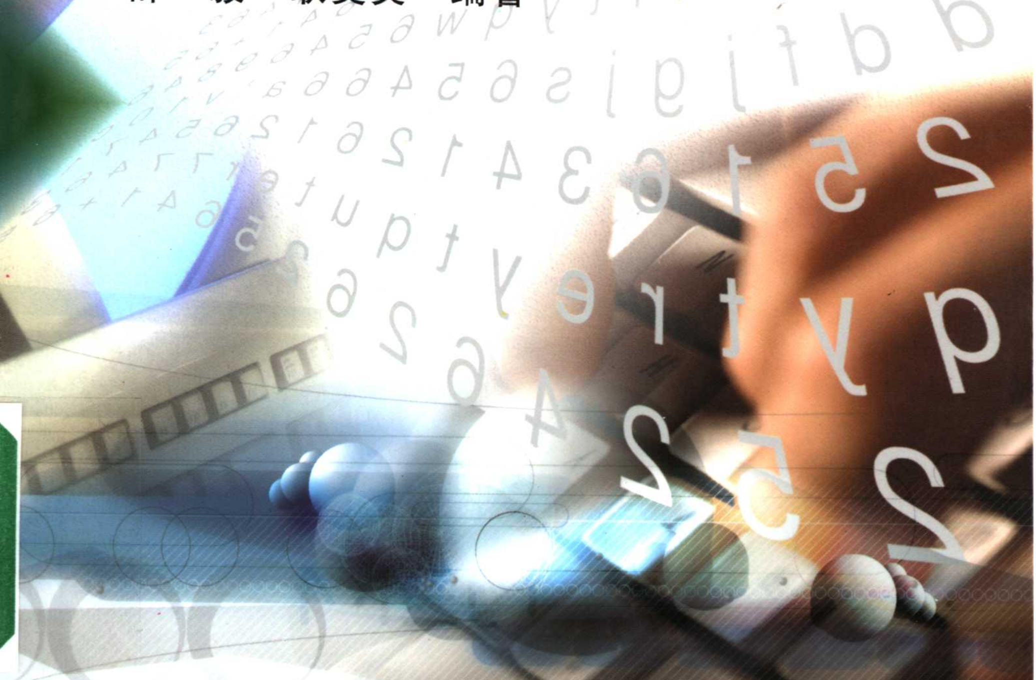
数值分析

SHUZHIFENXI

薛 毅 耿美英 编著



北京工业大学出版社

数 值 分 析

薛　毅　耿美英　编著

北京工业大学出版社

图书在版编目（CIP）数据

数值分析/薛毅，耿美英编著.—北京：北京工业大学出版社，2003.8

ISBN 7-5639-0630-4

Ⅰ.数… Ⅱ.①薛… ②耿… Ⅲ.数值计算-高等学校-教材 Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2003）第 059158 号

数 值 分 析

薛 毅 耿美英 编著

※

北京工业大学出版社出版发行

各地新华书店总经销

徐水宏远印刷厂印刷

※

2003 年 8 月第 1 版 2003 年 8 月第 1 次印刷

850mm × 1168mm 32 开本 10 印张 291 千字

印数：1～2000 册

ISBN 7-5639-0630-4/O·30

定价：15.00 元

内容提要

本书着重介绍与现代计算有关的数值分析的基本方法，强调基本概念、理论和应用，特别是数值方法在计算机上的实现。其内容包括绪论、解非线性方法的数值方法、线性方程组的数值解法、解线性代数方程组的迭代法、插值方法、函数逼近、数值积分和常微分方程的数值解共八章。

本书叙述由浅入深，尽量用几何直观、图像以及各种例子阐明概念和方法的实质，易于阅读。用大量的例题与习题帮助学生理解与掌握数值分析的基本方法，并注重对有关理论与算法的推导，提高学生分析问题和解决问题的能力。

本书可作为工科研究生和本科生“数值分析”或“计算方法”课程的教材或教学参考书，也可作为在职申请硕士学位综合考试的辅导教材，并可供科技工作者和工程技术人员学习和参考。

