數值計算方法

徐 涛 编著

吉林科学技术出版社

数值计算方法

徐 涛 编著

吉林科学技术出版社

【吉】新登字 03 号

数值计算方法　　徐涛　编著

责任编辑：张瑛琳　　封面设计：杨玉中

出版发行　吉林科学技术出版社　　850×1168 毫米 32 开本　13.5 印张　329 000 字

1998 年 7 月第 1 版　1998 年 7 月第 1 次印刷

印数：1-1 500 册　　定价：18.00 元

印刷：长春市银吉彩印厂　　ISBN　7-5384-1385-5/TP・23

内 容 提 要

本书主要介绍计算机上常用的各种数值计算方法以及相关的基本概念及理论. 内容包括误差分析初步，插值法，最小二乘曲线拟合，数值积分计算，线代数方程组的直接解法与迭代法，方程求根，非线性方程组迭代求解，矩阵特征值与特征向量的计算，常微分方程初值问题的解法与边值问题的有限差分法. 对主要基本算法的推导、构造原理、收敛性、误差估计(部分方法的稳定性)进行了讨论，内容取材适当，由浅入深，侧重于计算机应用，各章均有例题及数值算例，指出应掌握的基本问题，且有适量的习题及一些上机计算题.

本书可作为理工科(非计算数学)各专业研究生及大学本科高年级的数值计算方法课教材，也可供工程技术人员参考.

前　　言

由于计算机的普及，科学计算已成为各学科领域的一项重要工作．学习和掌握数值计算方法的基本原理及应用已成为现代科学工作者的不可缺少的一个环节．

本书是根据编者十几年来在吉林工业大学讲授工科研究生“数值方法”课所用讲稿整理、改编而成的．此书由浅入深，较全面的介绍了数值计算方面的基本理论及适用算法．选材力求精炼、适用．对必要的理论推导与分析，力求简明、易懂、清晰，重点放在计算机上常用算法的描述及应用．对个别复杂的推导证明只给出条件、结论，略去证明过程，从而培养读者从事实际数值计算的能力．

本书可作为理工科（非计算数学）各专业研究生、大学本科高年级学生（如应用数学、力学、计算机、软件等专业）的数值计算方法课程教材．各章配有适量例题．既考虑到大学没有学过（或学得很少）“计算方法”知识的读者进行学习、查阅的方便，又兼顾到已掌握一定此方面知识的读者的学习进度，授课可适当提高速度．

本书共分十章，除第八章、第九章、第十章部分小节可略去不讲之外，其它内容可60学时全部授完，上机实习需20～30小时．本书也可供工程师及从事数值计算工作的工程技术人员参考．

由于水平有限，对书中的缺点、错误，欢迎批评指正．

编　者

1998.6　于长春

目　　录

第一章 绪 论

1.1 数值计算方法研究的对象、内容及特点

随着科学技术的突飞猛进，日新月异的发展，无论是日常工农业生产还是国际尖端技术，如大中小型机电产品的优化设计、建筑工程项目的设计、气象预测和新型尖端武器的研制、火箭和航天飞机的发射等，甚至除了自然科学外，还有医学、经济管理和社会学等，科学各领域由于实际应用中数学模型的建立而与数学计算产生了紧密的联系．不同学科、不同问题形成的数学模型，由于诸多因素的影响，为寻求其完备性往往不能很方便地（或根本不可能）求出精确解，或者说由于模型的复杂化，这种计算远非人工手工所能解决的．因此需要利用计算机来完成这类大型的、复杂的科学计算工作．

由于电子计算机所能从事的计算是有限的四则运算及逻辑运算，这就使得直接求解任意数学模型产生困难．为解决此问题，各领域的科学家开始研究科学计算问题，于是一批适合计算机求解且精度高、节省计算量的现代数值计算方法随之产生并被广泛使用，且作为一门工具性、方法性的边缘交叉性新学科发展起来，计算数学、计算力学、计算物理、计算化学及各种计算工程学已渐成体系，其中计算数学是基础，它对现有的已知的数学模型，如线性方程组非线性方程、微分方程等问题，建立起相应的一系列数值求解方法，力求计算量小，省内存，精度高，特别是计算机所能够接受且执行计算的方法，分析方法的收敛性、稳定性及误差估计，从而为科学计算提供可靠的数值方法．

运用计算机进行科学计算的全过程见图 1-1.

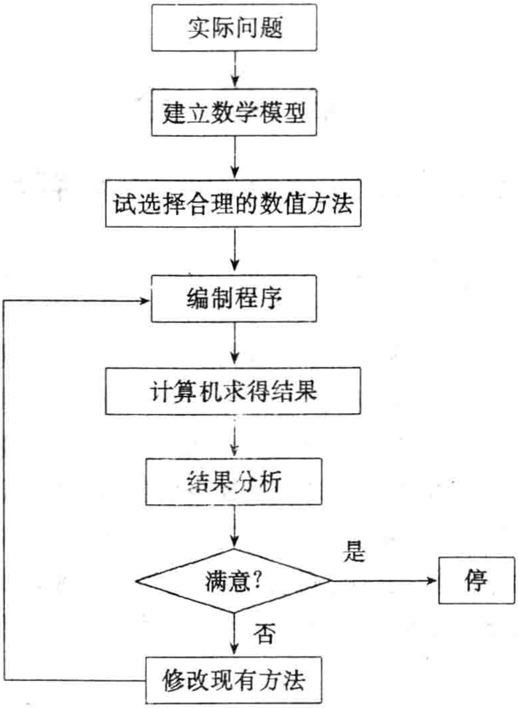

图 1-1

数值计算方法又称为计算方法，更具理论性地讲为数值分析，是一门与计算机应用紧密结合的实用性很强的数学课程. 它严格按照计算机的执行能力，根据从建立数学模型中所得到的某些参数，或称为一组原始数据，利用某种确定的数值运算规则，最终求得原数学问题的满足一定意义误差准则的数值形式的解(一般为近似解).

