工科研究生教材·数学系列

应用数值分析

YINGYONG SHUZHI FENXI

郑咸义 姚仰新 雷秀仁 陆子强 黄凤辉 编

华南理工大学出版社

工科研究生教材·数学系列

应用数值分析

郑咸义　姚仰新　雷秀仁　陆子强　黄凤辉　编

华南理工大学出版社
·广州·

内 容 简 介

本书包括通用的数值分析(或称计算方法)课程的8个基本论题:插值、函数逼近、数值微积分、矩阵特征值计算、线性代数方程组、非线性方程与方程组、常微分方程和偏微分方程的数值方法.

本书的取材着眼于工科研究生可能的应用需求.除了坚持内容的科学性、严谨性外,写法上注意强调各类数值问题的提法,有助于研究生利用所学方法和理论去解决具体的应用问题;书中概念清晰,方法和公式的来龙去脉清楚,理论结果尽量深入浅出并联系应用,较难理解或内涵较丰富的部分,适当增加例题或给出启发式的引导;对每个论题划分出“基本教学内容”和“较深入内容或参考材料”两部分,给教学和学习(包括自学)提供了粗略指引.这是一本好教、好学并保证应有科学水平的研究生教材.

本书适合工科硕士生、非数学类的理科硕士生和工程硕士生作为一学期课程教材,也可供工学博士生和科学/工程计算工作者参考.

图书在版编目(CIP)数据

应用数值分析/郑咸义,姚仰新,雷秀仁等编.—广州:华南理工大学出版社,2008.8
(工科研究生教材·数学系列)
ISBN 978-7-5623-2665-6

Ⅰ.应… Ⅱ.①郑…②姚…③雷 Ⅲ.数值计算-研究生-教材 Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第098555号

总 发 行:华南理工大学出版社(广州五山华南理工大学17号楼,邮编510640)
营销部电话:020-87113487 87110964 87111048(传真)
E-mail:z2cb@scut.edu.cn **http://www.scutpress.com.cn**
责任编辑:胡 元
印 刷 者:广州市穗彩彩印厂
开 本:787mm×1092mm 1/16 **印张**:26.5 **字数**:680千
版 次:2008年8月第1版 2008年8月第1次印刷
印 数:1~3000册
定 价:43.50元

总　序

研究生教材建设是研究生教育的基础工程,是提高研究生培养质量的重要环节.自1978年恢复研究生招生以来,我校先后编写了供工科研究生使用的数学教材或教学参考书,其中一些教材出版后,不仅本校使用,许多兄弟院校也选作教材或教学参考书,受到读者好评;另有一些教材则采用讲义形式在校内印发、使用.为适应研究生教育事业迅速发展的需求,我校决定在原有"工科研究生用书"的基础上,通过修订和新编,出版"工科研究生教材·数学系列".

现代科学技术的发展,特别是计算机技术的高度发展,使得数学科学在人类生产、管理及科学研究中发挥越来越突出的促进作用,也使得人类社会生活的各个领域使用数学技术成为可能."工科研究生教材·数学系列"作为工科硕士研究生和博士研究生公共课的选用教材,我们希望每本教材既要介绍该学科分支的历史沿革与发展、基本理论和方法,又能反映该学科分支的最新成果.对于后者,主要是从基本思想和实际运用技巧方面进行概括和阐述.这就要求每本教材既要有严谨的解析论证,又要有概括性的分析和介绍,不宜过分追求教材内容的自我完备.

我校研究生教材建设(特别是公共数学课程教材建设)还处在不断完善过程中,限于学术水平和教学经验,本系列教材难免有疏漏和不足之处,恳请读者指正,以便日后修订时加以更正.

华南理工大学研究生院

2005年6月

前言

本书是为工科硕士研究生准备的、内容比较齐全的数值分析教材.同时,对非数学类的理科硕士生和工程硕士生也是适用的,甚至攻读工学博士的研究生也可从中找到需要的材料.

