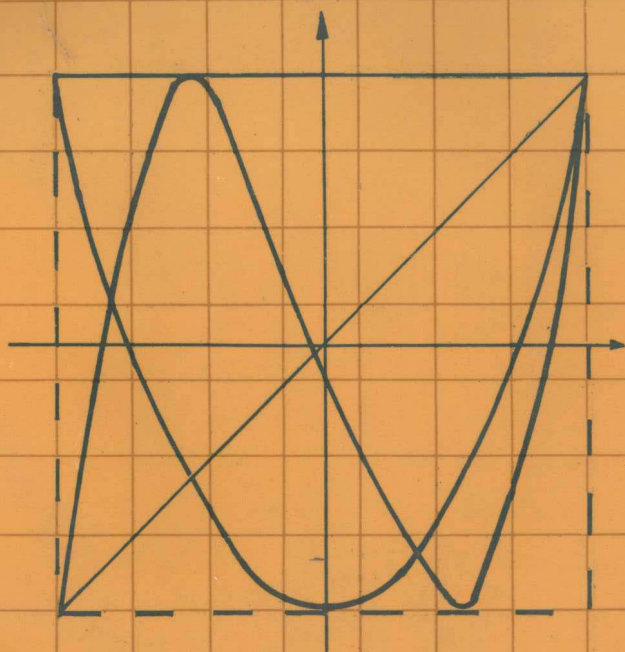


战同胜 编

数值分析与计算



大连理工大学出版社

电子计算机应用数学

数值分析与计算

战同胜 编

大连理工大学出版社

内 容 提 要

本书是数值分析与计算的简明教程。重点介绍用电子计算机解题的数值理论和最先进有效的算法。全书分十一章，主要内容有：线性方程组的直接法和迭代法；矩阵特征值问题；插值法；数值积分；函数逼近与数据拟合；非线性方程的解法；常微分方程的初值问题和边值问题；偏微分方程的解法等。每章之后附有不少习题，习题有提示与答案。

本书适用于工科院校各专业、业余大学和电视大学有关专业的大学生、研究生和教师以及从事科学和工程计算的科技人员和计算工作者。可作为教材，也可作为编制算法、程序设计和上机电算的参考书。

数 值 分 析 与 计 算

Shuzhi Fenxi yu Jisuan

战 同 胜 编

大连理工大学出版社出版发行 (邮政编码: 116024)

(出版社登记证号[辽]第16号) 大连理工大学印刷厂印刷

开本: 787×1092 1/32 印张: 11.5 字数: 248 千字

1991年7月 第1版 1991年7月第1次印刷

印数: 0001—2060册

责任编辑: 张亚军

封面设计: 姜严军

责任校对: 宋玉珠

ISBN 7-5611-0390-5/O·64 定价: 5.00元

前 言

自从人类跨入电子计算机时代以来,数学软件有了飞快的发展。为面向科学与工程计算所需要的数学软件,本书重点介绍了数值分析与计算的基本原理和有效算法。目的在于使读者了解数值分析与计算领域中可供应用的成就,了解各种方法的针对性和局限性,使企图解决实际问题的读者,在面临庞大实用程序的软件库时,能结合问题本身的特点,对方法做出取舍,进行认真的数值分析和富有成效的计算,以达到通向享用高质量数学软件的自由。基于上述目的,本书在编写过程中注意以下几个特点:第一,注重数值分析的基本原理、思想、和方法的阐明。只有有了良好数值分析的理论基础,才能设计出新的优化算法和进行有效的数值计算。第二,本书也注重数值计算,重视离散化、算法化和程序化方法。为此,选编了一些内容较新并且实用的方法,凡常用的数值方法,都用接近于语句形式编出上机算法,并配有数值例题。第三,本书注意将理论、算法、例题和正文后的习题有机的密切配合,便于教学、学习和使用。

