工程数值分析

王立秋　魏焕彩　周学圣　编著

山东大学出版社
Shandong University Press

工程数值分析

王立秋　魏焕彩　周学圣　编著

山东大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

工程数值分析/王立秋,魏焕彩,周学圣编著.—济南:山东大学出版社,2002.8

ISBN 7-5607-2489-2

Ⅰ.工... Ⅱ.①王... ②魏... ③周... Ⅲ.计算方法 Ⅳ.O241

中国版本图书馆CIP数据核字(2002)第064445号

山东大学出版社出版发行

(山东省济南市山大南路27号 邮政编码:250100)

山东省新华书店经销

山东东营新华印刷厂印刷

850×1168毫米 1/32 16.625印张 429千字

2002年9月第1版 2002年9月第1次印刷

印数:1—1100册

定价:36.00元

作者简介

王立秋 原籍山东，1962 年生. 于 1982 年、1985 年分别获山东工业大学（现山东大学）学士、硕士学位，1994 年获加拿大 Alberta大学博士学位. 现为香港大学机械工程系副教授. 主要从事微尺度传递现象、多尺度传递现象、非线性传递现象数值计算、传递现象稳定性及分叉等方面的研究工作. 发表论文 100 余篇，出版著作三部.

魏焕彩 原籍福建，1946 年生. 1969 年毕业于厦门大学数学系. 现为山东大学数学与系统科学院教授. 主要从事工程数学方面的教学、研究工作. 发表论文 20 余篇，出版著作三部.

周学圣 原籍浙江，1934 年生. 1958 年毕业于山东大学数学系. 现为山东大学数学与系统科学院教授，香港大学助理研究员. 主要从事偏微分方程和数值分析方面的教学、研究工作. 发表论文 20 余篇，出版著作十四部.

内容简介

本书包括算法与误差、线性代数方程组的解法、方程求根和非线性方程组的解法等十一章内容. 函数逼近、微分方程、代数方程的数值解为本书的主线. 深入浅出，语言朴素，结构严谨，条理清楚，点深面宽，便于自学是本书的特点. 书中既有数值分析的基本内容，也有近期国内外学者关注的热门课题，对工程技术人员和从事数值分析研究的人员很有参考价值. 本书可作为理工科本科生、研究生数值分析的教材. 本书特别注意与基础数学的衔接，有高等数学和线性代数知识的读者即可顺利阅读本书.

前　言

随着科学技术的发展，出现了许多只有运用计算机才能解决的课题．数值分析就是用计算机解决实际问题的理论和数值计算方法．

本书是作者科研实践和教学经验的总结．这使得本书与同类著作相比有以下的特点：

1．既包含通常数值分析的主要内容，也概述了一些近来被国内外专家关注的热门课题及作者所做的研究工作，使基础内容与先进成果结合起来，体现了教材的先进性．

2．既充分注意了知识的广度，又对重要的基本内容作深入的分析，力求做到点深面广，触类旁通．

3．为便于读者自学，既注意到几何直观、语言朴素、化难为易，又重视了全书的系统性、逻辑性和严谨性．本书特别重视从特殊中分析出一般规律，力求做到通过对一般性的论证或认识，灵活地解决各个具体的问题．

4．本书强调了一题多解，从不同的角度分析同一问题，从多个侧面去认识某些理论或方法，并特别注意了与高等数学、线性代数的衔接，使有理工科一般数学知识的读者即可顺利地阅读本书．

作者的研究工作，得到了香港特区科研基金会(RGC)的资助．本书的出版，得到了山东大学出版社、海讯科技公司、东营新华印刷厂领导和职工的大力支持，他们为本书的出版付出了辛勤的劳动．在此，向上述单位的领导和有关同志表示衷心的感谢．

由于篇幅的限制，作者在数值分析方面获得的一些最新研究成果，书中未作详细的叙述，感兴趣的读者可参考书末所列的部分参考文献. 由于作者知识疏浅，难免有不足之处，希望广大读者批评指正.