由于内容较多,我们尝试把每一个论题分为“基本教学内容”和“较深入内容或参考材料”两部分,这就为教学和学习(包括自学)提供了一个粗略的指引.大致来说,60学时左右的一学期课程可以在课堂教学中完成“基本教学内容”部分.或者,如常见的一种做法,屏蔽第8章和第10章(归不同专业选修)后作为最低限度的基本教学部分(或再加入少量较深入内容),也是可取的一种方案.这种方案还可作为“博士生入学考试数值分析课程”的参考.

这里“基本”的意思是,不仅从数值分析各个论题的内容结构上说是“基本”的,而且就学习这门课程的思维培养和基础训练来说也是“基本”的.有了这个部分,对于选修本课程的研究生来说,“较深入内容或参考材料”部分(按个人的专业需要选读)就不难迎刃而解了.至于书名在数值分析前面加上“应用”二字(数值分析本来就够应用的),其用意只是想传达这样的信息:本书的取材主要着眼于工科研究生可能的应用需求,对于诸如定理证明、理论的完整性和系统性则不会那么执著.

本书包括通用的数值分析(或称计算方法)课程的8个基本论题:插值、函数逼近、数值微积分、矩阵特征值计算、线性代数方程组、非线性方程与方程组、常微分方程和偏微分方程的数值方法.在编写过程中,除了坚持教材内容的科学性、严谨性外,在写作方式上注意如下方面:

一、强调各类数值问题的提法.只有充分理解每类问题是怎样提出来的、要解决什么问题、有什么相关背景,才有可能利用书中的方法和理论去解决具体的应用问题,否则,再多的方法、公式和定理也未必能有的放矢.这一点在教学过程中容易被忽视.

二、作为教材,我们力求写得概念清晰,方法和公式的来龙去脉交代清楚(重要的方法设计成计算机算法),理论结果(包括误差分析)尽量深入浅出并联系应用.对于较难理解或内涵较丰富的部分,适当增加例题或给出启发式的引导.

我们希望写成一本好教、好学,并保证应有科学水平的研究生教材.

本书由曾长期讲授本课程或目前正在讲授本课程的教师合作编写.他们是:郑咸义(兼主编)、姚仰新、雷秀仁、陆子强、黄凤辉.其中,郑咸义负责编写第1章、第2章2.1~2.5节、第3章3.1~3.5节、第4章4.1~4.5节和4.8节、第5章、第6章6.1~6.4节、第7章7.1~7.6节、第9章9.1~9.7节和9.9节;姚仰新负责编写第4章4.6节和4.7节、第7章7.7节和7.8节、第9章9.8节、第10章10.6节;雷秀仁负责编写第6章6.5节和6.6节;陆子强负责编写第8章;黄凤辉负责编写第2章2.6~2.8节、第3章3.6节和3.7节、第10章10.1~10.5节.

本教材的编写属于多个相关教研项目的计划.编者衷心感谢对本教材的编写给予指导和支持的我校研究生院、理学院应用数学系和国家工科数学课程教学基地以及对本教材的

出版给予支持和悉心编辑的华南理工大学出版社.

尽管我们组织了较多的人力,花了较多的时间和功夫,但完成的成果未必与此成正比.我们恳切期待使用本书的老师、研究生以及有关专家,对书中不妥和疏漏之处给予指正(请通过邮件联系我们),甚为感激.

编　者

2008年初于华南理工大学理学院应用数学系

邮箱地址:

mazhengx@scut.edu.cn (郑咸义)

mayxyao@scut.edu.cn (姚仰新)

maxlei@scut.edu.cn (雷秀仁)

ziq_lu@163.com (陆子强)

huangfh@scut.edu.cn (黄凤辉)

目　录

1 数值分析基础概念/备用数学材料

1.1 关于数值分析

什么是数值分析？它对理工科研究生有什么意义？请读图 1.1.1.

