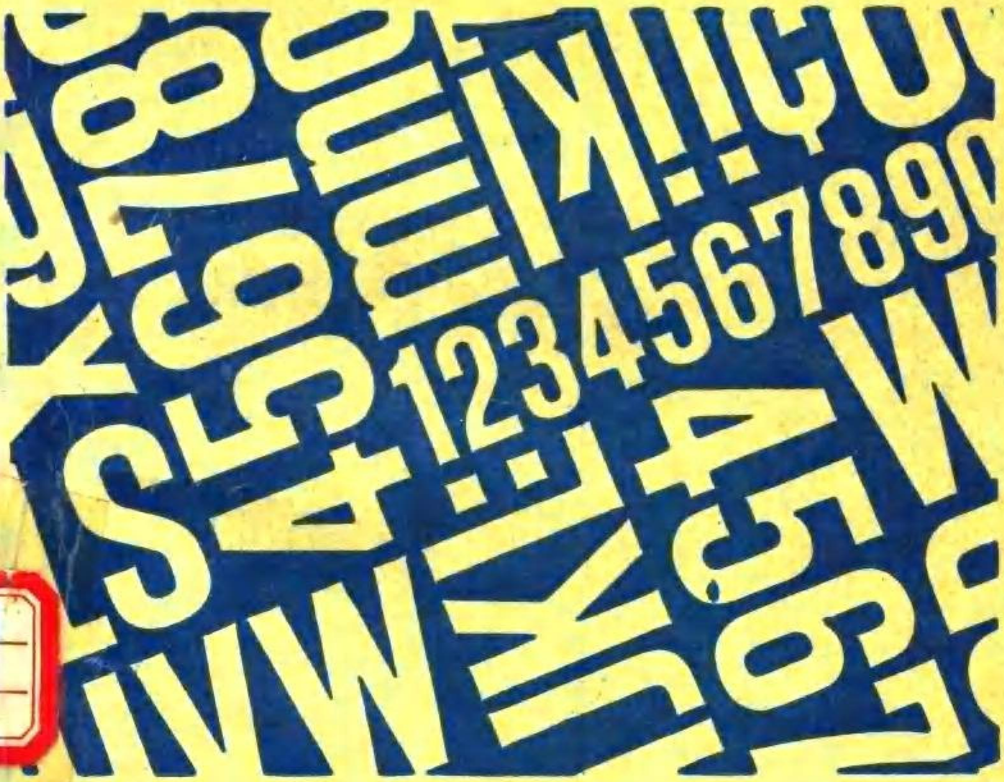
数值分析方法

奚梅成　编著
刘儒勋　审校



中国科学技术大学出版社

数值分析方法

奚梅成 编著

刘儒勋 审校

中国科学技术大学出版社

1995 · 合肥

(皖)新登字08号

数 值 分 析 方 法

奚梅成　编著

刘儒勋　审校

*

中国科学技术大学出版社出版

(安徽省合肥市金寨路96号，邮编：230026)

安徽省金寨县印刷厂印刷

全国新华书店经销

*

开本：850×1168/32　印张：11.5　字数：297千

1995年2月第1版　　1995年2月第1次印刷

印数：1—4000册

ISBN 7-312-00616-7/O·153　　定价：8.00元

前　言

本书是编著者多年为计算机系及其它非数学系学生讲授计算方法后，按照以下的思路所编写的教材。

（一）计算方法本身所介绍的是一些适合于计算机上使用的数值分析方法，这些方法的基础是数学分析，代数，微分方程等数学理论，根据我校学生比较注重基础理论这一特点，——本书在介绍方法的同时，尽可能地阐述清楚方法的数学理论根据，并对方法的有关结论作出严格而简洁的证明。

（二）数值分析中的各种方法具有相对的独立性，但作为一门课程，我们尽力把它编写成具有较好连贯性及较为完整的教材。

（三）尽管篇幅有限，我们尽可能多地讲述适合于计算机上使用的数值计算方法，并尽可能地把每个方法讲透彻。另一方面，由于授课学时的限制，对诸如有限元方法，偏微分方程数值解法等只能忍痛割爱。

（四）全书内容需讲授72—80学时。授课学时不足72—80时，对本书内容可根据不同专业的需要作必要的删减。由于各种方法的相对独立性，作适当的删减不会增加授课的难度。

刘儒勋教授对本书提出了许多宝贵的意见和建议，并仔细地审查、校阅了本书原稿，计算教研室李绍疆教授及其他老师对本书编写也给予了积极支持并提出一些有益意见，对此，作者对他们表示衷心感谢。

奚梅成

1994年9月

目　次

1 导　引

1.1 数值分析方法的内容

解决一个具体的科学或工程问题大致可分三个环节。首先，科学研究人员或工程研究人员对具体的问题建立起物理模型。然后由基础研究人员把物理模型归结成数学模型，经过基础研究工作者的艰苦的努力，或许能证明数学模型解的存在唯一性，但要找出解的表达的机会却是微乎其微。因此，最后还需数值分析专家对数学模型建立数值求解方法，直至在计算机上得以实现。数值分析方法正是研究和讨论各类数学问题进行数值求解的学科。

