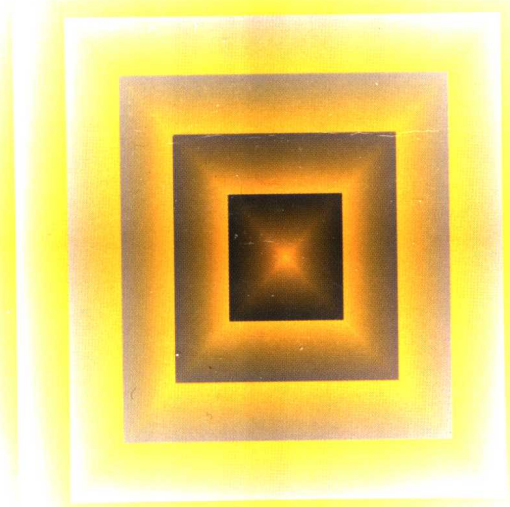


数值计算的算法与分析

西安交通大学数学研究生教学丛书

张可村 赵英良 编著



 科学出版社
www.sciencep.com

西安交通大学数学研究生教学丛书

数值计算的算法与分析

张可村 赵英良 编著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书主要介绍了数值计算中的经典、常用和一些最新方法,并且介绍了与构造算法和算法性能分析相关的理论及必要的数学基础.其算法主要包括如下四个方面:代数方程组数值解,如共轭斜量法、Newton 迭代法、区间迭代法等;常微和偏微分方程数值解法,如差分法、有限元法、区域分解算法等;数值逼近的各种方法,如插值法、逼近法、任意阶光滑逼近函数构造法、小波变换与逼近等;最优化方法,如非线性规划、线性规划、二次规划、几何规划、遗传算法、神经网络法等.

本书可作为研究生、博士生、计算数学和应用数学专业的本科生教材,也可供科技人员,特别是从事工程科学技术的工作人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

数值计算的算法与分析/张可村,赵英良编著. —北京:科学出版社,2003
(西安交通大学数学研究生教学丛书)

ISBN 7-03-009364-X

I. 数… II. ①张…②赵… III. 数值计算-计算方法-研究生-教学参考资料 IV. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 025729 号

责任编辑:林 鹏 毕 颖/责任校对:包志虹
责任印制:安春生/封面设计:王 浩

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>

西 源 印 刷 厂 印 刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2003年1月第一版 开本:B5(720×1000)

2003年1月第一次印刷 印张:22 1/2

印数:1—3 000 字数:430 000

定价:33.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换(环伟))

前 言

高科技的突飞猛进,使计算机的硬件和软件应用于每个科学研究领域、生产部门和各级政府的管理决策部门,从而促进了科学技术的高速发展.然而如何才能有效地把计算机广泛应用于每一个研究领域和生产部门呢?这就要求每一个应用者熟练掌握和使用各种数值方法.正因为如此,现已有许多关于“计算方法”方面的著作和相应的计算机软件,但还不能满足现代科学技术发展的需要.因此必须要求不同领域的每一个科技工作者、管理人员,根据自己所研究问题的特点,构造相应的数值方法.不仅要善于从现有算法中选择相适应的方法,更重要的是如何根据实际问题的需要,改进和构造新的数值方法,弥补现有算法的不足,这就是我们写这本书的主要目的.我们尽量把常用的、经典的和最新的方法收集在书中,突出构思方法和构造算法常用技巧和手段,略去了一些古典的与算法构造关系不大的数学理论分析,在照顾到系统性、逻辑性和可读性的同时,特别注意收集了各领域中最新出现的数值方法和本书作者的一些最新研究成果,与近代科学技术相适应.

全书共分六章.第一章绪论,从宏观上简述了本书的目的、研究的内容和采用的手段;第二章介绍了构造数值方法常用的数学基础,使具有大学本科数学基础的读者能顺利读完本书;第三章介绍迭代技术在求解代数方程组中的应用;第四章,讨论离散化技术在求解常微和偏微分方程组中的各种应用;第五章介绍离散问题解析化技术在数值逼近论中的应用;第六章讨论优化技术在数学规划方法中的应用.第一、五、六章由张可村负责编写,第二、三、四章由赵英良负责编写.