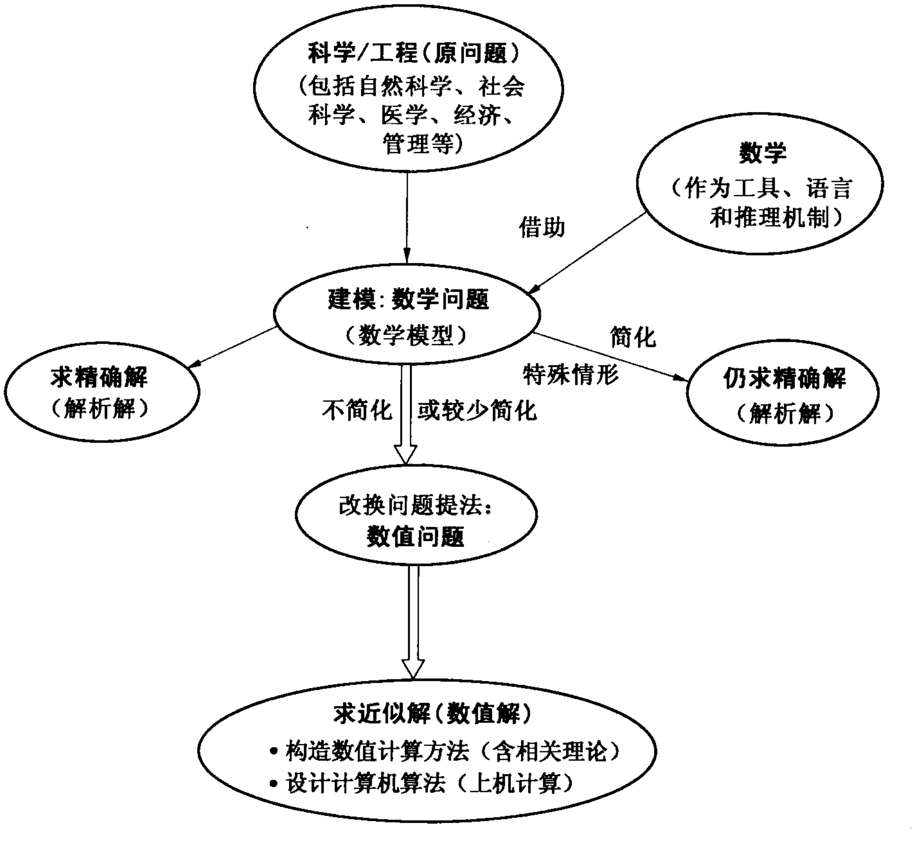

图 1.1.1

图中用⇨连接的部分大致就是数值分析所涉及的内容和意义.更详细地说：

(1) 数值分析是数学的一个分支,是数学的近似、数值计算(处理).正因为这样,按处理对象归类,数值分析中已形成了多类数值问题,并发展了求解相应数值问题的大量数值计算方法.也正因为这样,“数值分析”也称为“数值计算方法”,或简称为“数值方法”或“计算方法”,近年来还被称为“科学与工程计算”.

(2) 在数值分析中,既要强调“数值问题的提法”,也要强调“数值方法、算法及其相关理

论”是如何构建、如何应用的.两者对于培养创新能力和实际处理问题的能力都是不可缺少的.一般来说,理工科研究生(除数学与计算数学专业研究生外)主要以“使用者”的角色来学习数值分析,但也不排除其中的优秀生对数值算法的发展、创造作出重要的贡献.

(3) 现代数值分析的特点是以现代计算机系统作为其处理平台,因此,在现代数值分析应用中,非常重视将面向数学的“数值方法”设计成面向计算机的“计算机数值算法”,并讨论其相关的理论和技术.这里,我们把“数值方法”与“计算机数值算法”(或简称“算法”)区别为两个不同层次的概念.利用数值分析和计算机来解决科学/工程问题,通常称为“科学/工程计算”或简称“科学计算”.由于科学计算的迅速发展及其不断取得成就,使得“科学计算”与传统的“理论研究”和“实验研究”并列为当今科学发展的三大研究方法,相互促进,相辅相成.而科学计算与具体学科的交叉发展,又形成了诸如计算力学、计算物理、计算化学、计算生物等新的计算工程学科,这些学科的发展无疑给理工科研究生和相关专业工作者提供了诱人的发展空间.