作者

于香港大学　山东大学

2002.8

目　　录

前　言……………………………………………………（1）
第一章　算法与误差……………………………………………（1）
第一节　数值分析的研究对象与特点………………………（1）
第二节　误差估计与有效数字………………………………（2）
第三节　算法的稳定性………………………………………（9）
第二章　线性代数方程组的解法 ………………………（17）
第一节　Gauss 消去法 ……………………………………（18）
第二节　向量和方阵的范数 ………………………………（38）
第三节　病态方程组　条件数 ……………………………（49）
第四节　Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法 ………（60）
第五节　超松弛迭代法 ……………………………………（73）
第六节　最速下降法与共轭斜量法 ………………………（81）
第三章　方程求根和非线性方程组的解法 ……………（88）
第一节　求根的基本问题及分析方法 ……………………（88）
第二节　迭代法 ……………………………………………（92）
第三节　Newton 迭代法 …………………………………（102）
第四节　非线性方程组的解法……………………………（111）
第四章　插值法…………………………………………（122）
第一节　Lagrange 插值多项式 …………………………（122）
第二节　Newton 插值多项式 ……………………………（130）
第三节　Hermite 插值 ……………………………………（143）

第四节 分段插值和抛物插值……………………………… (150)
第五节 样条插值………………………………………………… (157)
第六节 多元函数的插值方法………………………………… (168)
第五章 函数逼近………………………………………………… (186)
第一节 逼近的概念……………………………………………… (186)
第二节 数据拟合的最小二乘法……………………………… (193)
第三节 几种常用的正交多项式……………………………… (207)
第四节 正交多项式的一般理论……………………………… (216)
第五节 正交多项式的应用…………………………………… (226)
第六章 数值微积分……………………………………………… (241)
第一节 基本公式与一般概念………………………………… (242)
第二节 Newton-Cotes 公式 ……………………………… (249)
第三节 Romberg 算法 ……………………………………… (262)
第四节 Gauss 求积公式 …………………………………… (270)
第五节 重积分的求积公式简介……………………………… (286)
第六节 数值微分………………………………………………… (291)
第七章 常微分方程数值解…………………………………… (311)
第一节 Euler 方法 ………………………………………… (312)
第二节 Runge-Kutta 方法 ………………………………… (324)
第三节 单步法的收敛性与稳定性…………………………… (333)
第四节 线性多步法……………………………………………… (342)
第五节 Milne-Hamming 方法 …………………………… (354)
第六节 方程组和高阶方程的数值解………………………… (359)
第七节 边值问题的数值解法………………………………… (366)
第八节 线性差分方程解的结构 刚性方程……………… (372)
第八章 偏微分方程的差分解法……………………………… (382)
第一节 热传导方程的差分解法……………………………… (382)
第二节 椭圆型方程的差分解法……………………………… (397)

第三节 波动方程的差分解法……………………………… (407)
第九章 变分与偏微分方程的有限元解法…………………… (413)
第一节 泛函与变分问题…………………………………… (413)
第二节 Euler 方程和 Остроградский 方程 ……………… (416)
第三节 变分原理……………………………………………… (424)
第四节 剖分与插值…………………………………………… (431)
第五节 椭圆型方程的有限元法…………………………… (437)
第六节 抛物型和双曲型方程的有限元解法…………… (453)
第七节 常微分方程边值问题的有限元法简介………… (457)
第十章 矩阵特征值问题的数值解法……………………… (468)
第一节 引言…………………………………………………… (468)
第二节 乘幂法及其变形…………………………………… (472)
第三节 Jacobi 算法 ………………………………………… (481)
第四节 *QR* 算法 …………………………………………… (487)
第十一章 解非线性方程组的延拓法……………………… (501)
第一节 解参关系与延拓法………………………………… (501)
第二节 预估方法……………………………………………… (505)
第三节 解枝参量化…………………………………………… (506)
第四节 校正方法……………………………………………… (509)
第五节 试验函数与解枝切换技术简介………………… (509)
第六节 应用实例……………………………………………… (511)
参考文献…………………………………………………………… (517)

第一章　算法与误差

本章介绍计算方法或数值分析中几个最基本的概念、算法与误差.它将在以后的各章中经常被应用.

第一节　数值分析的研究对象与特点

科学技术的发展提出了大量只有用计算机才能解决的问题,数值分析即为用计算机求解实际问题的数值计算方法和理论.数值分析在用计算机解决实际问题中的作用和地位,可从下面的方框图中反映出来.

[实际问题] ⟶ [数学模型] ⟶ [数值计算方法]

⟶ [程序设计] ⟶ [上机计算]

这里指的实际问题,可以来源于生产实际,可以来源于科学技术工程,也可以来源于其他数学分支的理论课题.

