq \frac{\left(\frac{\pi}{4}\right)^9}{362880} = 3.13 \times 10^{-7}$$

可见结果相当精确, 实际上结果的六位数字都是正确的.

2. 算法常表现为一个连续过程的离散化

例 1.2 计算积分值 $I = \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx$.

解 见图 1.1, 将 $[0, 1]$ 分为 4 等份, 分别计算 4 个小曲边梯形的面积的近似值, 然后加起来作为积分的近似值. 记被积函数为 $f(x)$, 即

$$f(x) = \frac{1}{1+x}$$

取 $h = \frac{1}{4}$, 有

$$x_i = ih, \quad i = 0, 1, 2, 3, 4, \quad T_i = \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} h$$

所以有

$$I \approx \sum_{i=0}^3 T_i = 0.697024$$

与精确值 0.693147 比较, 可知结果不够精确, 如进一步细分区间, 精度可以提高.

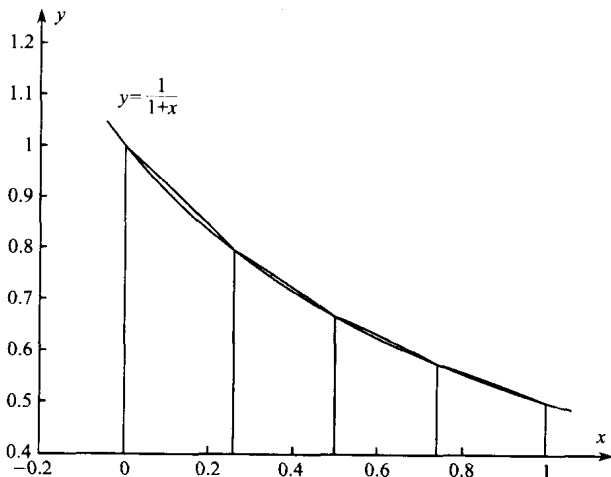


图 1.1

3. 算法常表现为“迭代”形式

迭代是指某一简单算法的多次重复, 后一次使用前一次的结果. 这种形式易于

在计算程序中实现,在程序中表现为“循环”过程.

例 1.3 多项式求值

$$P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n \quad (1.3)$$

解 用 t_k 表示 x^k , u_k 表示式(1.3)前 $k+1$ 项之和. 作为初值, 令

$$\begin{cases} t_0 = 1 \\ u_0 = a_0 \end{cases}$$

对 $k=1, 2, \cdots, n$ 反复执行

$$\begin{cases} t_k = xt_{k-1} \\ u_k = u_{k-1} + a_k t_k \end{cases} \quad (1.4)$$

显然 $P_n(x) = u_n$, 式(1.4)是一种简单算法的多次循环.

对此问题还有一种更好的迭代算法

$$\begin{aligned} P_n(x) &= a_nx^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_1x + a_0 \\ &= (a_nx^{n-1} + a_{n-1}x^{n-2} + \cdots + a_1)x + a_0 \\ &= ((a_nx^{n-2} + a_{n-1}x^{n-3} + \cdots + a_2)x + a_1)x + a_0 \\ &= (\cdots(a_nx + a_{n-1})x + \cdots + a_1)x + a_0 \end{aligned}$$

令

$$\begin{cases} v_0 = a_n \\ v_k = xv_{k-1} + a_{n-k} \end{cases} \quad (1.5)$$

显然 $P_n(x) = v_n$.

这两种算法都是将 n 次多项式化为 n 个一次多项式来计算, 这种化繁为简的方法在数值分析中经常使用.

下面估计一下以上两种算法的计算量:

第一种方法: 执行 n 次式(1.4), 每次 2 次乘法, 1 次加法, 共计 $2n$ 次乘法, n 次加法;

第二种方法: 执行 n 次式(1.5), 每次 1 次乘法, 1 次加法, 共计 n 次乘法, n 次加法.

显然第二种方法运算量小, 它是我国宋代数学家秦九韶最先提出的, 被称为“秦九韶算法”.

例 1.4 不用开平方计算 $\sqrt{a}$ ($a > 0$) 的值.

解 假定 x_0 是 $\sqrt{a}$ 的一个近似值, $x_0 > 0$, 则 $\frac{a}{x_0}$ 也是 $\sqrt{a}$ 的一个近似值, 且 x_0

和 $\frac{a}{x_0}$ 两个近似值必有一个大于 $\sqrt{a}$, 另一个小于 $\sqrt{a}$, 可以设想它们的平均值应为

$\sqrt{a}$ 的更好的近似值,于是设计一种算法

$$x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{a}{x_k} \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.6)$$

如计算 $\sqrt{3}$, 取 $x_0 = 2$, 有

$$x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{3}{x_k} \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

计算有

$$x_0 = 2$$

$$x_1 = 1.75$$

$$x_2 = 1.7321429$$

$$x_3 = 1.7320508$$

⋮

可见此法收敛速度很快,只算三次就得到 8 位精确数字.

迭代法应用时要考虑是否收敛、收敛条件及收敛速度等问题,今后的课程将进一步讨论.

1.2 误 差

数值计算当然是越精确越好,最好是没有误差,但这一般说来是不可能的.误差总是不可避免的,问题是如何估计误差,并将误差控制在可以接受的范围内.因此,在数值分析中误差分析是十分重要的.

1.2.1 误差的来源

在运用数学方法解决实际问题的过程中,每一步都可能带来误差.

(1) 模型误差:在建立数学模型时,往往要忽视很多次要因素,把模型“简单化”、“理想化”,这时模型就与真实背景有了差距,即带入了误差.

(2) 测量误差:数学模型中的已知参数,多数是通过测量得到.而测量过程受工具、方法、观察者的主观因素和不可预料的随机干扰等影响必然带入误差.

(3) 截断误差:数学模型常难于直接求解,往往要近似替代,简化为易于求解的问题,这种简化带入的误差称为方法误差或截断误差.

(4) 舍入误差:计算机只能处理有限数位的小数运算,初始参数或中间结果都必须进行四舍五入运算,这必然产生舍入误差.

在数值分析课程中不分析讨论模型误差;截断误差是数值分析课程的主要讨