普通高等教育“十一五”国家级规划教材

李庆扬
王能超
易大义
编

数值分析

第5版

清华大学出版社

普通高等教育“十一五”国家级规划教材

数值分析

第5版

李庆扬 王能超 易大义 编

清华大学出版社
北京

内容简介

本书是为理工科大学各专业普遍开设的“数值分析”课程编写的教材．其内容包括插值与逼近，数值微分与数值积分，非线性方程与线性方程组的数值解法，矩阵的特征值与特征向量计算，常微分方程数值解法．每章附有习题并在书末给出了部分答案，每章还附有复习与思考题和计算实习题．全书阐述严谨，脉络分明，深入浅出，便于教学．

本书也可作为理工科大学各专业研究生学位课程的教材，并可供从事科学计算的科技工作者参考．

图书在版编目（CIP）数据

数值分析/李庆扬，王能超，易大义编．—5版．—北京：清华大学出版社，2008.12

ISBN 978-7-302-18565-9

Ⅰ．数…　Ⅱ．①李…②王…③易…　Ⅲ．数值计算—高等学校—教材　Ⅳ．O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 142264 号

责任编辑：刘　颖　王海燕
责任校对：赵丽敏
责任印制：何　芊
出版发行：清华大学出版社　　地　址：北京清华大学学研大厦 A 座
http://www.tup.com.cn　　邮　编：100084
社 总 机：010-62770175　　邮　购：010-62786544
投稿与读者服务：010-62776969，c-service@tup.tsinghua.edu.cn
质 量 反 馈：010-62772015，zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn
印 刷 者：北京季蜂印刷有限公司
装 订 者：三河市李旗庄少明装订厂
经　销：全国新华书店
开　本：185×230　印　张：21.25　字　数：460 千字
版　次：2008 年 12 月第 5 版　　印　次：2008 年 12 月第1 次印刷
印　数：1～5000
定　价：28.00 元

本书如存在文字不清、漏印、缺页、倒页、脱页等印装质量问题，请与清华大学出版社出版部联系调换。联系电话：(010)62770177 转 3103　　产品编号：025731-01

第 5 版前言

本书第 5 版已列入普通高等教育“十一五”国家级规划教材，主要作为理科数学类专业本科生及其他理工科硕士研究生“数值分析”课程的教材．根据“数值分析”课程教学大纲的要求，对第 4 版做了适当修改，但仍保留原教材的基本结构和大部分内容．主要修改部分如下：

(1) 在内容上精简了一些较少使用的算法及一些较繁杂的推导和证明；加强了算法基本思想的分析和使用的说明；另外还增加了一些新内容，如自适应求积和重积分的计算，解线性方程组的共轭梯度法，代数方程求根的病态分析，常微分方程数值解法中多步法的收敛性与稳定性分析，刚性问题等．

(2) 评注中增加了一些历史发展及使用数学软件的说明；每章增加了复习与思考题，这有助于读者加深对基本内容的理解，促进对所讲算法的掌握；另外为加强使用计算机解题练习，增添了一些计算实习题．

(3) 根据本书新版的特点，删去了并行算法的附录，有关并行算法目前有很多普及的入门著作，需要了解的可自己学习．另外，本书推荐读者使用 MATLAB 语言及数学库，有关 MATLAB 的使用本书也不做介绍，目前也有很多介绍的书籍可供参考．

本书第 5 版主要由李庆扬负责修改，是在清华大学出版社及本书编辑刘颖博士推动和支持下完成的，还得到清华大学给予的经费资助，作者对他们的支持和帮助表示衷心感谢．

希望使用本书的老师和同学对本书存在的问题给予批评指正．

作　者

2008 年元旦

第 4 版前言

本书由华中理工大学出版社出版至今已 20 多年，重新修订的第 3 版也已 15 年多了，印数已近 20 万册，1988 年获国家教委优秀教材二等奖，表明本教材在国内是受欢迎的，仍有存在的价值. 为使本书适应新世纪的要求，我们认为对本书重新进行修改是完全必要的. 这次修改除保留本书原有风格和基本内容外，修改的原则和内容有以下几点：

(1) 随着计算机技术的发展和普及，数值分析的原理与方法在各学科中的应用越来越多. 因此，我们将原来主要面向应用数学专业扩大为面向理工科大学中对数学要求较高的专业的本科生，同时也兼顾到一些院校为各专业研究生开设的"数值分析"学位课程.