随着科学的发展，特别是计算机的巨大发展和一些边缘学科的兴起，已经很难对以上讲述的三个环节给出明确的划分。在许多领域，一个优秀的科学工作者，他也必需是优秀的数值分析专家，即使是普通的工程技术人员，他也必须掌握一些基本的数值分析方法以及在计算机上实现这些方法的技能。

数值分析方法，或者说计算方法，其内容大致可分三个部分，即

(●) 数值逼近。

(●) 数值代数。

(●) 微分方程的数值求解。

(一)数值逼近方法主要是解决分析中的数值求解问题。自从Newton 创立微积分开始，就提出了一些基本的数值逼近方法。求$[a,b]$上函数$f(x)$的积分$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$，从理论上讲，只要求出

$f(x)$的原函数 $F(x)$，则就有

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = F(b) - F(a)$$

然而，作为求导的逆运算，求 $f(x)$的原函数通常是件十分困难的事。可以这样说，实际问题中的函数积分问题，通过求原函数方法是无法实现的。最早实现数值积分的方法是梯形公式。即用 $f(x)$在两个端点的函数值 $f(a)$，$f(b)$之和乘以区间长度的一半来作为积分的近似，亦即

$$\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \approx \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

以后又出现了 Simpson 公式、Romberg 积分等数值逼近方法。

除了数值积分外，数值逼近还包括函数在不同意义下的各类逼近方法，曲线的拟合等等内容。

（二）n 阶线性方程组

$$Ax = b \tag{1.1}$$

由克莱姆定理，解存在唯一的充分必要条件为系数矩阵 A 的行列式 $D = \det A \neq 0$，且这时有

$$x_i = D_i/D,\ i = 1, 2, \cdots, n \tag{1.2}$$

其中 D_i 为 D 中第 i 列元素由常数项 b 代入后的行列式值。从代数学的观点，克莱姆定理已是个十分完满的定理。但是，若按(1.2)，需求计算 $n+1$ 个 n 阶行列式才能得到解，这是件不现实的事。而数值代数方法为我们提供有效而省时的求解方法。对不同类型的系数矩阵，可以提供不同的数值求解方法。同样地，数值代数还为我们提供矩阵求逆、矩阵特征值、特征向量等方面的数值计算方法.

（三）微分方程的求解问题在理论上也有许多结果，例如，常微分方程初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x, y) \\ y(a) = y_0 \end{cases} \qquad (a \leqslant x \leqslant b) \tag{1.3}$$

在理论上，对(1.3)的存在唯一性条件及解的稳定性都有一些经典的结论，而且也提供了针对一些不同类型的右端项 $f(x, y)$ 的解析求解方法。然而，实际问题中提出的常微分方程往往不属于这些典型的类型，即便 $f(x, y)$ 在形式上十分简单，我们也无法得到解析解。通过数值方法，我们就能得到(1.3)的解 $y(x)$ 在离散点上的近似值，类似地，通过数值方法，也可得到常微分方程边值问题、偏微分方程初、边值问题在离散点上的近似值.

数值分析方法是门有相当历史的学科，但是，由于受到计算工具的限制，许多今天看来是个很好的数值方法，以前却难于应用，因此，在计算机问世前，这门学科发展缓慢。计算机的出现，特别近20年来高速巨型计算机的出现，为数值分析方法的发展提供了极好的机会。例如运算量较大、却十分有效的有限元法，快速 Fourier 分析等方法都是近20年来得以发展的。另一方面，现代科学的发展，迫使数值分析专家提出一些具有高精度的大运算量的数值方法，这又促使了计算机科学的进一步发展。

1.2 误 差

1.2.1 误差概念

数值方法得到的是解的近似。真解与近似解之间的偏差就是误差。

记 x^* 为真值，$\tilde{x}$ 为近似值，则

$$e = x^* - \tilde{x} \tag{1.4}$$

就是误差，这个误差称为绝对误差。

由于真值 x^* 一般难于精确得到，通常只能给出绝对误差 $x^* - x$ 的绝对值 $|x^* - x|$ 的界。例如，当 $f(x)$ 充分光滑时，有展开式

$$f(x)=f(0)+xf'(0)+\frac{x^2}{2}f''(0)+\cdots$$

若取前三项作为 $f(x)$的近似，记为

$$P(x)=f(0)+xf'(0)+\frac{x^2}{2}f''(0)$$

由于

$$f(x)=f(0)+xf'(0)+\frac{x^2}{2}f''(0)+\frac{x^3}{3!}f^{(3)}(\theta x),0<\theta<1$$

