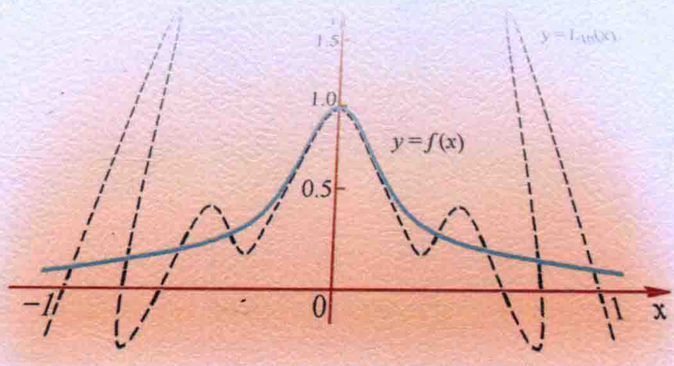
高等学校规划教材

GAODENG XUEXIAO GUIHUA JIAOCAI

数值分析

（第2版）

张铁　阎家斌　编



冶金工业出版社

http://www.cnmip.com.cn

高等学校规划教材

数值分析

（第2版）

张　铁　阎家斌　编

北　京
冶金工业出版社
2007

内 容 提 要

本书是为工科专业研究生的数值分析课程编写的教材，主要介绍计算机上常用的数值计算方法，内容包括线性方程组的数值解法，非线性方程（组）求根，矩阵特征值和特征向量的计算，函数的插值与逼近，数值积分，求解常微分方程和偏微分方程的差分方法等。书中着重阐述了各种数值方法的基本思想和基本原理，注重基本方法的掌握和运用，同时在理论上也作了必要的分析和论证。书中各章节均附有习题和参考答案，并配有上机计算实验题目。

本书也可作为运用计算机进行科学计算工作的工程技术人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

数值分析/张铁，阎家斌编. —2 版. —北京：冶金工业出版社，2007.3

高等学校规划教材

ISBN 978-7-5024-4186-9

Ⅰ. 数…　Ⅱ. ①张…　②阎…　Ⅲ. 数值计算　Ⅳ. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2007）第 007302 号

出 版 人　曹胜利（北京沙滩嵩祝院北巷 39 号，邮编 100009）

责任编辑　杨　敏　美术编辑　李　心

责任校对　王永欣　李文彦　责任印制　丁小晶

ISBN 978-7-5024-4186-9

北京兴顺印刷厂印刷；冶金工业出版社发行；各地新华书店经销

2001 年 1 月第 1 版，2007 年 3 月第 2 版，2007 年 3 月第 5 次印刷

148mm×210mm；10.75 印张；337 千字；331 页；11001－15000 册

22.00 元

冶金工业出版社发行部　电话：(010)64044283　传真：(010)64027893

冶金书店　地址：北京东四西大街 46 号(100711)　电话：(010)65289081

第 2 版前言

伴随着计算机技术的飞速发展，科学与工程计算已经成为最重要的科学研究方法和手段之一。科学与工程计算是计算机技术与计算数学理论相结合的产物，本书则是介绍这一领域中最基本的理论、知识和方法的入门教材。本书第 1 版自 2001 年出版以来，共印刷 4 次，受到师生的欢迎。随着科学技术的进步，新的问题和需求不断出现，经过五年的教学实践，我们感到本书在内容安排方面需要调整、补充，以进一步满足工程实际应用的需要。

本书在保持第 1 版的主要内容和特点的基础上，增减了部分章节的内容，例如，增加了有理插值、特殊积分和刚性方程组等内容，在内容叙述和例题选取上也作了适当的改动，使之更便于教学。为了加强和培养学生上机计算解决实际问题的能力，书中对一些最常用的数值方法给出了算法程序，并配备了上机计算实验题目。

本书内容仍分九章，其中基本内容部分（不打 * 号的章节）的讲授约需 56 学时。本书第 1 ~ 3 章、第 8 章、第 9 章由张铁修订，第 4 ~ 7 章由阎家斌修订，齐秉寅教授审阅了初稿。

本书的出版得到了东北大学研究生院出版资金的资助，在此表示衷心感谢。

编　者

2006 年 10 月

第 1 版前言

本书是为工科硕士研究生及非数学专业本科生编写的教材。读者只需具有高等数学和线性代数的基本知识就可阅读本书。编写本书的目的是使读者能够掌握数值分析的基本理论、基本思想和基本方法，并为进一步学习和研究科学计算理论与方法打下良好基础。

