

数值分析

颜庆津 编 ● 北京航空航天大学出版社

数值分析

颜庆津 编

北京航空航天大学出版社

(京)新登字166号

内 容 提 要

本书是工学硕士研究生数值分析课程的基本教材。主要内容有：误差知识、解线性方程组的直接方法和迭代法、解非线性方程的迭代法、矩阵特征值与特征向量的计算、插值与逼近，数值积分，常微分方程初值问题的数值解法和几种典型的偏微分方程的差分法。内容的深广度符合国家教委有关课程教学指导小组制定的基本要求。书中有足够数量的例题和习题以备教学上使用。

本书还适合于工科大学本科高年级学生和工程技术人员学习数值计算方法之用。

责 任 编

北京航空航天大学出版社出版

新华书店总店科技发行所发行 各地新华书店经销

北京农业工程大学印刷厂印装

850×1168 1/32 印张：11 字数：296千字

1992年7月第一版 1992年7月第一次印刷 印数：3000册

ISBN 7-81012-307-6/O·019 定价：6.80元

前 言

本书是为工学硕士研究生的数值分析课编写的基本教材。

1991年5月国家教委工科研究生数学教学指导小组制定了“工学硕士研究生数值分析课程教学基本要求”，这是工学硕士生数值分析课的教学指导性文件。本教材就是依据这份指导性文件而编写的，其内容力求体现文件中规定的教学基本要求，努力做到重概念、重方法、重应用、重能力的培养，在阐明各种数值计算方法的同时，从理论上作必要的分析和论证，但又掌握在一定限度以内。

书中凡是不带•号的都属于教学基本内容，讲授这些内容约需课内60学时，本书各章都选编了一定数量的习题，学习这门课程的硕士生都应做完有关基本内容的习题。

读者使用这本教材之后，请提出宝贵意见。

编 者

1991.11

目 录

第一章 误差

- 1.1 误差的来源与分类 (1)
- 1.2 绝对误差、相对误差与有效数字 (2)
- 1.3 函数求值的误差估计 (5)
- 1.4 数值运算中的一些原则 (7)
- 习题 (10)

第二章 解线性方程组的直接方法

- 2.1 Gauss 消去法 (13)
 - 2.1.1 顺序 Gauss 消去法 (14)
 - 2.1.2 列主元素 Gauss 消去法 (16)
- 2.2 直接三角分解法 (18)
 - 2.2.1 Doolittle 分解法 (18)
 - 2.2.2 Crout 分解法 (23)
 - 2.2.3 QR 分解法 (25)
 - 2.2.4 追赶法 (30)
- 2.3 范数与误差分析 (32)
 - 2.3.1 向量范数 (32)
 - 2.3.2 矩阵范数 (34)
 - 2.3.3 线性方程组的性态与消去法的舍入误差分析 (39)

习题	(42)
----	------

第三章 解线性方程组的迭代法

3.1 迭代法的一般形式及其收敛性	(45)
3.1.1 迭代法的一般形式	(45)
3.1.2 迭代法的收敛条件	(47)
3.2 Jacobi迭代法	(50)
3.3 Gauss-Seidel迭代法	(54)
3.4 松弛迭代法	(58)
*3.5 共轭梯度法	(64)
3.6 大型稀疏矩阵的压缩存储法	(71)
3.6.1 按行随机存储非对称稀疏矩阵	(71)
3.6.2 按行压缩存储对称稀疏矩阵	(73)
习题	(74)

第四章 解非线性方程的迭代法

4.1 对分法	(78)
4.2 简单迭代法	(80)
4.2.1 简单迭代法的一般形式	(80)
4.2.2 简单迭代法的收敛条件	(81)
4.2.3 简单迭代法的收敛速度	(87)
4.2.4 加速收敛的技术	(90)
4.3 Newton法	(92)
4.3.1 Newton法迭代公式及其收敛性	(92)
*4.3.2 m 重根的处理	(98)
4.4 割线法	(101)
4.4.1 割线法迭代公式及其收敛性	(101)
4.4.2 单点割线法及其收敛性	(106)
习题	(109)

