

学出版社

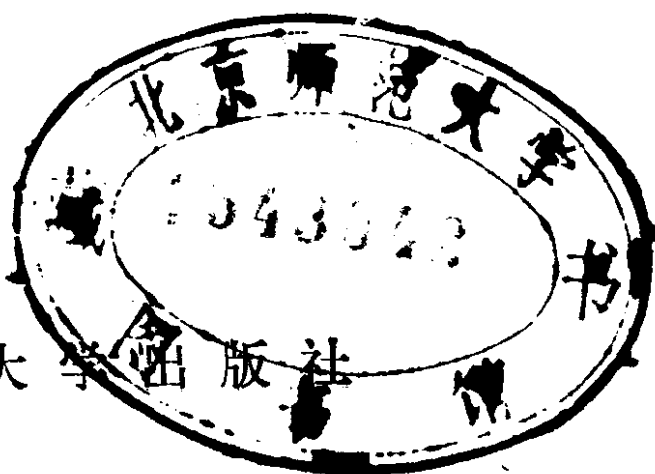
陈景良

数值 计算 方法

数值计算方法

关 治 陈景良

343042



清华大学出版社

内 容 提 要

本书为大学教科书，系统介绍了数值计算的基本方法、概念及有关的理论分析和应用。全书共分8章，主要内容包括数值计算的基本问题，函数的插值与逼近，数值积分方法，常微分方程的数值方法，线性代数方程组和矩阵特征值问题的数值解法，以及非线性方程的数值解法等。书中基本概念叙述清晰，理论分析严谨，语言通俗易懂，并注重如何在计算机上实现数值计算，各章列有典型算法和一定数量的习题。亦可供工程技术人员参考。

数 值 计 算 方 法

关 治 陈景良

☆

清华大学出版社出版

北京 清华园

中国科学院印刷厂印刷

新华书店总店科技发行所发行

☆

开本：850×1168 1/32 印张：17 5/8 字数：452千字

1990年8月第1版 1990年8月第1次印刷

印数：0001—6 000

ISBN 7-302-00626-1/O·98

定价：3.50 元

前 言

随着本世纪四十年代以来电子计算机的出现和迅速发展,在各门自然科学和工程、技术科学的发展中,“科学与工程计算”已经成为平行于理论分析和科学实验的第三种科学手段。现在,不管是在高科技领域还是在一些传统的学科领域,数值计算都是一个不可少的环节。对广大工程与科技人员来说,数值计算方法逐渐成为应当掌握的知识和工具。在高等理工科学学校中,《数值分析》(或《计算方法》)是日益普遍开设的一门课程。这就是本书编写的背景。

本书内容包括数值计算的基本方法、概念及有关的理论分析和应用。它的主要目的和特点如下:

第一,为理工科各专业的大学生和研究生提供一本比较适用的教科书。与本书相应的课程是一门应用性较强的数学基础课。书中十分注重基本概念叙述的清晰性,理论分析的严谨性和启发性,数学语言(符号和术语)的现代性,而且使读者易于掌握方法,便于应用。为了能够适应不同的教学要求,各章均包含由浅入深的内容,大部分内容是基本的,也有一些内容比较深入。这样既便于根据教学需要进行取舍,也能为读者进一步提高奠定基础。

第二,除了作为大学的教科书外,本书还适合在职的工程、科技人员进修,自学和参考。阅读本书只要具备一般理工科大学的微积分、线性代数和常微分方程的基础。为了方便读者,特别是离开大学课堂有一定时间的读者,我们在第一章和第五章对微积分和线性代数的一些基础知识作了归纳和补充,它们是为其它各章服务的。

第三,本书介绍的数值方法大多是基础性和应用较广的,包括古典的和近年流行的方法。涉及数值计算基本问题、函数的插值和逼近、数值积分、常微分方程初值问题的数值方法、线性代数方程组和矩阵特征值问题的数值解法、非线性方程的数值解法等。由于篇幅所限,一些比较复杂的数学证明没有给出。有些当今行之有效但需要用到较多其它数学工具的方法也从略了。另外,有些问题(如常微分方程边值问题和偏微分方程)的数值解法未列入本书范围。我们希望通过对一些基本问题的讨论,使读者掌握数值计算方法的基本概念和基本分析方法。这样就有了掌握更复杂和更现代计算方法的基础。