感谢如下同志为本书撰写了他们最新、最好的研究成果:简金宝教授在约束规划中,撰写了强次可行方向法与快速算法;杨守志副教授在离散问题解析化技术中,撰写了小波变换与逼近;艾文宝副教授在线性规划中,撰写了内点算法;李换琴副教授在无约束规划方法中撰写了改进拟 Newton 法;王燕军博士撰写了不确定型优化算法、二次规划算法、信赖域法等.

还要感谢科学出版社有关领导同志,特别是本书的责任编辑对本书所付出的辛勤劳动.

由于我们水平所限,疏漏之处难以避免,恳请读者指正.

编者

2002.10

目 录

前言

第一章 绪 论	1
§1 现代科学技术的一般过程	1
1.1 工程问题数学化(数学建模)	1
1.2 数学问题数值化(算法与分析)	1
1.3 数值问题机器化(程序设计)	2
1.4 科学试验	2
§2 数值计算探讨的主要问题	3
2.1 线性和非线性代数方程组的数值解法	3
2.2 微分方程(组)的数值求解法	3
2.3 逼近函数的构造法(数值逼近)	5
2.4 数学规划方法	5
§3 误差的来源及其对算法的影响	6
3.1 误差的来源	6
3.2 误差的种类及求法	7
3.3 误差对算法的影响	8
§4 构造算法的途径	9
4.1 迭代技术	9
4.2 离散化技术	9
4.3 离散问题解析化技术	10
4.4 优化技术	11
第二章 理论基础	13
§1 矩阵	13
1.1 特殊矩阵	13
1.2 矩阵分解	15
§2 向量和矩阵的范数	16
2.1 向量范数	16
2.2 矩阵范数	17
§3 集合的基本概念	20
3.1 开集与闭集	20
3.2 极限与收敛	21
§4 凸集与凸函数	21
4.1 凸集	21

4.2 凸函数	22
§5 多元函数	23
5.1 多元函数的连续性	23
5.2 函数序列的收敛性和有界函数	24
5.3 多元函数的梯度和海赛矩阵	25
§6 压缩映像原理与不动点原理	25
§7 非线性映射	27
§8 变分原理	31
8.1 二次函数的极值	31
8.2 能量法	32
8.3 虚功原理	34
8.4 变分原理常用的近似解法	35
参考文献	38
第三章 迭代法及其收敛性质	39
§1 线性代数方程组的一般迭代法	39
1.1 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法	39
1.2 超松弛迭代法	43
1.3 块迭代方法	45
§2 非线性方程组的解法	46
2.1 牛顿法及其变形方法	47
2.2 拟牛顿法	49
§3 共轭方向法	51
3.1 最速下降方法	51
3.2 共轭方向法	53
3.3 预处理的共轭方向法	57
§4 求解代数方程组的新算法	58
4.1 病态线性方程组的微分方程解法	58
4.2 基于 Galerkin 原理的 Arnoldi 算法	60
4.3 非线性方程的区间算法	65
参考文献	71
第四章 离散化技术	73
§1 积分数值方法	73
1.1 Newton-Cotes 公式	73
1.2 求积公式的舍入误差与 Romberg 积分	76
1.3 高斯型求积公式	79
1.4 奇异积分	87
§2 常微分方程初值问题的数值方法	92
2.1 单步法	92

2.2 单步法的截断误差	94
2.3 线性多步法	95
2.4 刚性方程组	97
§3 差分法	101
3.1 差分方程的建立和解法	102
3.2 差分解的误差估计与收敛性	105
§4 有限元法	107
4.1 等价性定理	108
4.2 剖分与插值	108
4.3 单元分析	111
4.4 总体合成	114
4.5 解题步骤与例题	116
§5 微分方程的新算法	119
5.1 混合有限元方法	119
5.2 区域分解算法	124
5.3 无限元法	127
参考文献	132
第五章 离散问题解析化	133
§1 插值法	133
1.1 插值多项式的构造方法	134
1.2 插值多项式的惟一性与误差估计	137
1.3 分段插值多项式的构造法——样条插值	141
1.4 样条函数空间与 B -样条基底	147
§2 逼近法	152
2.1 最小二乘逼近法	152
2.2 样条函数的最小二乘逼近法	158
2.3 最优一致逼近	165
2.4 二元样条函数及其最小二乘逼近法	166
§3 任意阶光滑逼近函数的构造法	172
3.1 逼近函数所满足的优化模型	172
3.2 解析解的导出方法	173
3.3 计算解曲线系数的递推公式	177
3.4 系数解析表达式的导出	179
3.5 Lagrange 乘子的确定法	181
§4 小波变换与逼近	184
4.1 Fourier 变换	185
4.2 小波变换	189
4.3 刻画小波特性的几个参数	192