本书按照 68~72 学时组织内容的,若去掉书中 * 号部分在 51~54 学时即可讲授完毕。

本书在编写过程中曾得熊西文教授的关心和帮助,听课的研究生们也对本书内容进行了认真的校对。在此表示衷心的感谢。

编 者

1991 年 4 月于大连

目 录

第一章 预 篇	1
§ 1.1 数值分析与计算研究的对象和特点	1
§ 1.2 误差分析	5
§ 1.3 算法的概述	12
习 题 一	17
第二章 解线性方程组的直接法	20
§ 2.1 引 言	20
§ 2.2 Gauss 消去法	21
§ 2.3 Gauss 主元素法	30
§ 2.4 Gauss 消去法的变形	39
§ 2.5 向量和矩阵的范数	48
§ 2.6 扰动分析初步	54
习 题 二	61
第三章 解线性方程组的迭代法	67
§ 3.1 引 言	67
§ 3.2 Jacobi 迭代法	68
§ 3.3 Gauss-Seidel 迭代法	71
§ 3.4 SOR 方法	74
§ 3.5 迭代法的收敛性	77
习 题 三	85

第四章 矩阵特征值问题的数值计算	88
§ 4.1 矩阵特征值问题	88
§ 4.2 幂法	89
§ 4.3 反迭代法	101
§ 4.4 压缩法	107
习 题 四	113
第五章 插值方法	116
§ 5.1 引言	116
§ 5.2 Lagrange 插值	117
§ 5.3 Newton 插值	123
§ 5.4 等距节点的插值	129
§ 5.5 Hermite 插值	137
§ 5.6 三次样条插值	142
习 题 五	153
第六章 数值积分	157
§ 6.1 引言	157
§ 6.2 Newton-Cotes 积分	158
§ 6.3 Romberg 积分	167
§ 6.4 正交多项式	173
§ 6.5 Gauss 积分	179
§ 6.6 重积分*	187
习 题 六	194
第七章 函数逼近	199
§ 7.1 引言	199
§ 7.2 最佳逼近	200
§ 7.3 最佳平方逼近	212

§ 7.4	数据拟合	220
习 题 七		227
第 八 章	非线性方程的解法	230
§ 8.1	引 言	230
§ 8.2	求实方程实根的逐次分半法	230
§ 8.3	迭代法	233
§ 8.4	Aitken 加速法	240
§ 8.5	Newton 法	242
§ 8.6	多项式的零点*	248
习 题 八		252
第 九 章	常微分方程初值问题的数值解法	256
§ 9.1	初值问题	256
§ 9.2	Euler 法	259
§ 9.3	Runge-Kutta 法	267
§ 9.4	线性多步法	272
§ 9.5	微分方程组与高阶方程的数值解法	284
习 题 九		291
第 十 章	常微分方程边值问题的数值解法	296
§ 10.1	边值问题	296
§ 10.2	试射法	297
§ 10.3	有限差分法	305
习 题 十		311
第 十 一 章	偏微分方程的数值解法	313
§ 11.1	引 言	313
§ 11.2	椭圆型偏微分方程	319
§ 11.3	抛物型偏微分方程	326

§ 11.4 双曲线型偏微分方程.....	331
习 题 十 一.....	338
习题解答与提示.....	341
参考书目.....	359

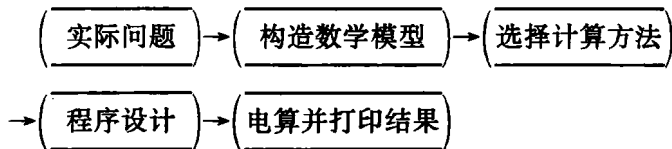
第一章 预 篇

§ 1.1 数值分析与计算研究的对象和特点

(一) 数值分析与计算研究的对象

数值分析与计算研究的对象是：各种数学问题的数值分析和计算方法(近似解法)，其中包括方法的推导和求解过程的理论分析。

学习数值分析与计算的重要性，可以从下面计算机解算实际问题的全过程看出：



有了符合实际的数学模型，还必须进行认真的数值分析和选择好的计算方法，才能又快又好地计算出数值结果来。数值分析与计算将提供许多常用的、有价值的计算方法。

本书通过数值分析，将介绍各种数学问题常用的数值计算方法。

(二) 数值分析与计算的特点

数值分析与计算有以下几个基本特点:

1. 数值分析与计算紧密结合电算

本书通过数值分析, 提出许多具体数学问题的算法, 学了算法就要编制程序上机解题。因此, 数值分析与计算是实践性很强的数学学科。

2. 强调构造性

数值分析中许多问题的存在性的证明, 多采用构造性的方法把它的计算公式构造出来。这不但证明了存在性, 而且有了具体计算公式便于编制程序上机计算。

例 1.1 对命题“每一个二次代数方程至多有两个不同的实根”给出构造性与非构造性的证明。

证明: (1) 构造性证明: 设

$$ax^2 + bx + c = 0 \quad (1.1)$$

为给定的二次方程, 其中 a, b, c 为实数且 $a \neq 0$ 。由初等代数知道, 当 $b^2 - 4ac > 0$ 时, 方程(1.1)有两个不同实根:

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (1.2)$$

当 $b^2 - 4ac = 0$ 时, 方程(1.1)有两个相同的实根:

$$x = -\frac{b}{2a} \quad (1.3)$$

当 $b^2 - 4ac < 0$ 时, 方程没有实根。

(2) 非构造性证明: 用反证法。假设(1.1)有三个不同的实根 x_1, x_2, x_3 , 代入(1.1)得

$$\begin{cases} ax_1^2 + bx_1 + c = 0 \\ ax_2^2 + bx_2 + c = 0 \\ ax_3^2 + bx_3 + c = 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

由于行列式

$$\begin{vmatrix} x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^2 & x_2 & 1 \\ x_3^2 & x_3 & 1 \end{vmatrix} = (x_1 - x_2)(x_1 - x_3)(x_2 - x_3) \neq 0$$

根据线性代数的基本理论, 方程(1.4)只能有零解, 即
 $a=b=c=0$, 这与题设 $a \neq 0$ 矛盾。 ■

从例 1.1 可以看到非构造性证明并未给出求根的方法; 而构造性证明, 不仅证明了二次方程根的存在, 而且给出了求根公式(1.2)或(1.3)。在学习本书第五章的插值法时, 只要给出一个数据表和某些条件, 我们就能构造出各种插值多项式来。

3. 强调离散性

一个连续性的数学问题要上机计算, 必须进行离散化。例如把定积分离散成求和, 把微分方程离散成差分方程, 等等, 这在本书的第六、九、十、十一章中都会遇到。现举一例说明如下:

例 1.2 计算定积分

$$I = \int_0^1 e^{-x^2} dx \quad (1.5)$$

解 (1.5)是一连续性问题, 无法在计算机上实现。在高等数学中(或见本书第六章, § 6.2), 定积分可用梯形法近似计算, 即

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{n} \left[\frac{1}{2}(y_0 + y_n) + y_1 + \cdots + y_{n-1} \right] \quad (1.6)$$

其中 $a=x_0 < x_1 < \cdots < x_n=b$ 是 n 等分区间 $[a, b]$ 的分点; y_0 ,

$y_1, \dots, y_n$ 是被积函数在各分点的函数值。公式(1.6)是把定积分离散成为求和。用(1.6)的近似公式可以求(1.5)的积分了。若取 $n=10$, $x_i=0.1i$, $y_i=e^{-x_i^2}$, ($i=0, 1, \dots, 10$), $a=0$, $b=1$, 代入(1.6)计算

$$\begin{aligned}\int_0^1 e^{-x^2} dx &\approx \left[\frac{1}{2}(1 + 0.36788) + 0.99005 + 0.96079 \right. \\ &\quad + 0.91393 + 0.85214 + 0.77880 + 0.69768 \\ &\quad \left. + 0.61263 + 0.52729 + 0.44486 \right] \times 0.1 \\ &= 0.74621\end{aligned}$$

4. 强调有限性

计算机运算必须在有限次停止。把一个无限过程的数学问题, 转化为满足一定误差要求的有限步来完成。

例 1.3 计算无理数 e 的近似值

解 由高等数学, e^x 展开式为

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots$$

取 $x=1$, 得

$$e = 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \dots + \frac{1}{n!} + \dots \quad (1.7)$$

这是一个无限过程, 计算机无法求到精确值。只能在(1.7)中取有限项计算, 再估计误差。若取

$$e \approx 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \dots + \frac{1}{n!}$$