第四,注重如何在计算机上实现数值计算及有关的练习。在第一章描述了计算机能够处理的算法,计算运算的舍入误差及算法的数值稳定性。后面各章的叙述中列出一些典型的算法,它们不是针对某种计算机语言写的,也没有严格的书写规则,目的是方便读者对某计算方法计算过程的了解和编制计算机程序。本书各章都有一定数量的习题,包括对方法分析的题目,以及具体作数值计算的题目,读者可以利用计算器来完成。我们认为这两方面的练习对于学习本书内容都是有益的。

本书是根据我们在清华大学多年的教学经验编写的。其中第一、二、五章和第六章的前五节由陈景良执笔编写,其余部分由关治执笔编写。在本书酝酿过程中,顾丽珍、施妙根老师和我们一起进行了讨论,提出了很好的意见,对于他们和清华大学应用数学系其它老师以及清华大学出版社有关同志对本书的关心和帮助,我们深表感谢。我们更希望广大读者和有关专家对本书提出宝贵的意见,指出其错误和缺点,以便进一步改进。

关 治 陈景良

1989年5月于清华园

目 录

第一章 引论	1
§ 1 数值计算方法的内容与意义	1
1.1 计算机与算法	1
1.2 本书的内容和线索	3
1.3 意义与学习方法	5
§ 2 微积分若干知识的回顾	6
2.1 一些基本概念与记号	6
2.2 若干基本定理	10
§ 3 误差	13
3.1 例子与几种误差	13
3.2 基本概念	16
3.3 算术运算和函数求值的误差界	22
3.4 关于误差分析的方法	27
§ 4 稳定性与收敛性	30
4.1 浮点机器数系及运算的舍入误差	30
4.2 算法的数值稳定性	37
4.3 收敛性与收敛速度	46
§ 5 赋范线性空间与内积空间	50
5.1 线性空间	50
5.2 范数与赋范线性空间	53
5.3 内积与内积空间	56
5.4 正交序列与正交多项式	60
习题	67
 第二章 函数的插值与逼近	 73

§ 1 问题的提法	73
1.1 函数插值与逼近的一般问题	73
1.2 代数插值	76
1.3 曲线拟合	78
1.4 最佳逼近	81
§ 2 Lagrange 插值	83
2.1 基函数	83
2.2 Lagrange 插值多项式	85
2.3 余项	87
§ 3 迭代插值	92
3.1 问题的提出	92
3.2 Neville 法	92
3.3 Aitken 法	96
3.4 运算次数	97
§ 4 Newton 插值	98
4.1 基函数	98
4.2 均差与差分	99
4.3 Newton 均差插值	104
4.4 Newton 差分插值	107
§ 5 Hermite 插值	110
5.1 带导数插值问题的一般描述	110
5.2 基函数与插值多项式	111
5.3 余项	113
5.4 带导数插值的其它例子	114
§ 6 分段多项式插值	117
6.1 高次插值的问题	117
6.2 分段线性插值	120
6.3 分段三次 Hermite 插值	123
§ 7 三次样条插值	126
7.1 三次样条插值问题的提法	126
7.2 插值函数的建立	129

7.3 误差界与收敛性	134
§ 8 反插值	135
8.1 插值与反插值	135
8.2 利用函数的插值多项式反插	136
8.3 构造反函数的插值多项式	138
§ 9 离散点的最小二乘曲线拟合	139
9.1 问题提法及拟合模型	139
9.2 线性模型的正规方程	141
9.3 基于正交基的线性模型	146
9.4 非线性模型举例	149
§ 10 连续函数的最佳平方逼近	154
10.1 问题提法及正规方程	154
10.2 利用多项式作平方逼近	157
10.3 利用正交函数组作平方逼近	159
评注	161
习题	163
第三章 数值积分方法	173
§ 1 梯形公式与 Simpson 公式	175
1.1 梯形公式	175
1.2 Simpson 公式	176
1.3 代数精确度的概念	179
§ 2 等距节点积分公式	181
2.1 闭型 Newton-Cotes 积分公式	181
2.2 开型 Newton-Cotes 积分公式	183
2.3 Newton-Cotes 公式的数值稳定性	185
§ 3 复合的数值积分公式	186
3.1 引言	186
3.2 复合梯形公式	186
3.3 复合 Simpson 公式	188
§ 4 外推方法	190