本书内容的选取参照了 1991 年国家教委工科研究生数学课程教学指导小组制定的“工学硕士研究生数值分析课程教学基本要求”，着重介绍了科学和工程计算中常用的数值计算方法，阐明了各种数值方法的基本思想和原理，并作了适当的理论性分析。力求做到重概念、重方法、重应用、重能力的培养。为了便于学生的学习和有关人员的应用，书中对一些最常用的数值方法也给出了算法程序。

本书共分 9 章，讲授全书约需 90 学时，其中基本部分约需 60 学时，选学内容（带 * 号的章、节）约需 30 学时。教师可根据不同学生的实际情况，对选学内容进行取舍，这不会影响本课程的基本要求。

本书第 1 ~ 3 章、第 8 章、第 9 章由张铁编写，第 4 ~ 7 章由阎家斌编写，齐秉寅教授对全书作了仔细的审阅，并提出了宝贵的意见和建议。本书编写也得到了东北大学研究生院的大力支持，谨此向他们表示衷心的感谢。

限于水平，本书中难免存在一些缺点和错漏之处，恳请读者批评指正。

编　者

2000 年 8 月

目　录

1 绪　　论

1.1 数值分析研究的对象和内容

数值分析是研究科学计算中各种数学问题求解的数值计算方法. 众所周知，传统的科学研究方法有两种：理论分析和科学实验. 今天，伴随着计算机技术的飞速发展和计算数学理论的日益成熟，科学计算已经成为第三种科学研究的方法和手段. 用电子计算机进行科学计算，解决实际问题，其基本过程如下：

实际问题 → 数学模型 → 数值计算方法 → 程序设计 → 计算机计算求出结果

根据数学模型提出的问题，建立求解问题的数值计算方法并进行方法的理论分析，直到编制出算法程序上机计算得到数值结果，以及对结果进行分析，这一过程就是数值分析研究的对象和内容. 数值分析是计算数学学科的一个分支，它不像纯数学那样只研究数学本身的理论，而是把理论与计算紧密结合，着重研究面向计算机的、能够解决实际问题的数值计算方法及其理论. 具体地说，数值分析首先要构造可求解各种数学问题的数值计算方法；然后分析方法的可靠性，即按此方法计算得到的解是否可靠，与精确解之差是否很小，以确保计算解的有效性；其次，要分析方法的效率，分析比较求解同一问题的各种方法的计算量和存贮量，以便使用者根据各自的情况采用高效率的方法，节省人力、物力和时间，这样的分析是数值分析的一个重要部分. 应当指出，数值计算方法的构造和分析是密切相关不可分割的.

对于给定的数学问题，常常可以提出各种各样的数值计算方法. 如何评价这些方法的优劣呢？一般说来，一个好的方法应具有如下特点：

（1）结构简单，易于计算机实现；

（2）有可靠的理论分析，理论上可保证方法的收敛性和数值稳定性；

(3) 计算效率高，时间效率高是指计算速度快，节省时间；空间效率高是指节省存贮量；

(4) 经过数值实验检验，即一个算法除了理论上要满足上述三点外，还要通过数值试验来证明是行之有效的.

在学习数值分析方法时，我们要注意掌握数值分析的基本原理和思想，要注意方法处理的技巧及其与计算机的结合，要重视误差分析、收敛性及稳定性的基本理论. 此外，还要通过应用数值方法编程计算来提高使用各种数值方法解决实际问题的能力.

目前，数值计算方法与计算机技术相结合已深入到计算物理、计算力学、计算化学、计算生物学、计算经济学等各个领域，计算机上使用的数值计算方法已浩如烟海. 本书只限于介绍科学计算中最基本的数值计算方法. 主要内容有：线性代数方程组的数值解法，非线性方程和方程组的迭代解法，矩阵特征值和特征向量的计算，函数的插值与逼近，数值积分，常微分方程和偏微分方程的有限差分方法等. 本书是以工科各专业研究生为主要对象编写的，目的是使读者获得数值分析的基本概念和思想，掌握适用于电子计算机的常用算法，具有基本的理论分析和实际计算能力.

1.2 误差来源和分类

在科学与工程计算中，估计计算结果的精度是十分重要的，而影响精度的是各种各样的误差. 误差按照它们的来源可分为模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差四种.

(1) 模型误差 反映实际问题有关量之间关系的数学公式或方程，即数学模型，通常只是近似的. 由此产生的数学模型的解与实际问题解之间的误差称为**模型误差**.

(2) 观测误差 数学模型中包含的一些物理参数，它们的值往往是通过观测和实验得到的，难免带有误差. 这种观测数据与实际数据之间的误差称为**观测误差**.