4.4	正交小波和多分辨分析	194
4.5	I. Daubechies 的紧支撑正交小波的构造	200
4.6	紧支撑 B-样条小波	203
4.7	信号的分解与重构算法	204
4.8	小波包	207
4.9	多重尺度函数及多重小波	211
	参考文献	215
第六章	优化技术	217
§ 1	无约束规划方法	218
1.1	最佳步长寻求法	219
1.2	下降算法类及其收敛性	222
1.3	改进拟 Newton 法	230
1.4	共轭方向算法类及其有限步收敛性	239
1.5	不需要计算导数的共轭方向法	247
1.6	信赖域法	250
§ 2	约束规划方法	258
2.1	转化成无约束规划问题的方法	258
2.2	强次可行方法与快速收敛算法	272
§ 3	线性规划	285
3.1	线性规划的基本概念与常用算法	285
3.2	内点算法	291
§ 4	二次规划	298
4.1	等式约束下二次规划算法	299
4.2	一般二次规划算法	302
4.3	凸二次规划的解法	305
§ 5	几何规划	310
5.1	正定式几何规划及其对偶规划	310
5.2	几何规划的算法	318
§ 6	不确定型优化算法	334
6.1	遗传算法	334
6.2	神经网络算法	341
	参考文献	347
	结束语	351

第一章 绪 论

§ 1 现代科学技术的一般过程

高科技的发展,迫使计算机科学的发展突飞猛进.由于计算机的高速、大容量、多功能,又为现代科学技术的发展提供了最优、最快的新途径,一般可按如下四个阶段进行.

1.1 工程问题数学化(数学建模)

采用恰当的数学语言,描述自然科学、社会科学、管理和决策科学各领域中关键而核心的问题,常称为数学建模.要建立一个好的数学模型,对于单方面的专家都是很困难的,必须由各相关领域的专家和数学工作者,特别是从事计算数学、应用数学研究工作的学者,紧密结合,相互取长补短才有可能.这是因为评价一个模型的优劣主要有两点:其一,用什么样的数学语言,才能真正反映工程实际;其二,所用数学语言,可否在计算机中实现,这二者缺一不可.因此,要求参与建模的工程专家必须精通专业,具有一定的数学和计算数学的基础知识,对于数学工作者,要掌握宽广的数学知识,还要了解该工程问题在国内外现状,面临的主要问题,采用哪种数学语言来描述此问题更为恰当.工程中的数学模型,一般可分为三类:其一,连续型(确定型),即能用数学解析式刻画工程问题;其二,离散型(统计型),找不到确定数学解析式来描述该工程问题;其三,不确定型(随机型).本书重点讨论连续型.

1.2 数学问题数值化(算法与分析)

从工程实际中抽象出的数学问题,绝大多数都不能直接用计算机语言来识别,因此,先进的计算工具——计算机,不能直接求解相应的数学问题,自然不能用于解决相应的工程问题.把数学问题数值化,就是如何根据不同的数学问题,寻求相应的方法,此方法(常称为数值方法)只能用四则运算和一些逻辑运算或者直接用计算机语言能描述相应的数学问题,便于用计算机求解的数学问题.此方法的优劣,直接关系到能否把计算机用于解决高科技问题.由此可知,数值计算在当代科技中的地位和作用,它直接关系到能否用现代的数学方法,最先进的计算工具去解决现代科学技术中的管理问题、规划和决策问题,各领域中高科技中的关键性问题.因此对数值计算的算法的构造,优劣的分析,是每一个科技工作者、决策者不可