4.1	复合公式节点加密计算	190
4.2	外推方法	192
4.3	Romberg 算法	195
4.4	外推算法的进一步讨论	198
§ 5	Gauss 求积方法	201
5.1	Gauss 型求积公式	201
5.2	Gauss 型求积公式的例子	207
5.3	Gauss 型求积公式的其它性质	211
5.4	预先规定某些节点的 Gauss 型求积公式	212
§ 6	自适应求积方法	214
6.1	自适应计算问题	214
6.2	自适应 Simpson 算法	215
§ 7	奇异积分和振荡函数积分的计算	218
7.1	奇异积分计算	218
7.2	振荡函数积分的计算	223
	评注	227
	附录 A 求积公式误差的 Peano 估计	229
	习题	231

第四章	常微分方程的数值方法	236
§ 1	基本概念和准备知识	236
1.1	常微分方程的初值问题	236
1.2	初值问题数值解的基本概念	239
1.3	常系数线性差分方程	240
§ 2	Euler 方法	242
2.1	显式 Euler 方法	242
2.2	隐式 Euler 方法和梯形方法	245
2.3	改进的 Euler 方法	247
2.4	单步法的局部截断误差和阶	248
§ 3	Runge-Kutta 方法	250
3.1	Runge-Kutta 方法的一般形式	250

3.2	二、三、四阶的 Runge-Kutta 方法	253
3.3	其它 Runge-Kutta 方法	260
§ 4	单步法的进一步讨论	261
4.1	收敛性	261
4.2	相容性	264
4.3	稳定性	266
4.4	变步长和误差控制方法	270
§ 5	线性多步法	274
5.1	线性多步法的一般问题	274
5.2	线性多步法的例子	279
5.3	预测-校正方法	286
§ 6	线性多步法的进一步讨论	290
6.1	收敛性和稳定性	290
6.2	外推方法	294
§ 7	一阶方程组的数值方法	296
7.1	数值方法推广到方程组	296
7.2	刚性方程组介绍	297
评注		299
习题		300
第五章	数值代数的准备知识	303
§ 1	矩阵及矩阵的运算	303
1.1	矩阵的概念	303
1.2	矩阵的线性运算与乘法	306
1.3	方阵的行列式及线性方程组的解	308
1.4	方阵的逆	311
1.5	矩阵的分块	311
§ 2	几种特殊类型的矩阵	314
2.1	对称矩阵与正定矩阵	314
2.2	正交矩阵	316
2.3	Hermite 矩阵与酉矩阵	318

2.4 对角占优矩阵	320
§ 3 矩阵变换	321
3.1 初等变换	321
3.2 相似变换	324
3.3 正交变换与酉变换	325
§ 4 特征值与特征向量	326
4.1 基本概念	326
4.2 若干基本性质	328
4.3 Jordan 标准形	334
§ 5 矩阵的范数	336
5.1 矩阵范数的定义	336
5.2 常用的矩阵范数	337
5.3 范数的几个性质	342
5.4 向量与矩阵的极限	344
习题	347
 第六章 线性代数方程组的解法	 353
§ 1 Gauss 消去法	354
1.1 方法的描述	354
1.2 使用的条件及运算次数	358
1.3 矩阵的三角分解	360
1.4 行列式与逆矩阵的计算	362
§ 2 主元素 Gauss 消去法	364
2.1 主元素及其选取问题	364
2.2 全主元素消去法	365
2.3 列主元素消去法	370
§ 3 Gauss-Jordan 消去法	374
3.1 无回代的消去法	374
3.2 列主元 Gauss-Jordan 消去法	376
3.3 Gauss-Jordan 法求逆矩阵	378
§ 4 直接三角分解法	381