(3) 截断误差 求解数学模型所用的数值方法一般是一种近似方法，只能得到数学模型的近似解. 这种因近似方法的使用所产生的误差称为**截断误差**或**方法误差**. 例如，利用 **Taylor（泰勒）公式**，函数 e^x 可表示为

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \frac{x^{n+1}}{(n+1)!}e^{\theta x}, \quad 0 < \theta < 1$$

对给定的 x，要计算函数值 e^x时，可采用近似公式

$$e^x \approx I = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!}$$

那么此近似公式的截断误差为

$$R = e^x - I = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!}e^{\theta x}, \quad 0 < \theta < 1$$

(4) 舍入误差　由于计算机的字长有限，参加运算的数据以及运算结果在计算机上存放时，计算机会按舍入原则舍去每个数据在字长之外的数字，从而产生误差，这种误差称为**舍入误差**或**计算误差**. 例如，在十进制十位的限制下，会出现

$$(1.000002)^2 - 1.000004 = 0$$

这个结果是不准确的，准确的结果应是4×10^{-12}，这里所产生的误差就是计算舍入误差.

在数值分析中，一般总假定数学模型是准确的，因而不考虑模型误差和观测误差，主要研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响.

1.3 绝对误差、相对误差与有效数字

设 x 是精确值 x^* 的一个近似值. 记

$$e = x^* - x$$

称 e 为近似值 x 的**绝对误差**，简称**误差**. 如果 ε 为$|e|$的一个上界，即

$$|e| \leqslant \varepsilon$$

则称 ε 为近似值 x 的**绝对误差限**或**绝对误差界**，简称**误差限**或**误差界**. 精确值 x^*，近似值 x 和误差限 ε 三者的关系是：$x - \varepsilon \leqslant x^* \leqslant x + \varepsilon$，通常记为

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

例如，$x = 1.414$ 作为无理数$\sqrt{2}$的一个近似值，它的绝对误差是

$$e = \sqrt{2} - 1.414$$

易知

$$|e| \leqslant 0.00022$$

所以，$x = 1.414$ 作为 $x^* = \sqrt{2}$ 的近似值，它的一个绝对误差限为 $\varepsilon = 0.00022$.

用绝对误差来刻画近似值的精确程度是有局限的，因为它没有反映出它相对于精确值的大小或它占精确值的比例. 例如，两个量 x^* 和 y^* 与它们的近似值 x 和 y 分别为

$$x^* = 10, \qquad x = 10 \pm 1$$

$$y^* = 1000, \quad y = 1000 \pm 3$$

则有误差限

$$\varepsilon_x = 1, \quad \varepsilon_y = 3$$

虽然 ε_y 是 ε_x 的三倍，但在 1000 内差 3 显然比 10 内差 1 更精确些. 这说明一个近似值的精确程度除了与绝对误差有关外，还与精确值的大小有关. 记

$$e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$$

称 e_r 为近似值 x 的**相对误差**. 由于 x^* 通常是未知的，实际使用时总是将 x 的相对误差取为

$$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x^* - x}{x}$$

$|e_r|$ 的上界，即

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|x|}$$

称 ε_r 为近似值 x 的**相对误差限**或**相对误差界**. 显然有 $|e_r| \leqslant \varepsilon_r$.

例 1-1 设 $x = 2.18$ 是由精确值 x^* 经过四舍五入得到的近似值. 问: x 的绝对误差限 ε 和相对误差限 ε_r 各是多少?

解 根据四舍五入原则，应有

$$x^* = x \pm 0.005$$

所以

$$\varepsilon = 0.005, \quad \varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|x|} = \frac{0.005}{2.18} \approx 0.23\%$$

凡是由精确值经过四舍五入得到的近似值，其绝对误差限等于该近似值末数位的半个单位.

定义 1.1　设数 x 是数 x^* 的近似值. 如果 x 的绝对误差限是它的某一数位的半个单位，并且从 x 左起第一个非零数字到该数位共有 n 位，则称这 n 个数字为 x 的**有效数字**，也称用 x 近似 x^* 时**具有 n 位有效数字**.

例 1-2　已知下列近似值的绝对误差限都是 0.005，

$$a = 3.14, \quad b = -0.0257, \quad c = 0.0031$$

问：这些近似值有几位有效数字?

解　由于 0.005 是近似值小数点后第二个数位的半个单位，则根据定义 1.1 可知：a 有三位有效数字 3，1，4；b 有一位有效数字 2；c 没有有效数字.

数 x 总可以写成如下形式

$$x = \pm 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_k \times 10^m$$

式中，m 是整数，$\alpha_i (i = 1,2,\cdots,k)$ 是 0 到 9 中的一个数字，$\alpha_1 \neq 0$. 根据定义 1.1 容易推得，x 作为 x^* 的近似具有 n 位($n \leqslant k$) 有效数字，当且仅当

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \tag{1.1}$$

由此可知，近似值的有效数字越多，它的绝对误差就越小，近似值的精确程度也就越高.