缺少的基础知识,因此对于即将走上工作岗位的本科生,特别是硕士生、博士生是必须掌握的。

1.3 数值问题机械化(程序设计)

要求程序设计者,用最简练的机器语言,最快的速度,最少的存储量,设计软件,并获得准确的计算结果.要达到这些要求,程序设计者必须掌握数值方法的构思途径,算法的关键和难点;熟悉计算机软硬件的基础知识,能灵活应用某种机器语言,准确无误的描述每一个算法,并能以最快的速度发现并解决计算过程中出现的各种异常问题.这是检验程序设计者水平高低的客观标准,这也是衡量一个决策者,工程师,管理者水平高低的重要标志.程序设计,对于每一个科技工作者,管理者,都是必须具备的技能,掌握这种技能入门快,见效也快,也是年轻的科技工作者最喜欢干的工作.但要真正作一个高级程序设计者,也是十分困难的,必须具备丰富的想象力,总结归纳和设计的能力,具有总工程师,总设计师的能力和水平.

1.4 科学试验

前面三个阶段,只是为现代科学技术提供了一种途径,也可以说是捷径.但这种途径是否真正能解决科技中的问题,被生产实际部门直接采用,还必须将第三阶段获得的计算结果,在科学试验室进行检验,是否与工程实际相符?是否能推广应用?若不相符,分析其不符的根源何在?确定返回到前三阶段的某一阶段重新开始,重复上述工作直到满意为止.这一步是必不可少的,且很成熟的,只要有相应的试验设备和原材料都可进行.前三阶段的实质就是把一个实际工程问题,置入计算机中,在计算机中可做大量的模拟试验,当基本上与实际问题相符时,再经过此步.这样可以减少实际试验次数,节省大量的原材料,缩短设计周期,且还能使性能达到最佳,是现代科学的必经途径.不采用现代科学技术的分析方法和手段只埋头做试验的方法,远远跟不上现代科学技术的发展.

当试验成功后,就可试制新产品,推广应用.实现,研制→生产→销售一体化,有助于提高产品质量,增强产品市场竞争能力,获得不可估量的社会效益和经济效益.

任何一个有竞争力的新产品,任何一项能产生社会和经济效益的科研课题,必须经过上述4个阶段.第一阶段是根本,模型是否反映工程实际问题的需要,取决于当代高级科技人员的理论水平;第二阶段是桥梁,所构造的算法是否能真正取代原数学模型,它的有效性和可实现性,取决于从事计算数学的研究人员的理论水平和创新能力;第三阶段是检验前两阶段工作的有效性和可行性的方法和手段;第四阶段检验该项研究成果是否有实际应用价值,同时也检验了前三阶段研究工作的

可靠性,也是能否见到经济效益和社会效益的关键。

§2 数值计算探讨的主要问题

数学来源于实践,从工程实际中抽象出来的连续型数学问题,从古到今大体上可分为如下四类:1. 线性 and 非线性代数方程(组)求解;2. 偏(常)微分方程、积分方程求解;3. 逼近函数的构造方法(数值逼近);4. 数学规划问题。除此之外,还有离散型、不确定(随机)型。在高科技中,还有许多的工程问题,很难用现有的数学语言来刻画。必须从工程实际需要出发,探索新的数学语言,构造相应的数值求解方法,不断地产生新的数学分支。这就需要众多的工程专家,数学工作者紧密结合,深入到科学研究前沿,去发现新问题,解决新问题,从而促进科学技术高速发展。在本书中,只对上述四类问题探索数值求解方法及其与算法有关的理论分析。为了使读者有一个宏观的印象,先对上述四类问题作如下简介。

2.1 线性 and 非线性代数方程组的数值解法

此类问题是后三类问题的基础,一般表示式如下:

$$f_j(x_1, x_2, \dots, x_n) = b_j, j = 1, 2, \dots, m$$

在一般情况下: $n \geq m$ 。

记 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T, b = (b_1, b_2, \dots, b_m), F(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x))^T$ 。上方程组可简记为 $F(x) = b$ 。