第五章 矩阵特征值与特征向量的计算

5.1 幂法和反幂法	(112)
5.1.1 幂法	(112)
5.1.2 带原点平移的幂法	(117)
5.1.3 反幂法	(120)
*5.2 Jacobi方法	(122)
5.3 QR方法	(127)
5.3.1 基本QR方法	(127)
5.3.2 矩阵的拟上三角化	(129)
5.3.3 带原点平移的QR方法	(132)
习题	(136)

第六章 插值与逼近

6.1 代数插值问题	(140)
6.2 Lagrange 插值多项式	(143)
6.3 分段低次插值	(146)
*6.4 Newton插值多项式	(149)
6.4.1 差商与Newton插值多项式	(149)
6.4.2 差分与等距结点的Newton插值多项式	(156)
*6.5 带导数条件的代数插值	(161)
6.6 样条插值	(165)
6.6.1 样条函数与B样条	(166)
6.6.2 三次样条插值问题	(172)
*6.6.3 均匀分划的三次样条插值函数	(174)
6.6.4 任意分划的三次样条插值函数	(180)
6.7 正交多项式及其性质	(184)
6.8 函数的最佳平方逼近	(194)

6.8.1	最佳平方逼近的概念与计算	(194)
6.8.2	正交多项式在最佳平方逼近中的应用	(198)
*6.8.3	样条函数在最佳平方逼近中的应用	(203)
6.9	曲线的最小二乘拟合	(206)
6.9.1	离散型的最佳平方逼近	(206)
6.9.2	曲线的最小二乘拟合	(208)
	习题	(215)

第七章 数值积分

7.1	数值求积公式的一般形式及其代数精度	(223)
7.2	插值型求积公式及其截断误差	(226)
7.3	Newton-Cotes求积公式	(229)
7.4	复化求积法	(237)
7.4.1	复化梯形公式	(237)
7.4.2	复化Simpson公式	(239)
7.4.3	区间逐次分半法	(242)
7.5	Richardson外推技术与Romberg积分法	(244)
7.5.1	Richardson外推技术	(244)
7.5.2	Romberg积分法	(247)
7.6	Gauss型求积法	(250)
7.6.1	一般理论	(250)
7.6.2	几种Gauss型求积公式	(257)
	习题	(265)

第八章 微分方程数值解法

8.1	解常微分方程初值问题的单步法	(269)
8.1.1	Euler法	(270)
8.1.2	Runge-Kutta方法	(273)
8.1.3	单步法的相容性、收敛性和绝对稳	

	定性.....	(282)
*8.1.4	向后Euler法和梯形法	(289)
8.1.5	步长的选择.....	(293)
8.1.6	常微分方程组初值问题.....	(295)
8.2	椭圆型方程第一边值问题的差分解法.....	(303)
8.2.1	差分方程的建立.....	(303)
8.2.2	边界条件的使用.....	(306)
8.2.3	差分方程组解的存在唯一性.....	(309)
8.3	抛物型方程的差分解法及其稳定性.....	(310)
8.3.1	差分方程的建立与定解条件的离散化	(311)
8.3.2	差分方程的稳定性.....	(321)
8.4	双曲型方程的特征线法.....	(326)
8.4.1	一阶双曲型方程.....	(326)
8.4.2	一阶双曲型方程组.....	(332)
8.4.3	二阶双曲型方程.....	(333)
习题	(335)
参考文献	(343)

第一章 误差

1.1 误差的来源与分类

在工程技术的计算中，估计计算结果的精确度是十分重要的工作，而影响精确度的是各种各样的误差。误差按照它们的来源可分为以下四种：

1. 模型误差

反映实际问题有关量之间关系的计算公式，即数学模型，通常只是近似的。由此产生的数学模型的解与实际问题的解之间的误差称为模型误差。

2. 观测误差

数学模型中包含的某些参数（如时间、长度、电压等等）往往通过观测而获得。由观测得到的数据与实际的数据之间是有误差的，这种误差称为观测误差。

3. 截断误差

求解数学模型所用的数值计算方法如果是一种近似的方法，那么只能得到数学模型的近似解，由此产生的误差称为截断误差或方法误差。例如，由Taylor(泰勒)公式，函数 $f(x)$ 可表示为

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n \\ + \frac{f^{(n+1)}(\theta x)}{(n+1)!}x^{n+1}, \quad (0 < \theta < 1)$$