(2) 由于科学及计算机的发展，计算机算法语言的多样化及数学软件的普及，要求"数值分析"课程更强调算法原理及理论分析，而对具体算法及编程已有现成数学软件，如 MATLAB 等，方便了读者使用. 因此，我们对某些算法做了精简，另外也删去了一些较少使用的算法，增加一些实际应用中较重要的内容，如帕德逼近，解线性方程组的 QR 方法及超定方程组最小二乘解，非线性方程组求解的牛顿法，解刚性常微分方程的基本概念等. 考虑到很多高校配备了大型多处理机，具备了进行并行计算的条件，故增加了"并行算法及其基本概念"的附录，便于需要进行并行计算的读者对此有初步的了解.

(3) 学习本课程仍应加强上机计算实习，为此，新版增加了计算实习的题目，便于教学，教师可根据实际条件让学生选做其中的 3～5 题. 由于计算机算法语言发展很快，故不规定用哪种算法语言，目前我们向读者推荐的是集成化软件包 MATLAB.

(4) 统一协调，改正错误. 本书第 3 版存在一些不协调之处和各种错误. 为保证新版质量，由李庆扬负责对全书整理加工，统一规格并改正旧版中的各种错误.

作者将新版"数值分析"交清华大学出版社重新出版，出版社委派曾多次使用本书的计算数学博士刘颖负责编辑加工，他不但改正了本书的一些错误并对本书修改提出了宝贵意见，提高了本书新版的质量，出版社还在较短时间使本书新版在开学前与读者见面，我们对清华大学出版社及刘颖博士表示衷心感谢.

作　者

2001 年 5 月

目　　录

第1章　数值分析与科学计算引论

1.1　数值分析的对象、作用与特点

1.1.1　数学科学与数值分析

数学是科学之母，科学技术离不开数学，它通过建立数学模型与数学产生紧密联系，数学又以各种形式应用于科学技术各领域. 数值分析也称计算数学，是数学科学的一个分支，它研究用计算机求解各种数学问题的数值计算方法及其理论与软件实现，用计算机求解科学技术问题通常经历以下步骤：

① 根据实际问题建立数学模型.

② 由数学模型给出数值计算方法.

③ 根据计算方法编制算法程序（数学软件）在计算机上算出结果.

第①步建立数学模型通常是应用数学的任务，而第②，③步就是计算数学的任务，也就是数值分析研究的对象，它涉及数学的各个分支，内容十分广泛. 作为"数值分析"课程，只介绍其中最基本、最常用的数值计算方法及其理论，它包括插值与数据逼近，数值微分与积分，线性方程组的数值求解，非线性方程与方程组求解，特征值计算，常微分方程数值解等. 它们都是以数学问题为研究对象，只是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，着重研究数学问题的数值算法及其理论. 与其他数学课程一样，数值分析也是一门内容丰富，研究方法深刻，有自身理论体系的课程，既有纯数学高度抽象性与严密科学性的特点，又有应用广泛性与实际试验高度技术性的特点，是一门与计算机使用密切结合，实用性很强的数学课程.

1.1.2　计算数学与科学计算

几十年来由于计算机及科学技术的快速发展，求解各种数学问题的数值方法也愈来愈多地应用于科学技术各领域，新的计算性交叉学科分支不断涌现，如计算力学，计算物理，计算化学，计算生物学，计算经济学等，统称科学计算，它涉及数学的各个分支，研究它们适合于计算机编程的算法就是计算数学的研究范畴. 计算数学是各种计算性学科的共性基础，兼有基础性、应用性和边缘性的数学学科. 科学计算是一门工具性、方法性、边缘性的学科，发展迅速. 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. 在实际应用中导出的数学模型其完备形式往往不能方便地求出精确解，于是只能转化为简化模型求其数值解，如将复杂的非线性模型忽略一些因素而简化为可以求出精确解

的线性模型，但这样做往往不能满足近似程度的要求. 因此使用数值方法直接求解做较少简化的模型，可以得到满足近似程度要求的结果，使科学计算发挥更大的作用，这正是得益于计算机与计算数学的快速发展.