前　　言

随着计算机与计算数学的发展以及它们在各个学科中的应用，数值分析课程已经成为高等学校理工科的一门重要课程。它是一门理论性很强，同时又是应用性很广的课程。在学习过程中，既要重视理论的严谨，又要重视方法的应用。为达到上述目的我们编写了这本教材。它是在我们编写的前一本教材的基础上，总结多年的教学经验，特别是针对近几年来教学内容需求变化的需要改写而成的。

本教材有以下几个特点：

(1) 结构更加合理。我们根据工科研究生数值分析教学大纲，重新编排教学内容。它们是第一章，绪论；第二章，解非线性方程的数值方法；第三章，线性方程组的数值解法；第四章，解线性代数方程组的迭代法；第五章，插值方法；第六章，函数逼近；第七章，数值积分；第八章，常微分方程的数值解。

(2) 注重几何直观，提高学生分析问题和解决问题的能力。本书的目的在于直观、生动地向学生介绍数值分析的基本理论、算法以及相关的内容，尽量减少繁琐的推导。在学生弄懂算法的基础上，加强对算法的理解与应用方面的训练，并力图提高学生运用所学知识解决实际问题的能力。由于计算机的普及和各种数学软件的出现，过去繁琐的计算可以被简化，对算法的理解就显得更重要了。让学生了解，为什么同样的程序，对于不同的问题有时会有不同的结果，有的成功，有的失败。对于这些失败的问题，应如何处理等。

(3) 加强动手能力。由于计算机和数值计算软件的发展，学

生不必被复杂的程序所困惑，可以借助数学软件完成各种复杂的算法，去体会和理解算法的本质。通过计算的成功与失败，来研究各种算法的优缺点。为了便于学生进行编程训练，我们将书中的各种算法都给出形式语言，学生可根据这些形式语言进行编程，巩固所学的知识。

(4) 配有大量的例题与习题。例题的演算与做好习题是学好数值分析的重要手段之一。我们根据多年的教学经验，在各章中配有大量的例题与习题，其主要目的是加深学生对数值方法的了解与理解，通过习题来巩固所学知识。这些例题与习题也可以给参加各类考试（如博士研究生入学考试，在职研究生综合考试）提供帮助。

本书的先修课程是数学分析（或高等数学）和线性代数，完成本书的全部教学内容大约需要 60 学时，教师可根据教学大纲的要求和各专业的实际情况，对教材的内容进行适当的删减。如果有条件的话，教师可以让学生根据书中的算法，让学生完成一定量的计算机实习。

本书可作为工科研究生和本科生学习“数值分析”或“计算方法”课程的教材或教学参考书，也可作为在职申请硕士学位综合考试的辅导教材，并可供科技工作者和工程技术人员学习参考。

由于受编者水平限制，可能在内容的取材、结构的编排以及课程的讲法上存在着不妥之处，我们希望使用本书的教师、学生以及同行专家和其他读者提出宝贵的批评和建议。

在本书出版之际，我们谨向对本书提供过帮助的各位老师和专家，以及给予我们大力支持的北工大出版基金委员会和北工大出版社表示衷心的感谢。

编　者

2003.7 于北工大

目　　录

第一章　绪论 …………………………………………………… (1)
1.1　数值分析研究的对象与内容 ……………………………… (1)
1.2　误差的来源与误差的基本概念 …………………………… (3)
1.2.1　误差的来源 ……………………………………………… (3)
1.2.2　绝对误差与绝对误差限 ………………………………… (4)
1.2.3　相对误差与相对误差限 ………………………………… (5)
1.2.4　有效数字 ………………………………………………… (6)
1.3　数值计算中需要注意的问题 ……………………………… (9)
1.3.1　避免两个相近的数相减 ………………………………… (9)
1.3.2　防止大数“吃掉”小数 ………………………………… (10)
1.3.3　注意简化计算步骤，减少运算次数 …………………… (12)
习题一 ……………………………………………………………… (13)
第二章　解非线性方程的数值方法 …………………………… (15)
2.1　二分法 ……………………………………………………… (16)
2.1.1　基本概念和定理 ………………………………………… (16)
2.1.2　算法的基本思想 ………………………………………… (19)
2.1.3　误差估计与收敛性分析 ………………………………… (20)
2.1.4　算法 ……………………………………………………… (21)
2.1.5　算法的优缺点 …………………………………………… (22)
2.2　迭代法 ……………………………………………………… (23)
2.2.1　算法的基本思想 ………………………………………… (23)
2.2.2　迭代法的几何解释 ……………………………………… (25)
2.2.3　收敛定理 ………………………………………………… (26)