4.1	线性递推计算与 LU 分解	381
4.2	Doolittle 分解法	382
4.3	列主元三角分解法	385
4.4	Cholesky 分解法(平方根法)	388
4.5	改进的平方根法	392
4.6	追赶法	394
§ 5	直接法的误差分析	397
5.1	解的误差估计	397
5.2	扰动方程组解的误差界	498
5.3	舍入误差界	403
§ 6	迭代法的基本理论及 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法	406
6.1	迭代法的简单形式和基本方法	406
6.2	迭代法收敛性分析	409
6.3	Jacobi 迭代和 Gauss-Seidel 迭代的收敛性	414
§ 7	超松弛迭代法和块迭代方法	415
7.1	超松弛迭代法	415
7.2	块迭代方法	419
7.3	一个模型问题	421
§ 8	共轭斜量方法	423
8.1	与方程组等价的极值问题,最速下降法	423
8.2	共轭斜量法	426
评注		430
习题		432
第七章	矩阵特征值问题计算方法	442
§ 1	特征值问题的性质及正交相似变换	442
1.1	特征值的范围	442
1.2	特征值的扰动	445
1.3	Householder 变换	446
1.4	Givens 变换	450
1.5	矩阵的 QR 分解	452

§ 2 幂法求特征值	455
2.1 幂法	455
2.2 加速方法	457
2.3 收缩方法	458
2.4 反幂法	460
§ 3 用正交相似变换化矩阵为 Hessenberg 形式	462
3.1 矩阵的 Schur 分解	462
3.2 化矩阵为 Hessenberg 形式	463
§ 4 QR 方法	468
4.1 QR 计算方法	468
4.2 Hessenberg 矩阵的 QR 方法	470
4.3 带有位移的 QR 方法	473
4.4 实际计算的 QR 方法	475
§ 5 对称矩阵特征值问题	481
5.1 对称特征值问题的性质	481
5.2 Rayleigh 商加速和 Rayleigh 商迭代	482
5.3 对称的 QR 方法	484
5.4 求对称三对角矩阵特征值的二分法	486
5.5 Jacobi 方法	489
附录 A 定理 3.2 的证明	496
附录 B 定理 3.3 的证明	498
评注	499
习题	500
 第八章 非线性方程的数值解法	 504
§ 1 二分法	505
1.1 二分算法	505
1.2 线性插值方法	507
§ 2 迭代法的算法和理论	508
2.1 不动点迭代法	508
2.2 不动点迭代法的一般理论	510

2.3	局部收敛性,收敛阶	514
§ 3	Newton 迭代法	517
3.1	Newton 法计算公式	517
3.2	Newton 法的几何意义	518
3.3	重根情形	519
3.4	Newton 法的应用举例	521
§ 4	割线法和 Muller 方法	523
4.1	割线法的计算公式	523
4.2	割线法的收敛性	524
4.3	Muller 方法	527
§ 5	迭代的加速方法	528
5.1	Aitken 加速方法	528
5.2	Steffensen 迭代方法	530
§ 6	代数方程和非线性方程组求根方法	532
6.1	代数方程的求根	532
6.2	非线性方程组	536
附录 A	Newton 法与割线法计算量的比较	541
评注		543
习题		544
参考书目		547

第一章 引 论

本章的目的—是论述数值计算方法的内容与意义，二是提供一些预备知识。包括：微积分若干概念和性质的回顾；介绍关于数值计算方法理论分析所用的误差概念和基本性质，以及稳定性与收敛性的概念，引入赋范线性空间和内积空间的一般概念，数值方法的具体建立或理论分析常常是在某个赋范线性空间中进行的。

§ 1 数值计算方法的内容与意义

1.1 计算机与算法

今天，人们对计算机的成就已经置信无疑，计算机仅有四十余年的历史，进步乃至换代却异常迅速。一般认为，现在的计算机正处于第四代，但人们对新一代(第五代)计算机早已议论纷纷。始于第一代的传统(结构)的计算机是单处理机系统，每一时刻按一条指令进行一个操作，也称串行计算机。在第三代期间开始研制实现并行计算的高性能计算机，并有若干此类机器系统于七十年代前期投入使用。并行计算是指每一时刻按一条或多条指令进行多个操作。至第四代，商售巨型计算机结构并行化已很显著，特别在进入八十年代以来，有人声称已处于多半属于并行计算机的时期。并行计算机有三种基本类型：流水线处理机，阵列处理机和多处理机。

关于计算机应用的主流和趋向,有一个如图 1.1 所示的 Venn

(文氏)图。它将计算机处理分为以下四个复杂性依次上升的级别:

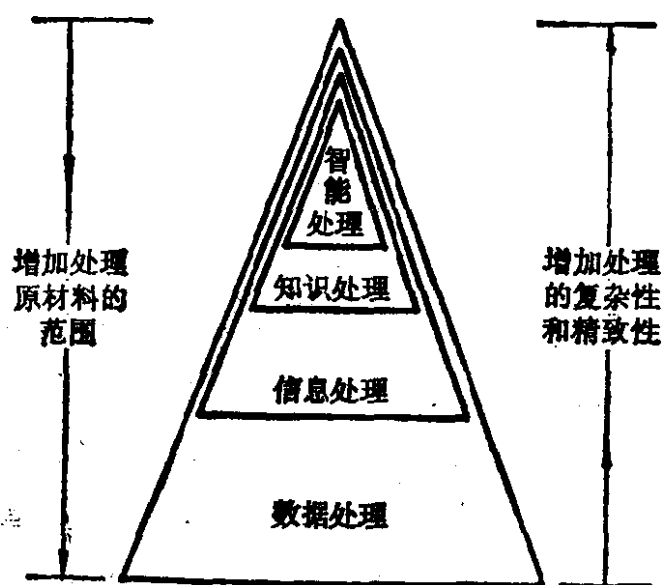


图 1.1

(1) 数据处理。数据空间最大,数据对象包括各种形式的数值的数,字符,以及多维的量,计算机的一切应用都归结为数据处理。

(2) 信息处理。一个信息项是由某些语法结构或关系联系的一集数据对象。因此信息项形成数据

空间的一个子空间。

(3) 知识处理。知识项由信息项加上某些语义含义组成。从而知识项形成信息空间的一个子空间。

(4) 智能处理。智能导自一集知识项。智能空间由 Venn 图中最内最高的三角形表示。

目前大多计算机仍限于数据-信息处理两个级别之内。由于对知识处理日益迫切,近年已出现各种专家计算机系统用于解决各个特殊领域中的问题。如今的计算机能制造成非常博学,但离有智能还差很远。

利用计算机处理任何问题,首先必须建立算法。一般地说,一个算法是由 $k \geq 1$ 个进程组成的集合,每个进程明确地描述一个按规定顺序执行的以步骤(由某些操作和操作对象合成)为项的有限序列,所有进程能同时执行并协同地在有限个操作步内实现一个给定问题的求解;而且,它可以直接由一种计算机语言来表达,并

在一台计算机上实现。

按面向的计算机,算法可分成串行算法和并行算法两类。 $k=1$ 个进程的算法适用于串行计算机,称为**串行算法**; $k \geq 2$ 个进程的算法适合并行计算机,称为**并行算法**。

按面向的求解问题,算法可分成**数值(计算)算法**和**非数值(计算)算法**两类,它们分别是指求解数值计算问题的算法和非数值计算问题的算法。数学和其它科学的大量问题归结为数值计算问题,信息-知识-智能处理中存在许多非数值计算问题。

按算法的内部特征,还有**确定型算法**与**非确定型算法**之分。通常的科学计算是实现确定型算法,“确定型”是指计算机在执行算法时,做完每一步都精确地知道下一步该怎么做。智能计算是实现非确定型算法,这是一类基于选择的算法,计算机在执行这种算法时,存在不能精确地知道下一步该做什么而必须在几种可能方案中选择一种去执行的情况。用非确定型算法求解的问题主要包括组合优化和组合判定两类问题,组合优化是求满足限制条件并使目标函数值达最大或最小的解(称最佳解),组合判定是求任意一个满足限制条件的解。

在计算机上解决一个问题,就是实现某种类型的一个具体算法。

1.2 本书的内容和线索

数值计算方法是数学的一个分支,也称数值分析或计算方法,对象是研究建立各种数学问题的数值计算算法的方法与理论,任务是提供在计算机上实际可行的、理论可靠的、计算复杂性好的各种常用算法,这些算法都是串行的确定型的数值计算算法。

具体些说,由于计算机能够进行加、减、乘、除及逻辑等运算,每个求解数学问题的算法只能通过计算机能够执行的运算来表达,因此,为了建立各种算法,需寻找有可靠理论分析的种种途径,