至于数学模型,含义更加广泛.例如,函数的求值、代数方程的求解、定积分的求值、微分方程的求解等问题均属于数学模型.对数学模型的求解,有的可用公式表示出来,叫做**解析解**,有的可求出近似解析解,有的只能求出在离散点处的**数值解**.当然,即使数学模型可以用解析解表示出来,如何从公式算出具体数值来,常常仍然离不开数值分析.

所谓计算方法或数值分析,主要是为用计算机解决数学问题

的方法及其理论，是一门内容丰富、研究方向深刻、实用性很强的数学课程. 而算法则是为用计算机解决数学问题而构造的能用数值计算的实施方案. 它的特点有三条：一是必须是构造性的，而像数学上常用的反证法就不是构造性的，因而不能称为算法；二是必须是能通过数值演算的方法，而像图解法就不能称为算法；三是必须是一种实施方案，它要完整地描述整个解题过程，因而不能仅仅单列个数学公式. 纯数学中有些算法理论上很完美，但却不能直接在计算机上计算. 例如，求解 n 元线性方程组，按克莱姆(Gramer)法则，要计算 $n+1$ 个 n 阶行列式，而按行列式的定义计算 n 阶行列式，乘除法次数为 $n!(n-1)$次. 这样，总共需$(n+1)(n-1)n!$次乘除法. 即使只取 $n=20$，乘除法次数接近 10^{21}次之多，就是使用每秒能做千万次乘法的计算机，也要耗凡百万年才能完成. 何况现代科技工程中碰到的线性方程组，常出现含有数万个未知数的情况. 可见，考虑算法的**可行性**是必要的.

构造了可行性的算法，还要进行程序设计，才能在计算机上计算出结果来.

数值分析除了具有高度抽象性和应用的广泛性以外，与纯数学相比，还具有很强的实践性及高度的技术性等特点. 它不像纯数学那样只研究数学本身的理论，而着重研究的是求解的计算方法以及与此有关的理论问题. 即便是理论问题的研究，也离不开在计算机上计算的可行性. 应当注意的是，有的计算方法在理论上不够严格，或还没有得到证明，但通过实际计算、分析对比等手段被实践证明是行之有效的方法，也应当被采用.

第二节　误差估计与有效数字

本节介绍误差的来源、有效数字、算法的稳定性及算法中应注意的问题.

一、误差的来源

如上节所述，为用计算机解决实际问题，首先要将实际问题抽象成一个数学模型. 这种抽象过程，通常要加上一些限制，忽略一些次要因素. 这样，数学模型的解与实际问题的解便有误差，这叫做**模型误差**. 在数学模型确定之后，由于具体问题总含有一些观察数据，而这些数据是由人用测量工具观测得到的，它们不可能绝对准确而是有误差的，这种误差被称为**观测误差**.

以上两种误差往往需要与各有关学科的工作者共同研究，故在数值分析中不讨论这两种误差. 下面讨论数值分析中产生的两种误差，即截断误差和舍入误差.

1. 截断误差　高等数学中有许多运算，如求极限、求导数、求定积分、求级数的和等等，都是无限的运算. 而在计算机上运算时，只能作有限次的运算. 这种无限运算过程的截断而产生的误差叫**截断误差**，也叫**方法误差**. 例如，已知指数函数的泰勒(Taylor)级数为

$$e^x=1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\cdots \quad x\in(-\infty,+\infty)$$

实际计算 $x=x_0$ 点处的函数值 e^{x_0}时，只能取展式的前 $n+1$ 项，即

$$e^{x_0}\approx 1+x_0+\frac{x_0^2}{2!}+\frac{x_0^3}{3!}+\cdots+\frac{x_0^n}{n!}$$

其截断误差即为 Taylor 公式的余项

$$R_n(x_0)=\frac{x_0^{n+1}}{(n+1)!}e^{\theta x_0},\ 0<\theta<1$$

截断误差的大小直接影响数值计算的精度，所以我们在数值计算中必须十分重视.

2. 舍入误差　无理数可表示为无限不循环小数，有些分数可表示为无限循环小数. 在实际计算中只能取有限位，而取有限位的方法不是截断，而是用舍入的方法取近似数. 这便产生**舍入误差**. 如用四舍五入法取 π 的小数点后四位的近似值为 $\pi=3.14159\cdots$

≈ 3.1416,而小数点后取两位则为 $\pi\approx 3.14$.