2.2.4 误差估计 …………………………………………………… (28)
2.2.5 算法 ………………………………………………………… (29)
2.2.6 局部收敛定理 ……………………………………………… (30)
2.2.7 迭代收敛的阶 ……………………………………………… (32)
2.2.8 迭代加速 …………………………………………………… (34)
2.3 Newton 法 ……………………………………………………… (38)
2.3.1 算法介绍 …………………………………………………… (38)
2.3.2 Newton 法的几何意义 ……………………………………… (39)
2.3.3 算法 ………………………………………………………… (39)
2.3.4 Newton 法的收敛速率 ……………………………………… (40)
2.3.5 重根情况 …………………………………………………… (42)
2.3.6 Newton 下山法 ……………………………………………… (44)
习题二 ……………………………………………………………… (45)
第三章 线性方程组的数值解法 ………………………………… (49)
3.1 消去法 …………………………………………………………… (50)
3.1.1 顺序 Gauss 消去法 ………………………………………… (50)
3.1.2 列主元 Gauss 消去法 ……………………………………… (57)
3.1.3 Gauss-Jordan 消去法 ……………………………………… (62)
3.2 矩阵分解方法 …………………………………………………… (68)
3.2.1 LU 分解法 …………………………………………………… (68)
3.2.2 解三对角方程组的追赶法 ………………………………… (76)
3.3 对称正定矩阵的 Cholesky 分解 ……………………………… (80)
3.3.1 正定矩阵及其性质 ………………………………………… (80)
3.3.2 平方根法 …………………………………………………… (81)
3.3.3 改进平方根法 ……………………………………………… (84)
3.4 向量与矩阵的范数 ……………………………………………… (87)
3.4.1 向量的范数 ………………………………………………… (87)
3.4.2 矩阵的范数 ………………………………………………… (90)

3.5 方程组的性态，病态方程组的求解 …………………… (96)
3.5.1 关于方程组解的精度 ……………………………… (96)
3.5.2 矩阵的条件数 ……………………………… (96)
3.5.3 方程组的性态 ……………………………… (97)
3.5.4 病态方程组的求解 ……………………………… (102)
习题三 ……………………………… (103)
第四章 解线性代数方程组的迭代法 ……………………………… (108)
4.1 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法 ……………………… (108)
4.1.1 Jacobi 迭代法 ……………………………… (108)
4.1.2 Gauss-Seidel 迭代法 ……………………………… (112)
4.2 迭代法的收敛性 ……………………………… (115)
4.2.1 迭代收敛定理 ……………………………… (115)
4.2.2 迭代收敛速度 ……………………………… (121)
4.2.3 对角占优阵 ……………………………… (124)
4.3 超松驰（SOR）迭代法 ……………………………… (129)
4.3.1 超松驰迭代法 ……………………………… (129)
4.3.2 SOR 迭代法的收敛性 ……………………………… (132)
习题四 ……………………………… (134)
第五章 插值方法 ……………………………… (137)
5.1 Lagrange 插值 ……………………………… (137)
5.1.1 Lagrange 插值多项式 ……………………………… (137)
5.1.2 Lagrange 插值公式的计算 ……………………………… (140)
5.1.3 插值余项 ……………………………… (145)
5.2 Newton 插值 ……………………………… (150)
5.2.1 均差 ……………………………… (150)
5.2.2 Newton 基本插值公式 ……………………………… (154)
5.2.3 差分 ……………………………… (157)
5.2.4 等距节点的 Newton 插值公式 ……………………………… (161)