1.2 误差基本概念与误差分析初步

既然数值分析实质上是数学求解的一种近似处理,就必然存在误差问题,近似的好坏,以误差衡量之.因此,误差概念就成为数值分析中的基础性概念.简单地说,**误差**就是一个量的准确值与其近似值之差.

在这里,“误差”用数值来表示(记录).“数值”这个术语在数值分析中有时叫“数”,有时也叫“值”,指的就是我们熟知的实数值.

在数值分析中,针对不同的讨论对象,建立不同的、更具体的误差概念,其中最基本又共同使用的主要有下列几个:首先是刻画近似值近似程度的“绝对误差”、“相对误差”和“有效数字(位数)”;其次是描述构造数值计算方法时产生的“截断误差”和进行实际数值计算时存在的“舍入误差”;此外,还常使用所谓“初始数据误差(或称输入数据误差)”.下面分别讨论之.

1.2.1 绝对误差/相对误差

一个准确值(也称精确值)可能由多个不同的近似值表示,而一个近似值总是对应某个准确值而言.近似值的近似程度需要有一个表述.

定义 1.2.1 设 x 为准确值,x^* 为 x 的一个近似值,定义

$$e(x^*)=x-x^* \tag{1.2.1}$$

为近似值 x^* 的**绝对误差**或简称**误差**.① 而在 $x\neq 0$(或 $x^*\neq 0$)时,再定义

$$e_r(x^*)=\frac{x-x^*}{x}\quad\left(\text{或 } x^* \text{ 与 } x \text{ 相差甚微时定义 } e_r(x^*)=\frac{x-x^*}{x^*}\right) \tag{1.2.2}$$

为近似值 x^* 的**相对误差**.

在不引起混淆时,$e(x^*)$和 $e_r(x^*)$也可简写为 e 和 e_r.

从定义可见,相对误差是绝对误差在准确值或近似值中所占的比率(故常用百分数表

① 这里,仅就 x 和 x^* 是实数的情形引入误差的定义.事实上(后面将看到),可以类推到诸如向量、矩阵等情形.

示).因此,用相对误差比用绝对误差在一定情况下能更好地反映近似值的准确程度.

例 1.2.1 设近似值 5000 的绝对误差为 1,近似值 5 的绝对误差为 0.1,哪个近似值比较准确呢?当然,如果不比较,前者误差大,后者误差小;但如果比较,虽然前者的绝对误差是后者的绝对误差的 10 倍,但考虑到所讨论的值本身的大小,在 5000 之中有误差 1 比在 5 中有误差 0.1,显然前者准确程度更高.用相对误差表示,可得 5000 与 5 的相对误差分别为

$$e_r(5000)=\frac{1}{5000}=0.0002=0.02\%,$$

$$e_r(5)=\frac{0.1}{5}=0.02=2\%.$$

在实际情况中,e 与 e_r 有时可以具体计算出来,有时无法具体计算出来.在后一种情况下,我们就不说去计算误差,而只是说去作误差估计,即利用绝对值作工具估计出绝对误差或相对误差的绝对值的一个范围,也即所谓**界**或**限**.

定义 1.2.2 设 x 为准确值,x^* 为 x 的一个近似值,如果能对 x^* 的绝对误差作出估计

$$|e|=|x-x^*|\leqslant\varepsilon, \tag{1.2.3}$$

则称 ε 为 x^* 的**绝对误差界**,简称**误差界**.如果能对 x^* 的相对误差作出估计

$$|e_r|=\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\varepsilon_r, \tag{1.2.4}$$

或直接取

$$\varepsilon_r=\frac{\varepsilon}{|x^*|},$$

则称 ε_r 为 x^* 的**相对误差界**.