当参与运算的小数很多时,按四舍六入的取舍方法更好,至于五则有舍有入,使舍入后末位数字为偶数.例如,3.1415,3.1445,3.7885 取小数后三位的近似数为 3.142,3.144,3.788.

虽然每个数据的舍入误差不大,但在计算机上完成大量的运算之后,舍入误差的积累就可能会相当惊人,因此我们必须对算法进行舍入误差分析.

二、有关误差的几个概念

1. 绝对误差　设 x 为精确值,x^* 为其近似值,则称

$$e^*=x-x^* \tag{1}$$

为近似值 x^* 的**绝对误差**.绝对误差是可正可负的,它与误差的绝对值不同.当 $e^*<0$,则称 x^* 为 x 的强近似值;当 $e^*>0$,则称 x^* 为 x 的弱近似值.绝对误差通常简称**误差**.

例如,取 3.14 为圆周率 π 的近似值,则绝对误差为

$$\pi-3.14=0.00159\cdots<0.0016 \tag{2}$$

从(2)式可以看到,虽然误差不可计算,却可以估计出误差界,这便有误差限的概念.

2. 绝对误差限　若 $|e^*|\leqslant\varepsilon^*$,则称 x 的近似数 x^* 的**绝对误差限**为 ε^*,简称**误差限**或**精度**.由 $|e^*|\leqslant\varepsilon^*$ 及(1)可得

$$x^*-\varepsilon^*\leqslant x\leqslant x^*+\varepsilon^* \tag{3}$$

这表明通过似近数和误差限可估计出精确数所在的范围.

在生产和应用中,误差限常作为一种精度要求.例如,要生产长度为 765 cm 的工件,误差不允许超过 0.5 cm.这就要求工件的长度 x 满足

$$|x-765|\leqslant 0.5 \quad 或 \quad 764.5\leqslant x\leqslant 765.5$$

对产品长度的要求可记作 $x=765\pm 0.5$.同样,(3)式也可记作 $x=x^*\pm\varepsilon^*$.

又如,真空中光速 c 的近似值为

$$c^* = 2.997925 \times 10^{10}\ \text{cm/s}$$

误差限 $\varepsilon^* = 0.000001 \times 10^{10}$cm/s，因而光速

$$c = (12.997925 \pm 0.000001) \times 10^{10}\text{cm/s}$$

应该指出，误差限的大小还不能反映出近似值的好坏. 例如，测量 100cm 长的工件发生的误差不超过 0.1cm，与测量 1cm 的工件发生的误差不超过 0.1cm. 绝对误差限同样为 0.1，但前者显然要好得多. 为要反映出近似值的好坏，下面引入相对误差的有关概念.

3. 相对误差与相对误差限　设 x 为精确值，x^* 为其近似值，则称绝对误差 $e^* = x - x^*$ 与精确值 x 之比值

$$e_r^* = \frac{e^*}{x} = \frac{x - x^*}{x} \tag{4}$$

为近似数 x^* 的**相对误差**. 当 $|e^*/x| \leqslant \varepsilon_r^*$，则称 ε_r^* 为近似数的**相对误差限**. 由于在应用中，精确值 x 是不知道的，故常把相对误差和相对误差限理解为

$$e_r^* = \frac{e^*}{x^*},\quad \left|\frac{e^*}{x^*}\right| \leqslant \varepsilon_r^*$$

由于 $y^2/(1+y) = o(y)\ (y \to 0)$，又 e^*/x^* 一般为非常小的数. 从而，当 e^*/x^* 无限接近零时，有

$$\frac{e^*}{x^*} - \frac{e^*}{x} = \frac{e^*(x - x^*)}{x^* x} = \frac{(e^*)^2}{x^*(x^* + e^*)} = \frac{(e^*/x^*)^2}{1 + e^*/x^*} = o(e^*/x^*)$$

这表明：当 $|e^*/x^*|$ 很小时，用 e^*/x^* 代替 e^*/x 是合理的.

显然，相对误差限与绝对误差限的关系为 $\varepsilon_r^* = \varepsilon^*/|x^*|$. 在应用问题中绝对误差限是有量纲的，相对误差限是无量纲的.