5.3 Hermite 插值 …………………………………… (165)
5.3.1 二点二次插值公式 …………………………… (165)
5.3.2 二点三次 Hermite 插值公式 ……………………… (169)
5.3.3 Hermite 插值公式 …………………………… (173)
5.3.4 Newton 形式的 Hermite 插值公式 ………………… (174)
5.4 分段低次插值 …………………………………… (178)
5.4.1 高次插值多项式的问题 ………………………… (178)
5.4.2 分段线性插值 ……………………………… (179)
5.4.3 分段三次 Hermite 插值 ………………………… (181)
5.5 三次样条插值 …………………………………… (184)
5.5.1 三次样条插值函数 …………………………… (184)
5.5.2 三次样条插值函数的求法 ……………………… (186)
5.5.3 三次样条插值的收敛性 ………………………… (199)
习题五 ………………………………………………… (200)
第六章 函数逼近 ……………………………………… (205)
6.1 正交多项式 ……………………………………… (205)
6.1.1 正交函数系的概念 …………………………… (205)
6.1.2 常用的正交多项式 …………………………… (207)
6.1.3 正交多项式的构造 …………………………… (211)
6.2 函数的最佳平方逼近 ……………………………… (213)
6.2.1 最佳平方逼近的概念及计算 …………………… (213)
6.2.2 用正交函数做最佳平方逼近 …………………… (217)
6.3 最小二乘法 ……………………………………… (219)
6.3.1 基本概念 …………………………………… (220)
6.3.2 用代数多项式作拟合函数 ……………………… (223)
6.3.3 用正交函数做最小二乘 ………………………… (228)
习题六 ………………………………………………… (232)
第七章 数值积分 ……………………………………… (234)

7.1 Newton-Cotes 求积公式 …………………………………… (234)
7.1.1 数值求积公式的构造和它的代数精确度……………… (234)
7.1.2 梯形求积公式 ……………………………………… (237)
7.1.3 Simpson 求积公式 ………………………………… (240)
7.1.4 Cotes 求积公式 …………………………………… (242)
7.1.5 Newton-Cotes 求积公式 …………………………… (243)
7.1.6 计算稳定性问题 …………………………………… (246)
7.2 复化求积公式……………………………………………… (247)
7.2.1 复化梯形公式 ……………………………………… (248)
7.2.2 复化 Simpson 公式 ………………………………… (249)
7.2.3 复化 Cotes 公式…………………………………… (250)
7.3 Romberg 求积法 ………………………………………… (254)
7.3.1 变步长的梯形公式 ………………………………… (254)
7.3.2 Romberg（龙贝格）求积公式 ……………………… (256)
7.3.3 Romberg 求积法…………………………………… (257)
7.3.4 Richardson（理查森）外推加速法 ………………… (260)
7.4 Gauss 求积公式 ………………………………………… (263)
7.4.1 Gauss 点 …………………………………………… (264)
7.4.2 Gauss-Legendre 公式 ……………………………… (266)
7.4.3 Gauss-Legendre 公式的使用………………………… (268)
7.4.4 Gauss 型求积公式的余项及稳定性 ………………… (270)
7.4.5 带权的 Gauss 公式………………………………… (271)
习题七 ……………………………………………………… (273)
第八章 常微分方程的数值解 ……………………………… (275)
8.1 Euler 方法 ……………………………………………… (275)
8.1.1 Euler 方法………………………………………… (275)
8.1.2 梯形公式和改进 Euler 方法 ……………………… (282)
8.2 Runge-Kutta 方法……………………………………… (287)

8.2.1 Runge-Kutta（龙格-库塔）方法的基本思想 …………… (287)
8.2.2 二阶 Runge-Kutta 法 ………………………………… (288)
8.2.3 四阶 Runge-Kutta 法 ………………………………… (290)
8.2.4 变步长的 Runge-Kutta 法 ……………………………… (292)
8.3 单步法的收敛性和稳定性………………………………… (293)
8.3.1 单步法的收敛性 ……………………………………… (293)
8.3.2 单步法的稳定性 ……………………………………… (296)
8.4 线性多步法……………………………………………… (300)
8.4.1 线性多步法的一般公式………………………………… (300)
8.4.2 Adams 外推公式 ……………………………………… (303)
8.4.3 Adams 内插公式 ……………………………………… (305)
8.4.4 预报—校正公式 ……………………………………… (306)
习题八……………………………………………………… (307)