满足不等式(1.2.3)和式(1.2.4)的 ε 和 ε_r 可以很多.按定义的实质,误差估计的任务就是提供不等式中尽可能小的 ε、ε_r.引入误差界 ε 之后,可以把无法明明白白写出来的准确值 x 表示为

$$x^*-\varepsilon\leqslant x\leqslant x^*+\varepsilon \quad 或 \quad x=x^*\pm\varepsilon.$$

这样,准确值 x 虽不具体,但有"踏踏实实"的感觉.

通过误差界,再引进"有效数字"的概念.

1.2.2 有效数字(位数)

用"四舍五入"规则取近似值,从误差界的角度来看有什么特点呢?例如,对 $\pi=3.1415926\cdots$,分别取近似值 $x_1^*=3.14$ 和 $x_2^*=3.1416$,则有误差估计(估至某一位的"5"):

$$|e(x_1^*)|=|\pi-x_1^*|=|0.0015926\cdots|\leqslant0.005=\frac{1}{2}\times10^{-2},$$

$$|e(x_2^*)|=|\pi-x_2^*|=|-0.0000073\cdots|\leqslant0.00005=\frac{1}{2}\times10^{-4}.$$

这就是说,所取近似值的绝对误差界不超过(即$\leqslant$)近似值被保留的最末位数(这里即 x_1^* 的小数点后第二位,x_2^* 的小数点后第四位)的半个单位.

另外,若不考虑舍入规则,取 $x_3^*=3.1415$ 作 π 的近似值,则误差估计为

$$|e(x_3^*)|=|\pi-x_3^*|=|0.0000926\cdots|\leqslant0.0005=\frac{1}{2}\times10^{-3}.$$

这就是说，x_3^* 的绝对误差界不超过 x_3^* 的小数点后第三位的半个单位.

再有，若用分数 $x_4^*=\frac{22}{7}$（即$\frac{22}{7}=3.1428571\cdots$）作为 π 的近似值，则误差估计为

$$|e(x_4^*)|=|\pi-x_4^*|=|0.001264\cdots|\leqslant 0.005=\frac{1}{2}\times 10^{-2}.$$

这就是说，$x_4^*=\frac{22}{7}$的绝对误差界不超过 x_4^* 的小数点后第二位的半个单位.

综上所述，以"四舍五入"规则取近似值的特点为基础，但不限于此，也不限于是取有限位数还是取无限位数（包括分数）作近似值，统一以误差界为衡量标准，引入描述近似值近似程度的另一个概念——"有效数字（位数）".

定义 1.2.3 设 x^* 是 x 的一个近似值，如果 x^* 的误差的绝对值（或误差界）不超过（即$\leqslant$）其某一位数字的半个单位，而该位数字到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位，便称 x^* 是 x 的具有 n 位有效数字的近似值，简称 x^* 有 n **位有效数字**.

现在按定义来判断.上述 π 的近似值 $x_1^*=3.14$ 具有 3 位有效数字，$x_2^*=3.1416$ 具有 5 位有效数字，$x_3^*=3.1415$ 具有 4 位有效数字，$x_4^*=\frac{22}{7}$具有 3 位有效数字.前两者是按四舍五入规则产生的，正好符合定义，后两者是按其误差界符合定义条件推出的.可见，近似值通过其有效数字位数的多少，刻画（隐含）了近似值绝对误差的大小.

注意到，由于参加计算机运算的任何实数通常表示成所谓规格化形式（或称规格化的科学记数法）

$$\pm 10^k\times 0.a_1a_2\cdots a_n,$$

其中，k 为一定范围的整数（正数、负数或零），$a_1,a_2,\cdots$是 $0,1,\cdots,9$ 中的一个数字且 $a_1\neq 0$.因此，有效数字的定义也有另一种表述.

定义 1.2.4 设 x 的近似值x^*表示成规格化形式

$$x^*=\pm 10^k\times 0.a_1a_2\cdots a_n\cdots \quad \text{（可以有限或无限）},$$

如果有

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{k-n}, \tag{1.2.5}$$

则称 x^* 是 x 的具有 n 位有效数字的近似值，简称 x^* 有 n 位有效数字.

