研究生教育"十二五"规划教材

现代数值分析

主编　蔡光程

科学出版社

研究生教育“十二五”规划教材

现代数值分析

主　编　蔡光程
副主编　罗志强　吕毅斌　陈智斌

科学出版社
北　京

内 容 简 介

本书是为高等院校理工科研究生各专业开设的“数值分析”课程编写的教材, 内容包括函数插值、函数逼近、数值积分与数值微分、线性方程组的直接解法和迭代解法、非线性方程求根、矩阵特征值与特征向量、常微分方程初值问题的数值解法、傅里叶变换与小波变换、偏微分方程数值解初步. 全书注重算法数学理论的建立和应用, 最终实现工程问题的数学化、数学问题的数值化.

本书可作为高等院校理工科类硕士研究生数值分析课程的教材或高年级本科生计算方法课程教材, 也可作为从事科学计算的广大科技工作者的参考资料.

图书在版编目(CIP)数据

现代数值分析 / 蔡光程主编. —北京: 科学出版社, 2019.7
研究生教育“十二五”规划教材
ISBN 978-7-03-061926-6

Ⅰ. ①现… Ⅱ. ①蔡… Ⅲ. ①数值分析-研究生-教材
Ⅳ. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 158034 号

责任编辑: 王胡权 李 萍 / 责任校对: 杨聪敏
责任印制: 张 伟 / 封面设计: 华路天然工作室

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码: 100717
http://www.sciencep.com
北京虎彩文化传播有限公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2019 年 7 月第 一 版 开本: 720 × 1000 1/16
2019 年 7 月第一次印刷 印张: 19
字数: 385 000

定价: 59.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前　言

科学计算是工程人员在实际工程应用中必备的技能, 其研究对象是如何用数学的方法解决工程问题, 最终实现工程问题的数学化、数学问题的数值化. 本书在保留传统意义上的数值逼近、数值代数、常微分方程数值解的基础上, 增加傅里叶变换和小波变换、偏微分方程数值解的有限差分法等内容. 在工程类数值分析的学习中, 这些理论与工程应用联系紧密, 而且现在计算软件应用广泛, 因此把一些现代计算数学的前沿知识融入传统数值分析教材中是可行的, 这为数值计算和数值仿真做了较好的理论准备.

本书在编排上设置了基本的练习题, 还安排了数值实验题, 目的是在教学中培养学生应用所学计算理论解决实际问题. 本书可作为高等院校理工类硕士研究生“数值分析”课程的教材, 也可作为数学类、力学类、物理类高年级本科生“计算方法”教材, 还可供相关科技工作者参考.

第 1, 10 章由蔡光程编写, 第 2, 3 章由吕毅斌编写, 第 4, 9, 11 章由罗志强编写, 第 5 章由李玉兰编写, 第 6, 8 章由殷英编写, 第 7 章由陈智斌编写. 初稿完成后由蔡光程、罗志强、吕毅斌、陈智斌对全书进行了系统的统稿、定稿和加工工作. 稿中的所有作图由何维刚完成.

本书的出版得到了昆明理工大学研究生院和校领导的大力支持, 科学出版社为本书的出版做了大量工作, 在此一并表示感谢.

限于编者水平, 本书不妥之处在所难免, 恳请读者批评指正.

作　者

2018 年 12 月

目　　录

第 1 章　科学计算引论

1.1　科学计算背景

1.1.1　科学计算与计算数学

在古今中外人类发展的历史中, 科学计算一直伴随人们的生活和对自然界的认识, 曹冲称象的故事即为之一, “置象大船之上, 而刻其水痕所至, 称物以载之, 则校可知矣. ”其思想就是数值积分理论, 即: ①剖分(细分); ②取近似; ③求和; ④求极限. 大象牵入船中吃水的刻度近似等于再用该船装小石后在水中的吃水刻度, 逐个取出小石进行称量后求和, 则其和即近似为大象的重量, 这一过程当然有误差, 既有测量的初始误差, 也有累加计算的计算误差.