第一章 绪 论

1.1 数值分析研究的对象与内容

数值分析也称为计算方法，是研究各种数学问题数值方法的设计、分析、有关的数学理论和具体实现的一门学科，它属于计算数学的范畴，是数学学科的一个重要分支.由于近几十年来计算机的迅速发展，数值计算的应用已经普遍深入到各个科学技术领域，很多复杂的、大规模的计算问题已成功地在计算机上得到了解决，而且新的、有效的数值方法也不断地出现，因此数值计算方法已成为自然科学与工程技术的重要手段，是科学研究与实验不可缺少的环节.

数值分析并不是各种数学方法的简单罗列和堆积，而是一门内容丰富、研究方法深刻、又有自身理论体系的课程.它除了具有数学的抽象与严谨这些理论性强的特点外，还有应用广泛、与实际联系密切等应用性强的特点，是一门既有理论，又有应用并且与计算机密切结合的课程.

本书着重讲授以下一些内容.

1. 非线性方程的数值方法

该部分内容主要是处理如何用数值方法求解非线性方程的根。例如：对于一元二次方程，可以很容易地得到方程解的解析表达式，而对于一般的代数方程

$$a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_{n-1}x + a_n = 0$$

当 $n>4$ 后，欲求解析解几乎是不可能的.对于超越方程，如

$$\cos x = x, e^{-x} - \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right) = 0$$

只能给出数值解法.

2. 线性代数问题的数值方法

该部分内容主要考虑线性方程组的数值解法,注意它与“线性代数”中处理线性方程组的方法的不同,在“线性代数”中主要考虑线性方程组解的存在性与唯一性及相应的有关理论与精确解法.用这些方法无法在计算机上解上百个未知数的方程组,更不用说求解十几万个未知数的方程组了.而数值分析则着重介绍适合计算机特点的、满足一定精度要求的、有效的算法和相关的理论.它包括算法的误差分析、迭代方法的收敛性及收敛速度等问题.

3. 数值逼近

这部分内容包括插值方法和函数逼近.它们是从不同角度用已知点处的函数值,来计算未知点处的函数值的.这类问题在工程实践中经常碰到.

4. 数值积分

Newton-Leibniz(牛顿-莱布尼兹)公式是“高等数学”介绍求解定积分的有效方法,但并不是所有的定积分都可以用它计算出来.这部分内容是介绍求定积分的数值方法,讨论计算积分的误差限和计算的稳定性等内容.

5. 微分方程的数值解法

学过“高等数学”的人都知道,求出任一微分方程的解析解是非常困难的,有时几乎是不可能的.而这部分内容则是介绍求该类问题的数值解法.

以上这些是数值分析最基础的内容,在学习过程中,即要注重它的理论性,又要重视它的应用性.这样才能掌握好这门课的内容.

1.2 误差的来源与误差的基本概念

1.2.1 误差的来源

一个物理量的真实值与计算出的值往往不相等,称其差为误差.引起误差的原因是多方面的.为了具体说明误差的来源,先考察一下解决实际问题的过程:

$\boxed{\text{实际问题}} \to \boxed{\text{数学模型}} \to \boxed{\text{数值方法}} \to \boxed{\text{程序设计}} \to \boxed{\text{计算结果}}$

从而可以看出,实际问题与计算结果存在着以下几种误差.

1. 模型误差

数学模型是从实际问题经抽象和简化,并忽略一些次要因素得到的.例如用

$$s = \frac{1}{2}gt^2 \tag{1.2.1}$$

(其中 g 是重力加速度)描述地球上某一质点自由落体运动规律.这里忽略了空气阻力等一些次要因素,因此将数学模型与实际问题之间出现的误差称为模型误差.