当 $f_j(x) (j = 1, 2, \dots, m)$ 均为线性函数:

$$f_j(x) = \sum_{i=1}^n a_{ji}x_i, \quad j \leq 1, 2, \dots, m$$

时称 $F(x) = b$ 为线性方程组: $Ax = b$, 其中 $A = (a_{ji})_{m \times n}$ 。此问题虽然是众所周知的,但当 $n > m$, 且当 m, n 特别大时,常规的求解方法失效。

当 $f_j(x) (j = 1, 2, \dots, m)$ 之一为非线性函数时,称 $F(x) = b$ 为非线方程组,此时,当 n 特别大时,求解十分困难。

又当 $m = n = 1$, 是大家熟知的非线性方程,其求解方法多而成熟,读者在“高等数学”或“数学分析”中都已学过。

此类问题应用极为广泛,在工程中,特别是管理科学中,许多问题都可归结为解线性或非线方程(组),且还有其他数学分支的数值求解过程,也要借助于这类问题的求解方法。惯用的解法是迭代法,详见本书第三章。

2.2 微分方程(组)的数值求解法

在最优控制,机械工程,能源动力工程,流体工程中有许多问题抽象出的数学

问题归结为求解常微分方程(组)的始值问题:

$$\begin{cases} f(x, y(x), y'(x), \dots, y^{(n)}(x)) = 0 \\ y^{(k)}(x_0) = y_k, (k = 0, 1, \dots, n-1) \end{cases}$$

其中, $y^{(0)}(x_0) = y(x_0)$, $y^{(k)}(x_0)$ 表示 $y(x)$ 的 k 阶导数在 x_0 处的值, y_k 为给定的初始条件, 也可换成两端边值条件, 如

$$\begin{cases} y^{(k)}(a) = y_k, (k = 0, 1, \dots, l-1) \\ y^{(n-k)}(b) = y_k, (k = n, n-1, \dots, n-(l-1)) \end{cases}$$

或偏微分方程的边值问题. 常见的有抛物型方程, 双曲型方程, 椭圆型方程.

如, 二阶线性抛物型方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - a(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2b(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} + c(x, t)u(x, t) = d(x, t) \\ \text{初始条件: } u(x, 0) = f(x), \quad 0 < x < 1 \\ \text{边值条件: } u(0, t) = f_1(t), u(1, t) = f_2(t), t > 0 \end{cases}$$

其中, $a(x, t), b(x, t), c(x, t), d(x, t), f(x), f_1(x), f_2(x)$ 均为给定的函数, 且 $a(x, t) > 0$.

又如拟线性双曲型方程组:

$$\sum_{j=1}^n \left(a_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x} + b_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial y} \right) - d_i = 0, i = 1, 2, \dots, n$$

其中 a_{ij}, b_{ij}, d_i 均为 $x, y, u_1, u_2, \dots, u_n$ 的函数. 如果 a_{ij}, b_{ij}, d_i 中均不含 $u_i, i = 1, 2, \dots, n$, 则称为线性双曲型方程组. 上方程组再附加边界条件, 方可求解.

再如一般二阶椭圆型方程第一边值问题:

$$\begin{cases} a(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + C(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} \\ \quad + d(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} + e(x, y)u = f(x, y) \\ u(x, y)|_{\Gamma} = \varphi(x, y) \end{cases}$$

其中, $a(x, y), b(x, y), c(x, y), d(x, y), e(x, y), f(x, y), \varphi(x, y)$ 均为给定的函数, Γ 为区域的边界线.

上述方程都是经典的方程, 要求精确的理论解, 一般情况下是十分困难的. 有的问题, 解的存在性, 惟一性, 惟多性都很难断定, 更何况近代科学技术中, 抽象出的问题, 比上述问题更为复杂, 自然求理论解, 解的存在性等问题更为困难, 因此只能探索求近似解, 目前惯用的方法是差分法, 有限方法, 边界方法等. 换言之, 采用不同的离散化技术就获得相应的数值求解方法, 可见本书第四章介绍的方法.