数学是科学之母, 科学技术离不开数学, 纯粹数学为应用数学、计算数学提供数学理论, 应用数学、计算数学又为工程应用提供数学工具. 数值分析也称计算数学, 是数学科学的一个分支, 主要包含函数或数据逼近与拟合、数值积分与微分、线性方程组的数值求解、非线性方程与方程组的求解、特征值数值计算、微分与积分方程数值求解等, 由于傅里叶变换、小波分析在工程中应用广泛, 近年来计算数学也把这部分涵盖在该学科里. 数值分析的特点是研究用计算机技术求解数学问题的近似化数值模拟和仿真, 其对科学技术问题的求解步骤是

(1) 从实际问题中近似抽象出数学模型即建模;

(2) 对数学模型给出数值计算方法即算法;

(3) 根据计算方法在计算机上编制程序做数学实验获得数值结果即数值模拟与数值仿真.

以上三个步骤是科学计算的核心, 它要求科技工作者既具有一定的数学基础, 还应有近似理论思想、计算机编程能力, 为了让科学计算工具更好地为工程应用领域所用, 同时还需要数学、计算机技术充分融合以适应现代大数据处理的要求, 只有借助计算机才能实现工程问题的数值(数据)模拟化、可视化, 才能使获得的数据精确化, 为工程设计、施工、检测提供科学依据.

1.1.2　计算数学与现代科学计算

20 世纪 90 年代以来, 随着计算机技术的高速发展, 科学计算也是突飞猛进,

许多和百姓生活息息相关的事情成为可能, 如天气预报、大洋环流预测越来越精确, 这为人们的出行、生产、航行带来质的变化. 计算数学是各种计算性学科的共性基础, 兼有数学理论的基础性、解决实际问题的应用性、各个学科理论相互交叉的融合性. 科学计算是一门具有工具性、方法性、边缘性的学科, **它与理论研究和科学实验成为现代科学发展的三种主要手段**, 它们相辅相成又互相独立. 数值计算与物理学、化学、工程技术紧密结合, 形成了计算物理、计算结构力学、计算水力学、空气动力学、计算经济学、计算化学等. 科学计算的核心一方面是对实验问题建立数学模型, 另一方面是把数学模型化为利于计算机算法能够解决的简化数学模型, 再设计合适的算法求出其简化数学模型的数值解, 在一定条件下逐渐逼近其实际模型的精确解.

比如建造一个现代化的水电站, 其基本理论涉及水动力学、岩土力学、材料力学、弹塑性力学等, 水坝选址时必须考虑地质基础和地震历史记录, 为建成一个完整的水电站, 前期必须在实验室里做数值模拟仿真和微型实体仿真水动力实验, 以验证其设计的可行性和科学性, 在实验过程中不断检验原假设问题和发现新问题以修正相关的参数, 为初期设计存在的不足进行更正. 在此过程中, 需要采集大量的实验数据和数值计算, 利用计算机进行数值模拟, 在水动力学方面对纳维-斯托克斯(Navier-Stokes)方程用有限元素法、有限差分法、无限元素法进行数值计算, 在水与坝体之间的接触部分要用流固耦合理论加以解决, 在坝体基座、坝体结构等方面用结构力学进行分析, 其力学分布满足椭圆型偏微分方程. 对这些受力体和各个结构部件采用网格剖分, 根据受力的均匀性在剖分尺度上有粗细之分, 在节点上设置基函数并建立满足一定条件的方程组, 其系数矩阵即为刚度矩阵, 刚度矩阵合成后得方程组的总刚度矩阵, 最终形成一个高维(有时可达到上亿维)的线性方程组. 通过计算(如迭代法)高维的线性方程组求得解向量, 再用插值理论进行数值模拟, 最终得到一个数值仿真的水坝应力模拟实验, 为实际的坝体施工提供科学依据.

1.1.3 计算方法与计算机技术

随着计算机技术的发展, 原来必须用数值计算算法理论进行优化和加速的方法现在变得非常简单, 如在数值积分中, 辛普森(Simpson)公式是三阶精度, 而梯形公式仅仅是一阶精度, 在复合公式中该特性一直保持, 但在剖分时由于计算机处理数据的巨量化, 可以仅仅用复合梯形公式, 当剖分 n (如 100)等份时如果精度不能满足, 可以作 $2n$ 等份、$4n$ 等份, 在计算时间上没有质的区别.