为了简化计算，当 $|x|$ 不大时，去掉上式右端的最后一项，得近似公式

$$f(x) \approx f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n$$

此近似公式的误差就是截断误差。

4. 舍入误差

由于计算机的字长有限，参加运算的数据以及运算结果在计算机上存放会产生误差，这种误差称为舍入误差或计算误差。例如，在十位十进制的限制下，会出现

$$1 \div 3 = 0.3333333333$$

$$(1.000002)^2 - 1.000004 = 0$$

两个结果都不是准确的，后者的准确结果应是 4×10^{-12} 。这里所产生的误差就是舍入误差。

在数值分析中，主要研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响，而一般不考虑模型误差和观测误差。

1.2 绝对误差、相对误差与有效数字

设 a 是准确值 x 的一个近似值，记

$$e = x - a$$

称 e 为近似值 a 的绝对误差，简称误差。如果 $|e|$ 的一个上界已知，记为 ε ，即

$$|e| \leq \varepsilon$$

则称 ε 为近似值 a 的绝对误差限或绝对误差界，简称误差限或误差界。

准确值 x 、近似值 a 和误差限 ε 三者的关系就是

$$a - \varepsilon \leq x \leq a + \varepsilon$$

或记为

$$x = a \pm \varepsilon$$

例如， $a = 3.14$ 作为圆周率 π 的一个近似值，它的绝对误差是

$$e = \pi - 3.14$$

易知,

$$|e| < 0.002$$

所以, $a = 3.14$ 作为 π 的近似值, 它的一个误差限为

$$e = 0.002$$

用绝对误差来刻画近似数的精确程度是有局限性的, 因为它没有反映出它在原数中所占的比例。

记

$$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x-a}{x}$$

称 e_r 为近似值 a 的相对误差。由于 x 未知, 实际上总把 $\frac{e}{a}$ 作为 a 的相对误差, 并且也记为

$$e_r = \frac{e}{a} = \frac{x-a}{a}$$

相对误差一般用百分比表示。

$|e_r|$ 的上界, 即

$$\varepsilon_r = \frac{e}{|a|}$$

称为近似值 a 的相对误差限或相对误差界。显然有

$$|e_r| \leq \varepsilon_r$$

例 1 用最小刻度为毫米的卡尺测量直杆甲和直杆乙, 分别读出长度 $a = 312\text{mm}$ 和 $b = 24\text{mm}$, 问: $\varepsilon(a)$, $\varepsilon(b)$, $e_r(a)$, $e_r(b)$ 各是多少? 两直杆实际长度 x 和 y 在什么范围内?

解 $\varepsilon(a) = \varepsilon(b) = 0.5\text{mm}$

$$e_r(a) = \frac{\varepsilon(a)}{|a|} = \frac{0.5}{312} \approx 0.16\%$$

$$e_r(b) = \frac{\varepsilon(b)}{|b|} = \frac{0.5}{24} \approx 2.08\%$$

$$311.5\text{mm} \leq x \leq 312.5\text{mm}$$

$$23.5\text{mm} \leq y \leq 24.5\text{mm}$$

例 2 设 $a = -2.18$ 和 $b = 2.1200$ 是分别由准确值 x 和 y 经过四舍五入而得到的近似值, 问: $\varepsilon(a)$, $\varepsilon(b)$, $\varepsilon_r(a)$, $\varepsilon_r(b)$ 各是多少?

解 $\varepsilon(a) = 0.005$, $\varepsilon(b) = 0.00005$

$$\varepsilon_r(a) = \frac{0.005}{2.18} \approx 0.23\%$$

$$\varepsilon_r(b) = \frac{0.00005}{2.1200} \approx 0.0024\%$$

凡是由准确值经过四舍五入而得到的近似值, 其绝对误差限等于该近似值末位的半个单位。

定义 设数 a 是数 x 的近似值, 如果 a 的绝对误差限是它的某一位的半个单位, 并且从该位到它的第一位非零数字共有 n 位, 则称用 a 近似 x 时具有 n 位有效数字。

数 a 总可以写成如下的形式

$$a = \pm \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_k \times 10^m$$

其中 m 是整数, α_i ($i = 1, 2, \dots, k$) 是 0 到 9 中的一个数字, $\alpha_1 \neq 0$ 。如果 a 作为数 x 的近似值, 且

$$\varepsilon(a) = \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \quad (n \leq k)$$