2.3 逼近函数的构造法(数值逼近)

在科学试验,新产品性能分析和大规模的科学计算中,可获得大量的离散数据.在一维的情况下可用 $(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, n$ 表示;在多维的情况下可用 $(x^i, y_i), i = 1, 2, \dots, n$,表示,其中 $x^i = (x_1^i, x_2^i, \dots, x_m^i)^T, x_i, y_i, x_j^i$ 均为实数.如何通过这些测试或计算获得的离散数据?获得原物体(产品)的各种性能指标?惯用的方法,是将离散数据解析化,即构造一个或多个函数(可以是多元函数),取代离散数据,此函数常称为逼近函数,通过对逼近函数的各种性能分析获得原物体相应的性能指标.如何构造逼近函数才能达到此目的呢?构造逼近函数的常规方法的难点在于如何根据离散数据的分布特性,选择相应的逼近函数所在的函数类.当逼近函数所在的函数类确定后,如何确定评价逼近程度,逼近优劣,从而获得相应的逼近方法.常用的逼近函数有:多项式,分段低次多项式,三角函数,小波函数等.常用的逼近方法有:插值法,最小二乘逼近法,最优一致逼近法等.常见逼近方法一般可归结为(一维问题)离散型:

$$\min_{a \in E^n} F(a) = \sum_{i=1}^n [(y_i - f(a, x_i)) / \delta_i]^2$$

其中 $a = (a_1, a_2, \dots, a_m), (x_i, y_i)$ 为离散点, δ_i 根据离散点的精确程度,给定常数, $f(a, x) = \sum_{j=1}^m a_j \varphi_j(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$ 为线性无关的基函数, $x \in [\alpha, \beta], x_i \in [\alpha, \beta]$.

上述要探索的问题,都属于离散问题解析化技术,详见第五章.

2.4 数学规划方法

数学规划方法是运筹学的重要分支,常称为优化方法,它渗透到科学技术的每一个领域以及各级政府的管理部门,决策规划部门,甚至到每一个企业,每一个人.这是因为,优化方法的实质,就是用最小的投入取得最大的收获.

优化方法也可分为连续型和离散型:如线性规划,二次规划,几何规划,非线性规划等都属于连续型;又如整数规划,0,1规划,组合优化都属离散型:除此之外,还有不确定型(随机型),如随机规划等.

连续型规划问题,一般可写成如下形式:

$$\min_{x \in X} f(x)$$

其中 $X \subseteq E^n, x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$,当 $X = E^n$ 称无约束优化,当 $X \subset E^n$ 称为约束优化.在一般情况下 X 可表示成如下形式: $X = \{x | h_j(x) = 0, j \in J\}$,或 $X = \{x | g_i(x) \leq 0, i \in I\}$ 或 $X = \{x | h_j(x) = 0, j \in J, g_i(x) \leq 0, i \in I\}$.其中 I, J 为有限指标集.

$f(x)$ 称为目标函数, $h_j(x), g_i(x)$ 称为约束函数, X 称约束区域.

当 $f(x), h_j(x), g_i(x)$ 给不同的函数关系式就对应不同的规划, 如 $f(x), h_j(x), g_i(x)$ 中有一个函数为非线性函数, 常称为非线性规划. 当 $h_j(x), g_i(x)$ 为线性函数, 目标函数是线性函数时称为线性规划. 若目标函数是二次函数时称为二次规划. 优化方法, 就是探索如何求出上述问题的数值近似解, 若 n 较大, $f(x)$ 的非线性程度较高时, 是十分困难的. 本书第六章将介绍各种求解方法.

§ 3 误差的来源及其对算法的影响

采用数值方法求解 § 2 中所提出的数学问题, 获得的解是近似解. 若近似程度满足不了实际问题的需要, 该方法将失效. 因此在建立数学模型, 构造数值求解方法时, 必须注意误差的影响.

3.1 误差的来源

1. 模型误差

用不同的数学语言描述、刻画工程问题时, 对应不同的数学模型, 此模型与原工程问题, 总是有差异的, 这种差异常称为模型误差, 建模的关键问题是如何选择恰当的数学语言去刻画该工程问题, 使其模型误差最小. 若模型误差超出了允许范围, 采用任何方法求解此数学模型都将失去任何实用价值. 要真正定性特别是定量分析模型误差范围是很困难的, 有待于在实际中, 针对不同工程问题去摸索相应的方法.