1.1.3　计算方法与计算机

数值分析也称计算方法，它与计算工具发展密切相关. 在电子计算机出现以前，计算工具只有算盘，算图，算表，算尺和手摇及电动计算机，计算方法只能计算规模较小的问题. 计算方法是数学的一个组成部分，很多方法都与当时的数学家名字相联系，如牛顿(Newton)插值公式，方程求根的牛顿法，解线性方程组的高斯(Gauss)消去法，多项式求值的秦九韶算法，计算积分的辛普森(Simpson)公式等. 这表明计算方法就是数学的一部分，它没有形成单独的学科分支. 只是在计算机出现以后，才使计算方法迅速发展并形成数学科学的一个独立分支——计算数学.

当代计算能力的大幅度提高既来自计算机的进步，也来自计算方法的进步，两者发展相辅相成又互相促进. 例如，1955 年至 1975 年的 20 年间计算机的运算速度提高数千倍，而同一时期解决一定规模的椭圆形偏微分方程计算方法的效率提高约一百万倍，说明计算方法的进步对提高计算能力的贡献更为重要，由于计算规模的不断扩大和计算方法的发展启发了新的计算机体系结构，诞生并发展了并行计算机. 而计算机的更新换代也对计算方法提出了新的标准和要求. 自计算机诞生以来，经典的计算方法业已经历了一个重新评价、筛选、改造和创新的过程，与此同时涌现了许多新概念、新课题和能发挥计算机解题潜力的新方法，这就构成了现代意义的计算数学.

1.1.4　数值问题与算法

能用计算机计算的“数值问题”是指输入数据(即问题中的自变量与原始数据)与输出数据(结果)之间函数关系的一个确定而无歧义的描述，输入输出数据可用有限维向量表示. 根据这种定义，“数学问题”有的是“数值问题”，如线性方程组求解. 也有不是“数值问题”的“数学问题”，如常微分方程$\frac{dy}{dx}=x^2+y^2$，$y(0)=0$，它不是数值问题，因为输出不是数据而是连续函数 $y=y(x)$. 但只要将连续问题离散化，使输出数据是 $y(x)$ 在求解区间$[a,b]$上的离散点 $x_i=a+ih(i=1,2,\cdots,n)$上的近似值，就是“数值问题”. 数值问题可用各种数值方法求解，这些数值方法就是算法. 计算方法就是研究各种“数值问题”的算法.

计算的基本单位称为算法元，它由算子、输入元和输出元组成. 算子可以是简单操作，如算术运算(+，−，×，/)、逻辑运算，也可以是宏操作，如向量运算、数组传输、基本初等函数求值等；输入元和输出元可分别视为若干变量或向量. 由一个或多个算法元组成一个进程，它是算法元的有限序列，一个数值问题的算法是指按规定顺序执行一个或多个完整的进程. 通过它们将输入元变换成一个输出元. 面向计算机的算法可分为串行算法和并行算法

两类，只有一个进程的算法适合于串行计算机，称为串行算法．有两个以上进程的算法适合于并行计算机，称为并行算法．对于一个给定的数值问题可以有许多不同的算法，它们都能给出近似答案，但所需的计算量和得到的精确程度可能相差很大．一个面向计算机，有可靠理论分析且计算复杂性好的算法就是一个好算法．理论分析主要是连续系统的离散化及离散型方程的数值问题求解，它包括误差分析、稳定性、收敛性等基本概念，它刻画了算法的可靠性、准确性．计算复杂性包含计算时间复杂性与存储空间复杂性两个方面．在同一规模、同一精度条件下，计算时间少的算法为计算时间复杂性好，而占用内存空间少的算法为存储空间复杂性好，它实际上就是算法中计算量与存储量的分析．对解同一问题的不同算法其计算复杂性可能差别很大，例如解 n 阶的线性方程组，若依照克拉默(Cramer)法则用行列式解法要算 $n+1$ 个 n 阶行列式的值，对 $n=20$ 的线性方程组就需要 9.7×10^{21} 次乘除法运算，若用每秒亿次的计算机也要算 30 万年，这是无法实现的，若用高斯列主元消去法(见第 5 章)则只需做 3060 次乘除运算．且 n 愈大相差就愈大，这表明算法研究的重要性，也说明只提高计算机速度，而不改进和选用好的算法是不行的．