数值计算方法内容相当丰富，即研究与方法相关的理论，如方法的收敛性、稳定性等，又研究方法的实际应用(当然理论是为应

用服务的). 从数学角度看,研究的内容大致可为三类:

(1) 数值代数,包括非线性方程求根,线性、非线性方程组求解,矩阵特征问题求解等;

(2) 逼近,包括函数逼近(如最佳一致逼近、最小二乘曲线拟合),插值法,数值微分,数值积分等;

(3) 微分方程数值解,主要分常微与偏微分方程数值解.

由于授课时间及篇幅的限制,本书没有将上述内容全部包括,但比通常工科研究生"数值方法"课的内容略有增加,如大型稀疏带状方程组的求解、非线性方程组求解的牛顿型方法以及拟牛顿法及矩阵特征问题计算等.

从数值计算方法所研究的对象及内容可知,本课程涉及面较宽,包括了微积分、线性代数、常微分方程等数学问题,具有纯数学的高度抽象性. 另方面,由于面向计算机应用,即在算法中,只能包含加、减、乘、除运算及逻辑运算,且不能进行无限运算(极限过程),因此数值计算具有较强的技术性. 同时,方法应有可靠的理论依据,如误差分析、收敛性分析、稳定性分析等,以保证计算结果的可靠性及正确性. 好的算法还应具有效率高,收敛快,计算过程的计算量小、内存少且计算过程简单、规律性强等特点. 这里将不再列举实例了.

1.2 误差

1.2-1 误差的来源及分类

利用数值计算方法求得的近似解一般与准确解之间有一定误差. 分析误差的大小,可反映数值解的近似(或准确)程度. 研究误差是本门课程的一个重要内容.

例 1 积分

$$I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n e^x dx \qquad (n = 0,1,2,\cdots)$$

的值应属于区间[0,1]中，且随着 n 的增大而减少. 而用分部积分法可得递推关系式

$$I_n = 1 - nI_{n-1} \qquad (n = 1,2,\cdots) \tag{1.1}$$

若用尾数八位的浮点计算机算出 $I_0 = 1 - e^{-1}$ 的近似值(具有八位有效数字)，然后利用递推式(1.1)求 $I_1, I_2, I_3, \cdots$ 近似值，结果见表 1-1.

表 1-1

n	I_n 的近似值	n	I_n 的近似值
0	0.63212056	8	0.10097920
1	0.36787944	9	0.091187200
2	0.26424112	10	0.008128000
3	0.20727664	11	0.030592000
4	0.17089344	12	0.63289600
5	0.14553280	13	−7.2276480
6	0.12680320	14	102.18707
7	0.11237760	⋮	⋮

I_{12} 的近似值大于 I_0 的近似值，且随 n 增大，结果明显是错误的.

此例表明，虽然计算工具是先进的，计算公式是正确的，但却得到了错误的结果. 产生这种情况的原因与初始误差(I_0 的近似值不精确)及误差的传播有关. 因此有必要对计算误差进行研究.

误差的种类很多，根据误差的来源进行分类可有(1) 建模误

差;(2) 观测误差;(3) 舍入误差;(4) 截断误差(或方法误差).

应用计算机进行科学运算(见图 1-1),许多环节都会产生误差.如从实际问题出发建立数学模型,在取舍参数过程中,有对实际问题的抽象与简化过程,称这种实际与模型间的误差为**建模误差**.

在数学模型中若含有一些实验或观测得到的参数,如测定的风速、测量的电压等,受特定条件(如温度、测量工具的准确性)的影响也会产生误差,称之为**观测误差**.

由于计算机字长所限,用有限位计算,某些原始数据的表示会产生误差,这种误差称为**舍入误差**,如圆周率 π 的表示,超越数 e 的表示都是近似值.

用选定的数值计算方法求出的数学模型的近似解也会产生误差,称由算法得到的近似解与实际问题的准确解之间出现的误差为**截断误差**或**方法误差**(这种误差也是本课要重点讨论的误差).例如,函数 $f(x)$ 用泰勒展开式

$$P_n(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n$$

近似代替,则截断误差是

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1}$$

在研究分析截断误差的过程中,我们总是假定实际问题所建立的模型是合理的,且几乎没有观测误差.

1.2-2 绝对误差(限)、相对误差(限)及与有效数字间的关系

定义 1 设 x 为准确值,x^* 为 x 的一个近似值,称

$$e(x) = x - x^* \tag{1.2}$$