2. 模型参数误差

在一般情况下, 建模时总有很多假设和难以确定的因素, 这些假设和因素在模型中往往以参数形式出现. 若参数有误差, 必将影响计算结果. 如含参变量的积分:

$\int_0^1 f(x, y, t) dt$, 当参变量 x, y 有误差时, 也会给积分值带来误差.

3. 方法误差(截断误差)

同一数学问题, 采用不同数值方法, 有不同的误差称方法误差. 例如读者熟知的同一积分, 采用矩形公式、梯形公式、抛物线等数值积分公式, 误差明显不一样. 又如

$$\sin x = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!} \approx \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!}$$

取不同的 n , 得到的误差不一样, 其方法误差为 $\left| \sum_{k=n+1}^{\infty} (-1)^k \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!} \right| \leq$

$\frac{|x|^{2k+1}}{(2k+1)!}$, 常称为截断误差.

4. 计算误差(舍入误差)

当算法给定时,要实现算法,就要对数进行四则运算.在计算机中,存放一个数只能是有限位数,在计算过程,必须进行舍入,例如 $10 \div 3 \doteq \overbrace{3.33\cdots 3}^n$,大量的计算必带来舍入误差的积累和传递.

如何建立数学模型,构造相应的数值求解方法,使前述四种误差均能达到最小,是算法构造者和建模者的核心任务.

3.2 误差的种类及求法

1. 误差一般可分为如下两种:

绝对误差

$$\Delta y = \text{精确值减去近似值} \triangleq y - \tilde{y}$$

相对误差

$$\delta y = \frac{\Delta y}{y} \text{ 或 } \frac{\Delta y}{\tilde{y}}$$

当参加运算的数,数量级相差较大时,一般采用相对误差.

2. 函数误差及四则运算误差的求法

设函数 $y = f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$, 当自变量 x_i 有绝对误差 Δx_i 和相对误差 $\delta(x_i)$ 时,如何求函数的绝对误差 Δy 和相对误差 δy ?

由全微分是函数增量的线性主部,易知绝对误差:

$$\begin{aligned} \Delta y &= f(x_1 + \Delta x_1, \cdots, x_i + \Delta x_i, \cdots, x_n + \Delta x_n) - f(x_1, x_2, \cdots, x_n) \\ &\approx dy = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \Delta x_i \end{aligned}$$

由此可知函数在某一点的绝对误差,不仅与该点自变量的绝对误差有关,还依赖于函数在该点对每个变量的偏导数,且当函数对某个变量的偏导数发生巨变时,直接使绝对误差发生巨变.

相对误差:

$$\delta y = \frac{\Delta y}{y} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{y} \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\Delta x_i}{x_i} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{y} \frac{\partial f}{\partial x_i} \delta(x_i)$$

由此可知,函数的相对误差和自变量相对误差的关系,不仅依赖于偏导数,还依赖于每个自变量的值与函数值之比,当自变量不接近零时而函数值接近零,会使函数的相对误差发生巨变.

四则运算的绝对和相对误差,只是上述函数的绝对与相对误差的特殊情况.即在上述公式中取 $y = f(x_1, x_2)$, f 可分别取 x_1, x_2 的和、差、积、商,可得和、差、积、商的误差.

和、差的绝对和相对误差,取 $y = f(x_1, x_2) = x_1 \pm x_2$

$$\Delta y = \frac{\partial f}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} \Delta x_2 = \Delta x_1 \pm \Delta x_2$$

$$\delta y = \frac{\Delta y}{y} = \frac{\Delta x_1 \pm \Delta x_2}{x_1 \pm x_2}$$

由此可得到代数和的绝对误差等于绝对误差的代数和. 从上式可知应尽量避免两个绝对值很接近的同号的两个数相减, 异号的两个数相加, 否则影响和、差的相对误差.