例 1-3　为了使 $x^* = \sqrt{20}$ 的近似值的绝对误差小于 10^{-3}，问应取几位有效数字?

解　由于 $\sqrt{20} = 4.4\cdots$，则近似值 x 可写为

$$x = 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_k \times 10, \quad \alpha_1 = 4 \neq 0$$

根据式 (1.1)，令

$$\frac{1}{2} \times 10^{1-n} \leqslant 10^{-3}$$

故取 $n = 4$，即取四位有效数字. 此时 $\sqrt{20} = 4.472135\cdots$的具有四位有效数字的近似值为 $x = 4.472$，它满足此题要求.

值得注意，按有效数字概念，数 1.14001 的两个近似值 1.14 和 1.1400 是有区别的，前者有三位有效数字，后者有五位有效数字，因而后者的精确程度比前者更高.

精确值的有效数字可认为有无限多位.

1.4 数值计算中的若干原则

在计算机上进行数值计算时，由于计算机的字长有限，只能保留有限位有效数字，因而每一步计算都可能产生误差，比如计算舍入误差. 在反复多次的计算过程中，将产生误差的传播和积累. 当误差积累过大时，会导致计算结果失真. 因此，为减少和控制舍入误差的影响，设计算法时应遵循如下一些原则.

(1) **避免两个相近的数相减** 在数值计算中，两个相近的数相减会使有效数字受到损失，有效数位减少. 例如，设 $x=5.143$，$y=5.138$ 都是具有四位有效数字的近似值，但 $x-y=0.005$ 却至多有一位有效数字.

事实上，如果 x^*，y^* 的近似值分别为 x，y，则 $z=x-y$ 是 $z^*=x^*-y^*$ 的近似值. 此时，相对误差满足估计

$$|e_r(z)|=\left|\frac{z^*-z}{z}\right|\leqslant\left|\frac{x}{x-y}\right||e_r(x)|+\left|\frac{y}{x-y}\right||e_r(y)|$$

可见，当 x 与 y 非常接近时，$x-y$ 作为 x^*-y^* 的近似值其相对误差有可能很大.

在数值计算中，如果遇到两个相近的数相减运算，可考虑能否改变一下算法以避免两数相减. 例如：

当 x_1 与 x_2 接近时，可有

$$\log x_1-\log x_2=\log\frac{x_1}{x_2}$$

当 x 接近零时，可有

$$1-\cos x=2\sin^2\frac{x}{2}$$

当 $x>0$ 且很大时，可有

$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$$

如果找不到适当方法，可考虑在计算机上采用双倍字长计算，以增加有效数字，提高精度.

(2) **防止大数"吃掉"小数** 参加计算的数，有时数量级相差很大，如果不注意采取相应措施，在它们的加、减法运算中，绝对值很小的数往往被绝对值很大的数"吃掉"，不能发挥其作用，造成计算结果失真. 例如，在八位十进制计算机上计算

$$A = 63281312 + 0.2 + 0.4 + 0.4$$

此时，按照加法浮点运算的对阶规则，应有

$$A = 0.63281312 \times 10^8 + 0.000000002 \times 10^8 + 0.000000004 \times 10^8 + 0.000000004 \times 10^8$$

由于计算机只能存放八位十进制数，上式中后三个数在计算机上变成"机器零"，计算结果为

$$A = 0.63281312 \times 10^8 = 63281312.0$$

即相对小数 0.2 和 0.4 已被大数 63281312 吃掉，计算结果失真. 如果改变计算次序，先将三个小数相加得到数 1，再进行加法运算，就可避免上述现象. 此时

$$\begin{aligned} A &= 63281312 + (0.2 + 0.4 + 0.4) \\ &= 63281312 + 1.0 = 63281313.0 \end{aligned}$$

(3) **绝对值太小的数不宜作除数** 在计算过程中，用绝对值很小的数作除数会使商的数量级增加. 当商过大时，或者其数值超出计算机表示的范围引发"溢出"现象，或者作为一个大数它将吃掉参与运算的一些小数. 此外，小数作除数也可能放大商的绝对误差. 假设 x^* 和 y^* 的近似值分别是 x 与 y，则 $z^* = \frac{x^*}{y^*}$ 的近似值是 $z = \frac{x}{y}$. 此时，z 的绝对误差

$$\begin{aligned} |e(z)| = |z^* - z| &= \left| \frac{(x^* - x)y + x(y - y^*)}{y^* y} \right| \\ &\approx \frac{|y||e(x)| + |x||e(y)|}{|y|^2} \end{aligned}$$

可见，当 $|y|$ 很小时，z 的绝对误差可能很大.