但是, 在对某个问题选择算法时, 就必须考虑算法的复杂度. 一个明显的实例是解 n 阶线性方程组, 如果用克拉默(Cramer)法则求解线性方程组, 那么其算法的计算量随着 n 的增加呈几何级数增长, 当 n 稍微大一点其计算量是非常巨

大的. 如 $n=20$，用克拉默法则求解线性方程组需要 9.7×10^{21} 次乘除法运算，若用十亿次/秒计算速度的计算机进行运算，则需要的计算时间是 $9.7\times10^{21}/10^{9}=9.7\times10^{12}$ (秒) $=3.07\times10^{5}$ (年)，这说明即使 $n=10$ 用手工的方法计算也是不可能的. 但如果用高斯(Gauss)消元法计算，则四则运算的次数是 $\frac{2}{3}n^3+\frac{3}{2}n^2-\frac{7}{6}n$，当 $n=20$ 时，运算次数为 5910 次. 这个例子说明，一个好的算法对解决问题是非常有帮助的.

科学计算必须与计算机技术的特点相适应，数学的理论计算本可以认为是正确的，但如果用计算机进行计算可能会出现错误.

1.2 科学计算的误差

1.2.1 科学计算误差的产生

在科学计算中存在数据的采集、整理、处理、输出等，在各个过程中均会产生误差. 一般地，在测量时由于机器精度只能测量到某一位，这样产生的误差称为**观测误差**. 对于一些实际问题，如果对其描述或建模就存在一定的近似或为了在数学上更好表达其模型而舍去一些次要项，这样建立的数学模型产生的误差称为**模型误差**. 在数值分析中不研究这两类误差，而是认为所给数值是精确的，所建模型是准确合理的并能反映其客观实际问题. 在建立的数学模型下得到的理论解与根据数学模型构建的数值方法得到的数值解之间的差异称为**截断误差**或**方法误差**. 计算机只能处理有限数位的小数运算，初始参数或中间结果都必须进行四舍五入运算，这产生的数值误差称为**舍入误差**. 数值分析课程主要讨论截断误差.

1.2.2 误差的基本概念

1. 绝对误差与误差限

定义 1 设 x^* 是精确值，x 是近似值，则称 $e(x)=x-x^*$ 为 x 近似 x^* 的**绝对误差**，简称**误差**，在不引起混淆时记作 $e(x)$ 或 e.

误差 $e(x)$ 是有量纲的量，其量纲与 x 相同，误差 $e(x)$ 可以正也可以负，当 $e(x)$ 为正时称作“强近似”，当 $e(x)$ 为负时称作“弱近似”. 由于精确值 x^* 一般不知道，因此根据测量或计算情况估计出 $e(x)$ 的绝对值的一个上限值，这个上限值称为 x 的**误差限**，记作 ε，即 $|e(x)|=|x-x^*|\leqslant\varepsilon$，也即 $x-\varepsilon\leqslant x^*\leqslant x+\varepsilon$.

2. 相对误差和相对误差限

目前高清观测卫星在地球上空 30 万米轨道上测量地面物体可以达到误差厘米级，而公路隧道建设中利用盾构机从两边开挖后到最终打通的接头处误差也是厘米级，虽然从量纲上这两类误差几乎是一样的，但人们均普遍认为高空卫星的测量更精确，这就引出相对误差定义.

定义 2　绝对误差与精确值的比值

$$\frac{e(x)}{x^*}=\frac{x-x^*}{x^*} \tag{1.1}$$

称为 x 的**相对误差**，记作 e_r .

相对误差是无量纲的，它反映的是相对概念，常用百分比来表示，也是可以取正、负. 由于 x^* 不能获得，相对误差也不能准确计算，因此用相对误差限来估计更能反映其相对误差结果. 取 $\varepsilon_r=\frac{\varepsilon}{|x^*|}$，该值称为相对误差限，容易得到 $|e_r|=\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{\varepsilon}{|x^*|}=\varepsilon_r$. 同样，实际中用 x 来代替 x^*，即用 $\varepsilon_r=\frac{\varepsilon}{|x|}$ 表示相对误差限.