商的绝对和相对误差:

$$f(x_1, x_2) = \frac{x_1}{x_2}$$

取

$$\Delta y = \frac{\partial f}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} \Delta x_2 = \frac{\Delta x_1}{x_2} - \frac{x_1}{x_2^2} \Delta x_2 = \frac{x_2 \Delta x_1 - x_1 \Delta x_2}{x_2^2}$$

$$\delta y = \frac{\Delta y}{x_1/x_2} = \Delta y \cdot \frac{x_2}{x_1} = \frac{x_2 \Delta x_1 - x_1 \Delta x_2}{x_2 x_1} = \delta(x_1) - \delta(x_2)$$

由此可知, 商的相对误差等于分子的相对误差与分母的相对误差之差. 应避免绝对值很小的数作除数, 否则其商的绝对误差发生巨变.

积的误差:

$$f(x_1, x_2) = x_1 x_2$$

取

$$\Delta y = \frac{\partial f}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} \Delta x_2 = x_2 \Delta x_1 + x_1 \Delta x_2$$

$$\delta y = \frac{\Delta y}{x_1 x_2} = \delta(x_1) + \delta(x_2)$$

由此可知, 积的相对误差等于各因子相对误差之和.

3.3 误差对算法的影响

模型误差、方法误差是客观存在的, 在一般情况下, 要作定量分析是很困难的, 因此不在此深究. 当算法确定以后, 在计算机上实现此算法时, 计算误差的传递的快慢和积累的多少, 直接影响算法的优劣. 误差传递慢或不传递且积累少的算法称为稳定算法, 否则称为不稳定的算法. 不稳定的算法得到的数值解, 往往被误差所淹没而失去任何价值. 一般地讨论算法的稳定性也是很困难的, 也不在本书深究, 对于具体算法, 若在应用中发现是不稳定, 可作具体分析. 在此只是告诉读者, 误差对算法是有影响的, 甚至影响很大, 在作四则运算时, 应尽量避免和减少误差的产生, 以保证计算结果的准确性和可靠性.

§4 构造算法的途径

各类数学问题的数值求解方法是无法统计的,难以找到恰当的语言描述,特别是当计算机软件和硬件广泛应用于每一个领域的今天更是如此.但从宏观上分析,各种算法的构造,可按如下四种途径进行.

1. 迭代技术;
2. 离散化技术;
3. 离散问题解析化技术;
4. 优化技术.

每一种途径,一般是针对某一类数学问题提出的,但它们之间又有内在联系,可以相互渗透.例如,迭代技术可用于其他三种技术,优化技术也可用于另外三种技术.下面简介各种技术的基本思想和适用范围.

4.1 迭代技术

迭代技术也称为迭代法,常用于求解线性或非线方程(组)的解,在优化技术中可用于求最优解.迭代法的实质,就是逐步达到最终的目标,且后一步比前一步更加接近目标,只要找到本步和前一步或多步的关系式且本步更加接近目标,该迭代方法就构成了.例如,求方程 $f(x) = 0$, 在 $[a, b]$ 上的实根,可按如下方法构造迭代式.

$\forall x_0 \in [a, b]$, $f(x)$ 在 x_0 的附近用一阶 Taylor 公式取代,即上方程变为

$$f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) = 0$$

从此式解出 x , 记为 x_1

$$x_1 = x_0 - (f'(x_0))^{-1}f(x_0)$$

再将 $f(x)$ 在 x_1 处展开一阶 Taylor 公式可得

$$x_2 = x_1 - (f'(x_1))^{-1}f(x_1)$$

如此继续下去,得到迭代通式

$$x_{n+1} = x_n - (f'(x_n))^{-1}f(x_n), \quad n = 0, 1, \dots$$

可以证明:当 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 有根,且 $f''(x)$ 不变号,只要取初始点 x_0 满足 $f(x_0)f''(x_0) > 0$,由上迭代式产生的数列 $\{x_n\}$ 收敛于原方程的根 x^* ,即 $\lim x_n = x^*$.当 n 足够大时,可取 $x^* \approx x_n$ 为近似解,此方法可以推广到解线性和非线性方程组,详见本书第三章.

4.2 离散化技术

离散化技术常用于求解常微分方程和偏微分方程的数值解.此技术的关键在