那么，$f(x)$与其近似 $P(x)$之间的绝对误差为

$$e(x)=\frac{x^3}{3!}f'''(\theta x)$$

由于难于确定值 θ，也就无法得到 $e(x)$ 的精确值，但若 $f(t)$ 满足

$$|f'''(t)|<M,\ 0<t<x$$

则 $e(x)$ 的绝对值有上界：

$$|e(x)|\leqslant\frac{x^3}{3!}M,\qquad 0<x$$

例如真值 $f\left(\frac{1}{2}\right)$与近似值 $P\left(\frac{1}{2}\right)$的误差界为

$$\left|e\left(\frac{1}{2}\right)\right|\leqslant\frac{1}{48}M$$

如若真值、近似值为一组向量：

$$x^*=(x_1^*,\ x_2^*,\ \cdots,\ x_n^*)^T$$

及

$$\tilde{x}=(\tilde{x}_1,\ \tilde{x}_2,\ \cdots,\ \tilde{x}_n)^T$$

则称 $e=x^*-\tilde{x}$ 为误差向量，我们通常用向量模（范数）$\|x^*-\tilde{x}\|$来衡量误差向量的大小。

绝对误差具有量的概念，但有时很难以其大小来衡量近似量的“好”或“坏”。例如，马拉松赛全程 42 公里 195 米，由于测量的误差，实际路程仅为 42 公里 185 米，绝对误差为 10 米，按竞

赛章程，这样的误差是允许的。但若百米赛实际路程为 99 米，绝对误差仅一米却不能被竞赛规则所允许。理由很简单，相对于 42 公里 195 米，10 米误差微不足道，而相对于 100 米，一米的误差是不能接受的。这就是相对误差概念。

绝对误差的绝对值与真值绝对值之比

$$\frac{|x^* - \tilde{x}|}{|x^*|} \tag{1.5}$$

称为相对误差。相对误差往往能更好地说明近似值的"好"或"坏"。

由于难于确定真值 x^*，但 $|x^* - \tilde{x}|$ 的界通常可以得到，若 $|x^* - \tilde{x}| < M$，我们可用比值

$$\frac{M}{|\tilde{x}|}$$

确定相对误差的界。

1.2.2 误差来源

产生误差的原因是多方面的，但主要来源于三个方面。

(1) 原始误差

原始误差包括模型误差与原始数据误差。例如，忽略某些次要因素，气象模型可归结为一组偏微分方程，这就产生了模型误差。而测试到的即时气象要素也因为仪器精度等方面原因，存在一定的误差，这就是原始数据误差。

(2) 数值公式误差

前面例中，用 $P(x) = f(0) + xf'(0) + \frac{x^2}{2!}f''(0)$ 作为 $f(x)$ 的近似公式，它是由截断

$$T(x) = \frac{1}{3!}f'''(\theta x)$$

而得，$T(x)$ 称为截断误差，数值公式误差正是由截断 $T(x)$ 而

产生。

(3) 数值运算误差

对数值公式作具体运算，不管是人工还是通过机器实现，运算通常均按有限位进行，例如，当我们采用5位字长作运算$2\div 3$时，按4舍5入原则，得到的结果是0.66667，它与真值2/3之间有误差，这种误差由运算中舍入产生，称为舍入误差。

1.2.3 误差的改善

原始误差不是我们讨论的对象，数值公式的误差我们将在以后介绍各种数值方法时讨论。

舍入误差在运算过程中不可避免，我们主要讨论如何改善舍入误差。首先我们介绍误差运算规则。

若真值x^*, y^*的近似值$\tilde{x}$，$\tilde{y}$分别有误差e_1，e_2，那么有

(1) $x^*\pm y^*$的近似$\tilde{x}\pm\tilde{y}$的误差

$$(x^*\pm y^*)-(\tilde{x}\pm\tilde{y})=(x^*-\tilde{x})\pm(y^*-\tilde{y})$$
$$=e_1\pm e_2 \tag{1.6}$$

故$x^*\pm y^*$的近似$\tilde{x}\pm\tilde{y}$的误差界为$|e_1|+|e_2|$。而其相对误差为

$$\frac{|e_1\pm e_2|}{|x^*\pm y^*|} \tag{1.7}$$

如若$x^*\pm y^*$很小，则其相对误差将会很大。

(2) $x^*\cdot y^*$的近似$\tilde{x}\cdot\tilde{y}$的误差

$$x^*\cdot y^*-\tilde{x}\tilde{y}=(\tilde{x}+e_1)\cdot(\tilde{y}+e_2)-\tilde{x}\tilde{y}$$
$$=\tilde{x}e_2+\tilde{y}e_1 \tag{1.8}$$

其误差界为

$$|x^*y^*-\tilde{x}\tilde{y}|\leqslant\max\{|\tilde{x}|,|\tilde{y}|\}\cdot(|e_1|+|e_2|)$$

(3) $\dfrac{x^*}{y^*}$的近似$\dfrac{\tilde{x}}{\tilde{y}}$的误差

$$\left|\frac{x^*}{y^*}-\frac{\tilde{x}}{\tilde{y}}\right|=\frac{x^*\tilde{y}-y^*\tilde{x}}{y^*\tilde{y}}=\frac{(\tilde{x}+e_1)\tilde{y}-(\tilde{y}+e_2)\tilde{x}}{\tilde{y}y^*}$$