1.2.3　有效数字

定义 3　设 x 是近似值，如果其误差限 ε 是 x 的某一数位的半个单位，我们就说 x 准确到该位，从该位起直到前面第一个非零数字为止的所有数字称为 x 的**有效数字**.

如果用数字形式来表示，取 $x=\pm 10^m\times(a_1\times 10^{-1}+a_2\times 10^{-2}+\cdots+a_n\times 10^{-n})$，记作 $x=10^m\times(\pm 0.a_1a_2\cdots a_n)$，其中 m 为整数，$a_1,a_2,\cdots,a_n$ 是介于 0 ~ 9 的整数，且 $a_1\neq 0$，如果有 $|e(x)|=|x-x^*|\leqslant\varepsilon=\frac{1}{2}\times 10^{m-l},1\leqslant l\leqslant n$，则称 x 有 l 位有效数字.

例 1.1　已知精确值 $x^*=35.438$，测量值 $x_1=35.4321,x_2=35.4426$, 求 x_1,x_2 的有效数字分别有几位.

解　因为

$$\begin{aligned}|e(x_1)|&=|x_1-x^*|=|10^2\times 0.35438-10^2\times 0.354321|\\&=10^2\times 0.000057\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{2-3},\end{aligned}$$

所以 x_1 的有效数字是 3 位，即 35.4 . 又

$$
\begin{aligned}
|e(x_2)| &= |x_2 - x^*| = |10^2 \times 0.35438 - 10^2 \times 0.354426| \\
&= 10^2 \times 0.000046 \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{2-4},
\end{aligned}
$$

所以 x_1 的有效数字是 4 位，即 35.44.

实际应用时不能知道精确值 x^*，而只知道计算值 x，如果认为计算结果的各数位可靠，为了计算方便必须用四舍五入进行处理，此时则其四舍五入的那一位到前面第一个不为零的数位共有 l 位，即为有效数位，由于四舍五入，其与计算数值的差是小于等于该位的半个单位．例如，圆周率 $\pi = 3.1415926\cdots$，则 3.142 与 3.1416 分别为 3.1415 和 3.14159 四舍五入得到，因此其有效数位分别为 4 位与 5 位.

以上说明，对同一数的近似，绝对误差越小，有效数字不会减少；有效数字增加，则绝对误差一定减少．相对误差与有效数字之间的关系有如下定理.

定理 1　设近似值 $x = 10^m \times (\pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n), a_1 \neq 0$，则有下面结论:

(1) 如果 x 有 n 位有效数位，则其相对误差限 $\varepsilon_r \leqslant \dfrac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$；

(2) 如果 $\varepsilon_r \leqslant \dfrac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1}$，则 x 有 n 位有效数位.

证明　(1) 由 x 具有 n 位有效数位知，其绝对误差 $|e(x)| \leqslant \dfrac{1}{2} \times 10^{m-n}$，而其相对误差

$$
|e_r| = \left|\frac{e(x)}{x}\right| \leqslant \frac{1}{2|x|} \times 10^{m-n} \leqslant \frac{1}{2|10^m \times 0.a_1|} \times 10^{m-n} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}.
$$

(2) $|x| = 10^m \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n \leqslant 10^{m-1} \times (a_1+1)$，由条件 $\varepsilon_r \leqslant \dfrac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1}$，则

$$
|x - x^*| = \frac{|x - x^*|}{|x|} \times |x| \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} \times 10^{m-1} \times (a_1+1) = \frac{1}{2} \times 10^{m-n},
$$

由定义 3 知 x 具有 n 位有效数字.

例 1.2　要使 $\sqrt{10}$ 的近似值的相对误差限不大于 0.1%，要取几位有效数字?

解　设取 n 位有效数字，由定理 1 有 $|e_r| \leqslant \dfrac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$，而 $\sqrt{10} \approx 3.1\cdots$，即 $a_1 = 3$，要使 $|e_r| \leqslant 0.001$，即 $\dfrac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1} \leqslant 0.001$，解之得 $n \geqslant 4$，此时若 $\sqrt{10}$ 的近似值取 4 位有效数字，则其相对误差限小于 0.1%，即由开方表得 $\sqrt{10} \approx 3.162$.