若用 $s = f(t)$ 表示自由落体的真实运动规律,那么 $f(t) - \frac{1}{2}gt^2$ 为数学模型(1.2.1)的模型误差.

2. 参数误差

在给出的数学模型中往往涉及一些根据观测得到的物理量,如电压、电流、温度、长度等,而观测难免不带来误差,观测值与真实值之间的误差称为参数误差或观测误差.

例如,在式(1.2.1)中取重力加速度为 $g \approx 9.8$ 米/秒^2,则 $g - 9.8$ 就是参数误差.

3. 截断误差

在计算中常常遇到只有通过无限过程才能得到的结果,但实际计算时,只能用有限过程来计算. 这种用有限过程代替无限过程的误差称为截断误差.而这种误差是由计算方法本身引起的,因此也称为方法误差.

例如,考虑用 Taylor 级数求定积分 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$ 的近似值.由 $\sin x$ 的 Taylor 展开式得

$$\frac{\sin x}{x} = \frac{1}{x}\left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots\right)$$

若从第二项后“截断”,则有

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \approx \int_0^1 \frac{1}{x}\left(x - \frac{x^3}{3!}\right) dx = \int_0^1 \left(1 - \frac{x^2}{6}\right) dx$$

$$= 1 - \frac{1}{18} = \frac{7}{18}$$

这时 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx - \frac{17}{18}$ 为截断误差.

4. 舍入误差

在计算中遇到的数据可能位数很多,也可能是无穷小数,如 $\sqrt{2}, \frac{1}{3}$ 等,但计算时只能对有限位数进行计算,因此往往进行四舍五入,这样产生的误差称为舍入误差.

少量的舍入误差是微不足道的,但在电子计算机上完成了千百万次运算之后,舍入误差的累积有时可能是十分惊人的.

在上述讨论的误差来源中,前两种误差是客观存在的,后两种误差是由计算方法所引起的.本课程是研究数学问题的数值方法,因此只涉及后两种误差.

1.2.2 绝对误差与绝对误差限

定义 1.2.1 设 x 是准确值,x^* 是它的一个近似值,则称 $x -$

x^*为x^*的绝对误差,简称误差,记作e^*,即

$$e^* = x - x^*$$

例如,用1.414近似$\sqrt{2}$,其绝对误差为:

$$\sqrt{2} - 1.414 = 1.414\ 213\cdots - 1.414 = 0.000\ 213\cdots$$

通常我们无法知道准确值x,因而也不可能知道误差e^*的准确值,但可以很容易得到e^*的取值范围.例如用1.414作为$\sqrt{2}$的近似值,其绝对误差不会超过0.000 3,因此可以给出绝对误差的上限.

定义1.2.2 设x为准确值,x^*是它的一个近似值,称x^*的绝对误差的绝对值的上限ε^*为x^*的绝对误差限,简称误差限,即

$$|e^*| = |x - x^*| \leqslant \varepsilon^*$$

显然,如果ε^*是x的近似值x^*的绝对误差限,那么x仅位于区间$[x^* - \varepsilon^*, x^* + \varepsilon^*]$之间.在工程技术上常用

$$x = x^* \pm \varepsilon^*$$

表示.例如用毫米刻度的直尺测量某一长度为x的物体,测量其长度的近似值为$x^* = 52$mm,由于直尺以毫米为刻度,其误差不超过0.5mm,即$x = (52 \pm 0.5)$mm.

1.2.3 相对误差与相对误差限

在许多情形下,绝对误差限并不能完全刻画一个数的近似精确程度.例如,比较$x = 10 \pm 1$和$y = 10\ 000 \pm 10$两种情形.从绝对误差限来看,y^*的绝对误差限是x^*的绝对误差限的十倍;但从实际情况来看,y^*的精确程度要高于x^*的精确程度.因此,一个近似值的精确程度不仅与绝对误差限有关,而且还与其本身的大小有关.由此给出以下定义.

定义1.2.3 设x为准确值,x^*是它的一个近似值,称比值