其误差为

$$|R_n| < \frac{e}{(n+1)!} < \frac{3}{(n+1)!}$$

当 $n=10$ 时, 可算出 $e \approx 2.718281$, 其误差不超过百万分之

一。

数值分析与计算还要体现出函数逼近的思想与数值分析方法的结合,以逼近思想为指导做认真的数值分析与计算。

以上这些特点,在以后各章中都有所叙述。了解这些特点,对学习数值分析与计算很有好处。作为练习,见习题一,1~3题。

§ 1.2 误差分析

学习数值分析与计算的整个过程,都要注意误差分析。

(一) 误差的来源

误差的主要来源有以下几方面。

1. 模型误差 由实际问题抽象出数学模型,要简化许多条件,这就不可避免地要产生误差。实际问题的解与数学模型的解之间的误差,叫做模型误差。

2. 观测误差 初始数据多是由观测而得。由于观测手段的限制,得到的数据必然有误差,这类误差叫做观测误差。这里不包含差错,如数据的抄错,程序的写错,等等。

3. 截断误差 把无限的计算过程用有限的计算过程代替,这样产生的误差叫做截断误差。

例 1.4 函数 $f(x)$ 的 Taylor 展开式

$$\begin{aligned} f(x) = & f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \cdots \\ & + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1} \quad (1.8) \end{aligned}$$

其中 ξ_x 在 x_0 与 x 之间。

若在(1.8)中取

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n$$

则截断误差为

$$\mathcal{E}_{n+1} = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}$$

■

4. 舍入误差 因为实际计算是按有限位进行的, 所以计算的每一步都可能有误差, 这种误差叫做舍入误差。一般说来, 计算过程中舍入误差是不可避免的。数值分析与计算主要研究的是截断误差与舍入误差, 以后每一章都会遇到。重视误差分析和控制误差扩散是十分必要的, 否则得到的数值计算结果的精确度是不知道的。没有误差分析的结果是不可信的, 也不敢用。

(二) 绝对误差、相对误差和有效数字

1. 绝对误差和相对误差

定义 1.1 若 x^* 是 x 的近似数, 则称

$$x^* \text{ 的绝对误差} = |x - x^*|$$

$$x^* \text{ 的相对误差} = \frac{|x - x^*|}{|x|}$$

绝对误差是有量纲单位的量, 相对误差是一个无量纲的量。

例 1.5

(1) 若 $x = 0.3000 \times 10$, $x^* = 0.3100 \times 10$, 则绝对误差为 0.1, 相对误差为 $0.333\bar{3} \times 10^{-1}$

(2) 若 $x = 0.3000 \times 10^{-3}$, $x^* = 0.3100 \times 10^{-3}$, 则绝对误差为 0.1×10^{-4} , 相对误差为 $0.333\bar{3} \times 10^{-1}$

(3) 若 $x = 0.3000 \times 10^4$, $x^* = 0.3100 \times 10^4$, 则绝对误差

为 0.1×10^3 , 相对误差为 0.3333×10^{-1}

这个例子表明, 计算的绝对误差虽然差别很大, 却有相同的相对误差。因而对精确性的度量, 只讨论绝对误差, 有时会使人误解, 而相对误差更富有意义。

2. 有效数字

为了便于了解 x^* 作为 x 近似数具有几位有效数字的取值范围, 我们用相对误差引入下面定义。

定义 1.2 设 t 是最大的非负整数, 对这个 t 若

$$\frac{|x - x^*|}{|x|} < 5 \times 10^{-t} \quad (1.9)$$

则说 x^* 作为 x 的近似数, 具有 t 位有效数字。

例 1.6 对于数 1000, 为了使 x^* 近似到 1000 有 4 位有效数字, 由定义 1.2, x^* 必须满足

$$\frac{|x^* - 1000|}{|1000|} < 5 \times 10^{-4}$$

因此 x^* 必须取值在 $999.5 < x^* < 1000.5$ 的范围。只要 x^* 在此范围取值, 它作为 1000 的近似数, 都具有 4 位有效数字。同样, 对 5000, 9990, 为了精确到 4 位有效数字, 由 (1.9) x^* 必须分别满足 $4997.5 < x^* < 5002.5$, $9985.005 < x^* < 9994.995$

定义 1.2 与通常直观的有效数字的概念是一致的。但定义 1.2 的好处是, 它给我们一个连续性的概念。

作为进一步练习, 见习题一, 4~7 题。

(三) 算术运算中的误差界

由于精确数 x 往往是未知的, 因此在计算中必须估计误差的上界。

若令

$$|x - x^*| = |\Delta x^*| \leq \delta x^*, |y - y^*| = |\Delta y^*| \leq \delta y^*$$