三、有效数字

用四舍五入的方法讨论 $x = \pi = 3.14159265\cdots$ 的近似值，并记误差限为 ε^*，则取三位和五位的结果为

取三位　$x_3^* = 3.14$，$\varepsilon_3^* < 0.002 < \frac{1}{2} \times 10^{-2}$

取五位 $x_5^*=3.1416$，$\varepsilon_5^*<0.000008<\frac{1}{2}\times10^{-4}$

它们的误差限均不超过末位数字的半个单位，即

$$|\pi-3.14|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-2},|\pi-3.1416|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4}$$

这叫做把 3.14 取为 π 的近似值有 3 位有效数字，把 3.1416 取为 π 的近似值有 5 位有效数字.

一般地，如果 x 的近似值 x^* 的误差限是某一位的半个单位，该位到 x^* 的左面第一位非零数字一共有 n 位，则叫 x^* 有 n **位有效数字**或者说 x^* 精确到该位. 也就是说，如果近似数 x^* 满足

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-k},\ k=1,2,\cdots$$

则用 x^* 近似表示 x 时，精确到小数之后的第 k 位. 从这个数字起直到最左面的第一位非零数字之间的一切数字都是有效数字.

由此可知：用四舍五入法取精确值的前 n 位 x^*（不含左面的零）作为近似值，则 x^* 有 n 位有效数字.

注 1 设数 x 的近似数 x^* 可表示成标准形式

$$x^*=\pm10^k\times0.a_1a_2\cdots a_n \tag{5}$$

其中 $a_1\neq0$，a_i 为整数且 $0\leqslant a_i\leqslant9$，$(i=1,2,\cdots,n)$，k 为整数，n 为自然数. 若有

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{k-n}$$

则近似值 x^* 有 n 位有效数字.

注 2 按截断的方法取近似数，不能保证末位数字是有效数字. 例如，对 π 按截断法取近似数 3.141，末位数字 1 不是有效数字. 因为不等式

$$|\pi-3.141|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}$$

不成立.

注 3 在按有效数字取近似值时，小数点后末位的 0 不可随

便去掉.例如,3 位有效数字的 0.200 写成 0.2 只有一位有效数字.按有效数字可以把有些统计数字采用科学的记法.我国 1973 年有 7 亿人口,应表示成 700×10^6,有三位有效数字,表示差数不会超过 50 万.如果记成 700 000 000,则表示正好有 7 亿,无一人之差,这是不可能的.

四、误差估计

在测量中,常常要通过测某量 x 的值去确定量 y 的值,这就是给出自变量 x 的值求函数值 $y=f(x)$的问题.如果被测的量近似值记为 x,误差记为 Δx,那么函数值的近似值 $y=f(x)$的误差便是函数的增量 Δy.由于$|\Delta x|$通常是很小的,故可用微分 $\mathrm{d}y=f'(x)\Delta x$ 代替增量 Δy.不妨约定记为 $\Delta y=\mathrm{d}y$.对于二元函数 $z=f(x,y)$,则约定

$$\Delta z=\frac{\partial f}{\partial x}\Delta x+\frac{\partial f}{\partial y}\Delta y$$

若已知$|\Delta x|\leqslant\delta x$,$|\Delta y|\leqslant\delta y$,则可估计 y 和 z 的误差限

$$|\Delta y|\leqslant|f'(x)|\delta x \tag{6}$$

$$|\Delta z|\leqslant\left|\frac{\partial f}{\partial x}\right|\delta x+\left|\frac{\partial f}{\partial y}\right|\delta y \tag{7}$$

同样可考虑三元或更多元函数的情况.

例　有一个圆,测得半径 $r=21.5$ cm,要求误差限为 $\delta_r=0.1$ cm.试估计圆面积的误差限和相对误差限.

解　圆面积 $S=\pi r^2$,$\mathrm{d}S=2\pi r\mathrm{d}r$,故

$$|\Delta S|\leqslant 2\pi r\delta_r=2\pi\times21.5\times0.1=4.3\pi\ (\mathrm{cm}^2)$$

$$\frac{|\Delta S|}{S}\leqslant\frac{2\pi r\delta_r}{\pi r^2}=\frac{2\delta_r}{21.5}=0.93\%$$

即绝对误差限为 4.3π cm²,相对误差限为 0.93%.

下面介绍和差积商的误差估计.

1. 和差的误差估计　设测得 n 个数 $x_1,x_2,\cdots,x_n$,其中 x_i 有