则由定义知, a 有 n 位有效数字 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 。

从有效数字的定义可知, 由准确值经过四舍五入得到的近似值, 从它的末位数字到第一位非零数字都是有效数字。同一个准确值的不同近似值, 有效数字越多, 它的绝对误差和相对误差都越小。有了有效数字概念之后, 下面两个 2.140012 的近似值的写法是有区别的: 2.14 和 2.1400, 前者有三位有效数字, 后者有五位有效数字。

准确值的有效数字可看作有无限多位。

例3 下列近似值的绝对误差限都是0.005,

$$a = 1.38, b = -0.0312, c = 0.86 \times 10^{-4}$$

问: 各个近似值有几位有效数字?

解 a 有三位有效数字 1, 3, 8。 b 有一位有效数字 3。 c 没有有效数字。

1.3 函数求值的误差估计

设 $u = f(x)$ 存在足够高阶的导数, a 是自变量 x 的近似值, 则 $\bar{u} = f(a)$ 是函数值 $u = f(x)$ 的近似值。如果 $f'(a) \neq 0$ 且比值 $|f''(a)| / |f'(a)|$ 不很大, 则由 Taylor 公式可得 $\bar{u} = f(a)$ 的误差估计为

$$e(\bar{u}) = f(x) - f(a) \approx f'(a)(x - a) = f'(a)e(a)$$

因 $|e(\bar{u})| \approx |f'(a)| |e(a)| \leq |f'(a)| \varepsilon(a)$

故 $\varepsilon(\bar{u}) \approx |f'(a)| \varepsilon(a)$

如果 $f'(a) = f''(a) = \dots = f^{(k-1)}(a) = 0$, $f^{(k)}(a) \neq 0$, 且比值 $|f^{(k+1)}(a)| / |f^{(k)}(a)|$ 不很大, 则 $\bar{u} = f(a)$ 的误差估计为

$$e(\bar{u}) \approx \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (e(a))^k$$

$$\varepsilon(\bar{u}) \approx \frac{|f^{(k)}(a)|}{k!} (\varepsilon(a))^k$$

设 n 元函数 $u = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 充分可微, a_i 是 x_i 的近似值 ($i = 1, 2, \dots, n$) 则 $\bar{u} = f(a_1, a_2, \dots, a_n)$ 是函数值 $u = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 的近似值。由多元函数 Taylor 公式可得 \bar{u} 的误差估计为

$$e(\bar{u}) \approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(a_1, a_2, \dots, a_n)}{\partial x_i} e(a_i),$$

$$\varepsilon(\bar{u}) \approx \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial f(a_1, a_2, \dots, a_n)}{\partial x_i} \right| \varepsilon(a_i), \quad (1.1)$$

如果 $\left| \frac{\partial f(a_1, a_2, \dots, a_n)}{\partial x_i} \right|$ 全为零或全都很小, 则使用 Taylor 公式中的高阶项。

由 (1.1) 式可推出四则运算结果的误差估计。设 a 和 b 分别是准确值 x 和 y 的近似值, 则 $a+b$, $a-b$, ab , a/b ($b \neq 0$) 分别是 $x+y$, $x-y$, xy , x/y 的近似值。根据 (1.1) 式, 可得

$$\varepsilon(a \pm b) = \varepsilon(a) + \varepsilon(b)$$

$$\varepsilon(ab) \approx |a| \varepsilon(b) + |b| \varepsilon(a)$$

$$\varepsilon\left(\frac{a}{b}\right) \approx \frac{|a| \varepsilon(b) + |b| \varepsilon(a)}{|b|^2}, \quad (b \neq 0)$$

$$\varepsilon_r(a+b) = \frac{\varepsilon(a) + \varepsilon(b)}{|a+b|}$$

$$\varepsilon_r(a-b) = \frac{\varepsilon(a) + \varepsilon(b)}{|a-b|}$$

$$\varepsilon_r(ab) \approx \varepsilon_r(a) + \varepsilon_r(b)$$

$$\varepsilon_r\left(\frac{a}{b}\right) \approx \varepsilon_r(a) + \varepsilon_r(b)$$

例 4 设有三个近似数

$$a = 2.31, \quad b = 1.93, \quad c = 2.24$$

它们都有三位有效数字, 试计算 $p = a + bc$, $\varepsilon(p)$ 和 $\varepsilon_r(p)$; 并问: p 的计算结果能有几位有效数字?