则算术运算中误差上界的计算公式推导如下：

1. 对加法

$$\begin{aligned} |(x + y) - (x^* + y^*)| &= |(x - x^*) + (y - y^*)| \\ &\leq |x - x^*| + |y - y^*| \leq \delta x^* + \delta y^* \end{aligned}$$

2. 对减法

同样有

$$|(x - y) - (x^* - y^*)| \leq \delta x^* + \delta y^*$$

3. 对乘法

$$\begin{aligned} |xy - x^*y^*| &= |(x^* + \Delta x^*)(y^* + \Delta y^*) - x^*y^*| \\ &= |x^*y^* + x^*\Delta y^* + y^*\Delta x^* + \Delta x^*\Delta y^* - x^*y^*| \\ &\leq |x^*|\delta y^* + |y^*|\delta x^* + \delta x^*\delta y^* \end{aligned}$$

若假定 $|x^*| \gg \delta x^*$, $|y^*| \gg \delta y^*$, 则上式可用一阶近似逼近, 得到的虽然并非严格, 但是实用的公式

$$|xy - x^*y^*| \leq |x^*|\delta y^* + |y^*|\delta x^*$$

4. 对除法

$$\begin{aligned} \left| \frac{x}{y} - \frac{x^*}{y^*} \right| &= \left| \frac{x^* + \Delta x^*}{y^* + \Delta y^*} - \frac{x^*}{y^*} \right| \\ &= \left| \frac{x^*y^* + y^*\Delta x^* - x^*y^* - x^*\Delta y^*}{y^*(y^* + \Delta y^*)} \right| \\ &\leq \frac{|y^*||\Delta x^*| + |x^*||\Delta y^*|}{|y^*|^2(1 - |\Delta y^*|/|y^*|)} \leq \frac{|y^*|\delta x^* + |x^*|\delta y^*}{|y^*|^2(1 - \delta y^*/|y^*|)} \end{aligned}$$

若 $|y^*| \gg \delta y^*$, 则得近似不等式为

$$\left| \frac{x}{y} - \frac{x^*}{y^*} \right| < \frac{|y^*|\delta x^* + |x^*|\delta y^*}{|y^*|^2}$$

综上所述, 列表如下。

表 1.1 算术运算中绝对误差界

$$\delta(x^* + y^*) = \delta x^* + \delta y^*$$

$$\delta(x^* - y^*) = \delta x^* + \delta y^*$$

$$\delta(x^* y^*) \approx |x^*| \delta y^* + |y^*| \delta x^*$$

$$\delta\left(\frac{x^*}{y^*}\right) \approx \frac{|x^*| \delta y^* + |y^*| \delta x^*}{|y^*|^2} \quad (y^* \neq 0)$$

例 1.7 若数 $a_i, b_i (1 \leq i \leq n)$ 有相同的误差界 e , 求

$\sum_{i=1}^n a_i b_i$ 的误差界。

解 对 $i=1, 2, \dots, n$ 由表 1.1 第三个公式, 有

$$\delta(a_i b_i) \approx |a_i| \delta b_i + |b_i| \delta a_i \leq e(|a_i| + |b_i|)$$

所以

$$\delta\left(\sum_{i=1}^n a_i b_i\right) = \sum_{i=1}^n \delta(a_i b_i) \leq e \sum_{i=1}^n (|a_i| + |b_i|) \quad \blacksquare$$

利用表 1.1 中的公式和相对误差的定义, 可以推出算术运算中相对误差的界, 见表 1.2

表 1.2 算术运算中相对误差的界

$$\frac{\delta(x^* + y^*)}{|x^* + y^*|} = \max\left\{\frac{\delta x^*}{|x^*|}, \frac{\delta y^*}{|y^*|}\right\}$$

$$\frac{\delta(x^* - y^*)}{|x^* - y^*|} = \frac{\delta x^* + \delta y^*}{|x^* - y^*|}$$

$$\frac{\delta(x^* y^*)}{|x^* y^*|} \approx \frac{\delta x^*}{|x^*|} + \frac{\delta y^*}{|y^*|}$$

$$\frac{\delta(x^*/y^*)}{|x^*/y^*|} \approx \frac{\delta x^*}{|x^*|} + \frac{\delta y^*}{|y^*|}$$

在表 1.2 中, 用近似数的绝对值做分母, 不符合定义