从定义式(1.2.5)来看，似乎是"有效位数 n 越多，绝对误差越小".但这不能作为一般性规律，因为有例外.例如，对准确值 $x=1000$，取近似值 $x_1^*=999.9$ 和 $x_2^*=1000.1$，显然两者均有误差界：

$$|x-x_1^*|=|x-x_2^*|=0.1,$$

即都不超过近似值个位数的半个单位，因此按定义判断，x_1^* 含 3 位有效数字，x_2^* 含 4 位有效数字.可见，这里不存在"有效位数越多，绝对误差越小"的一般性规律.

然而，有效数字的位数与相对误差有下列相互关系.

定理 1.2.1 设 x 的非零近似值x^*记为规格化形式 $x^*=\pm 10^k\times 0.a_1a_2\cdots a_n$，其中 k 为整数，$a_1,a_2,\cdots,a_n\in\{0,1,\cdots,9;a\neq 0\}$，则

(1)如果 x^* 有 n 位有效数字，则

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

(2)如果

$$|e_r(x^*)|=\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{1-n},$$

则 x^* 至少有 n 位有效数字.

证 由 x^* 的表示式得

$$a_1\times10^{k-1}\leqslant|x^*|\leqslant(a_1+1)\times10^{k-1}.$$

(1)故当 x^* 有 n 位有效数字时,有

$$\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{\frac{1}{2}\times10^{k-n}}{a_1\times10^{k-1}}=\frac{1}{2a_1}\times10^{1-n}.$$

(2)由假设有

$$|x-x^*|\leqslant\frac{|x^*|}{2(a_1+1)}\times10^{1-n}\leqslant\frac{(a_1+1)\times10^{k-1}}{2(a_1+1)}\times10^{1-n}=\frac{1}{2}\times10^{k-n}.$$

按定义,可知 x^* 有 n 位有效数字.

例 1.2.2 要使 $\sqrt{20}$ 的近似值的相对误差不超过 0.1%,问用计算器计算(或查开方表)时,应取几位有效数字?

解 设应取 n 位有效数字.利用定理 1.2.1 之(1),并注意到 $\sqrt{20}$ 的首位数为 4,故应使

$$\frac{1}{2\times4}\times10^{1-n}\leqslant0.1\%,$$

解得 $n\geqslant3.097$,即需取 4 位有效数字,从而由计算值 $\sqrt{20}=4.472\,135\cdots$,可取 $\sqrt{20}\approx4.472$.[①]

值得注意的是,上述定理和例题给我们提示了一个在今后实际计算中有用的做法:为了使某种结果满足一定的相对误差精度,可由计算结果取一定的有效数字位数来达到.

关于有效数字还有以下两点说明:

(1)由定义可见,将任何数乘以 $10^k(k=0,\pm1,\pm2,\cdots)$,相当于移动该数的小数点,并不影响其有效数字的位数,故有效数字的位数与小数点的位置无关.

(2)如无特别声明,科技文本的数字、实验报告的数字以及媒体公布的统计数字,对于作者与读者,均认同是有效数字;至于准确值,则被认为具有无穷位有效数字.

1.2.3 截断误差/舍入误差/初始数据误差

事实上,在处理科学/工程计算问题的整个过程中,例如,建立数学模型、确定模型中各种参数、构造数值计算方法、设计计算机算法,直至编写程序上机计算或直接使用现成软件包计算等步骤,都可能出现误差.在数值计算中,主要关注下列两类误差.

首先是所谓**截断误差**(也称**方法误差**),它是指在构造数值计算方法时,用有限过程代替无限过程或用容易计算的方法代替不容易计算的方法,其计算结果所存在的误差.例如,研

① 定理 1.2.1 对相对误差界的估计稍偏大,因而有可能使所求出的有效数字位数偏多.如本题,只需取 3 位有效数字 $\sqrt{20}\approx4.47$,即有

$$\frac{|\sqrt{20}-4.47|}{4.47}\leqslant\frac{0.002135\cdots}{4.47}\leqslant0.00048=0.048\%.$$