解 $p = 2.31 + 1.93 \times 2.24 = 6.6332$

$$\varepsilon(p) = \varepsilon(a) + \varepsilon(bc)$$

$$\approx \varepsilon(a) + |b| \varepsilon(c) + |c| \varepsilon(b)$$

$$= 0.005 + 0.005(1.93 + 2.24)$$

$$= 0.02585$$

$$\varepsilon_r(p) = \frac{\varepsilon(p)}{|p|} \approx \frac{0.02585}{6.6332} \approx 0.39\%$$

因为 $\varepsilon(p) \approx 0.02585 < 0.05$, 所以, $p = 6.6332$ 中能有两位有效

数字。

例5 设 $f(x, y) = \frac{\cos y}{x}$, $x = 1.30 \pm 0.005$, $y = 0.871 \pm 0.0005$, 如果用 $\bar{u} = f(1.30, 0.871)$ 作为 $f(x, y)$ 的近似值, 则 \bar{u} 能有几位有效数字?

$$\text{解 } \bar{u} = \frac{\cos 0.871}{1.30} \approx 0.49543$$

由于

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{\cos y}{x^2}, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = -\frac{\sin y}{x}$$

所以

$$\begin{aligned} \varepsilon(\bar{u}) &\approx \left| \frac{\cos 0.871}{1.30^2} \right| \times 0.005 + \left| \frac{\sin 0.871}{1.30} \right| \times 0.0005 \\ &\approx 0.0022 < 0.005 \end{aligned}$$

因而 $\bar{u} = 0.49543$ 能有两位有效数字。

1.4 数值运算中的一些原则

数值运算总是在一个预先设计好的算法中进行的。所谓算法就是一个有限的基本运算序列, 这个序列规定了怎样从输入数据去计算出问题的解。这里所说的基本运算是指四则运算和一些基本函数的计算。由于运算是在计算机中进行的, 而计算机的字长有限, 因而产生舍入误差。为减少舍入误差的影响, 设计算法时应遵循以下一些原则:

1. 要有数值稳定性, 即能控制舍入误差的传播。

例如, 要在四位十进制的限制下计算积分

$$y_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx, \quad n = 0, 1, \dots, 100$$

利用关系式 $y_n + 5y_{n-1} = \frac{1}{n}$, 可得出如下的算法

$$\begin{cases} y_0 = \ln 6 - \ln 5 \approx 0.1823 \\ y_n = \frac{1}{n} - 5y_{n-1}, n=1, 2, \dots, 100 \end{cases}$$

这个算法显然不具有数值稳定性，因为 $y_0 \approx 0.1823$ 的舍入误差传给 y_1 时，就增至 5 倍，传到 y_{100} 时将是 5^{100} 倍。今利用估计式

$$\frac{1}{6(n+1)} < y_n < \frac{1}{5(n+1)}$$

并取 $y_{100} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{1}{606} + \frac{1}{505} \right) \approx 0.001815$ ，得出另一算法

$$\begin{cases} y_{100} \approx 0.001815 \\ y_{n-1} = \frac{1}{5n} - \frac{1}{5} y_n, n=100, 99, \dots, 1 \end{cases}$$

这个算法就具有数值稳定性。

2. 两数相加要防止较小的数加不到较大的数中所引起的严重后果。

较小的数加不到较大的数中有时是允许的，但有时会产生严重的后果。例如，在十位十进制的限制下求解一元二次方程

$$x^2 + 10^4 x - 0.01 = 0$$

并且使用求根公式

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

这时，按照加法运算的对阶规则，应有

$$\begin{aligned} b^2 - 4ac &= 10^8 + 0.04 \\ &= 0.1 \times 10^9 + 0.0000000004 \times 10^9 \end{aligned}$$

由于计算机只能存放十位十进制数，所以，上式中的 0.0000000004×10^9 被当作是 0，因而

$$b^2 - 4ac = 0.1 \times 10^9 = 10^8$$

于是，得到