综上所述，数值分析是研究数值问题的算法，概括起来有四点：

第一，面向计算机，要根据计算机的特点提供切实可行的有效算法．即算法只能包括加、减、乘、除运算和逻辑运算，这些运算是计算机能直接处理的运算．

第二，有可靠的理论分析，能任意逼近并达到精度要求，对近似算法要保证收敛性和数值稳定性，还要对误差进行分析．这些都建立在相应数学理论的基础上．

第三，要有好的计算复杂性，时间复杂性好是指节省计算时间，空间复杂性好是指节省存储空间，这也是建立算法要研究的问题，它关系到算法能否在计算机上实现．

第四，要有数值实验，即任何一个算法除了从理论上要满足上述三点外，还要通过数值试验证明是行之有效的．

根据“数值分析”课程的特点，学习时我们首先要注意掌握方法的基本原理和思想，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；其次，要通过例子，学习使用各种数值方法解决实际计算问题；最后，为了掌握本课的内容，还应做一定数量的理论分析与计算练习．由于本课内容包括了微积分、线性代数、常微分方程的数值方法，读者必须掌握这几门课中与数值分析相关的基本内容，才能学好这门课程．

1.2 数值计算的误差

1.2.1 误差来源与分类

用计算机解决科学计算问题首先要建立数学模型，它是对被描述的实际问题进行抽象、简化而得到的，因而是近似的．我们把数学模型与实际问题之间出现的这种误差称为**模型误差**．只有实际问题提法正确，建立数学模型时又抽象、简化得合理，才能得到好的结果．

由于这种误差难于用数量表示，通常都假定数学模型是合理的，这种误差可忽略不计，在“数值分析”中不予讨论. 在数学模型中往往还有一些根据观测得到的物理量，如温度、长度、电压等，这些参量显然也包含误差. 这种由观测产生的误差称为**观测误差**，在“数值分析”中也不讨论这种误差. 数值分析只研究用数值方法求解数学模型产生的误差.

当数学模型不能得到精确解时，通常要用数值方法求它的近似解，其近似解与精确解之间的误差称为**截断误差**或**方法误差**. 例如，可微函数 $f(x)$ 用泰勒(Taylor)多项式

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

近似代替，则数值方法的截断误差是

$$R_n(x)=f(x)-P_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1},\quad \xi\text{ 在 }0\text{ 与 }x\text{ 之间}.$$

有了求解数学问题的计算公式以后，用计算机做数值计算时，由于计算机的字长有限，原始数据在计算机上表示时会产生误差，计算过程又可能产生新的误差，这种误差称为**舍入误差**. 例如，用 3.141 59 近似代替 π，产生的误差

$$R=\pi-3.14159=0.0000026\cdots$$

就是舍入误差.

此外由原始数据或机器中的十进制数转化为二进制数产生的初始误差对数值计算也将造成影响，分析初始数据的误差通常也归结为舍入误差.

研究计算结果的误差是否满足精度要求就是误差估计问题，本书主要讨论算法的截断误差与舍入误差，而截断误差将结合具体算法讨论. 为分析数值运算的舍入误差，先要对误差基本概念做简单介绍.

1.2.2 误差与有效数字

定义1 设 x 为准确值，x^* 为 x 的一个近似值，称 $e^*=x^*-x$ 为近似值的**绝对误差**，简称**误差**.

通常我们不能算出准确值 x，也不能算出误差 e^* 的准确值，只能根据测量工具或计算情况估计出误差的绝对值不超过某正数 ε^*，也就是误差绝对值的一个上界. ε^* 叫做近似值的**误差限**，它总是正数. 例如，用毫米刻度的米尺测量一长度 x，读出和该长度接近的刻度 x^*，x^* 是 x 的近似值，它的误差限是 0.5 mm，于是 $|x^*-x|\leqslant 0.5$ mm；如读出的长度为 765 mm，则有 $|765-x|\leqslant 0.5$. 从这个不等式我们仍不知道准确的 x 是多少，但知道 $764.5\leqslant x\leqslant 765.5$，即 x 在区间[764.5,765.5]内.

对于一般情形，$|x^*-x|\leqslant\varepsilon^*$，即

$$x^*-\varepsilon^*\leqslant x\leqslant x^*+\varepsilon^*,$$

这个不等式有时也表示为 $x=x^*\pm\varepsilon^*$.

误差限的大小还不能完全表示近似值的好坏. 例如，有两个量 $x=10\pm1$，$y=1000\pm5$，