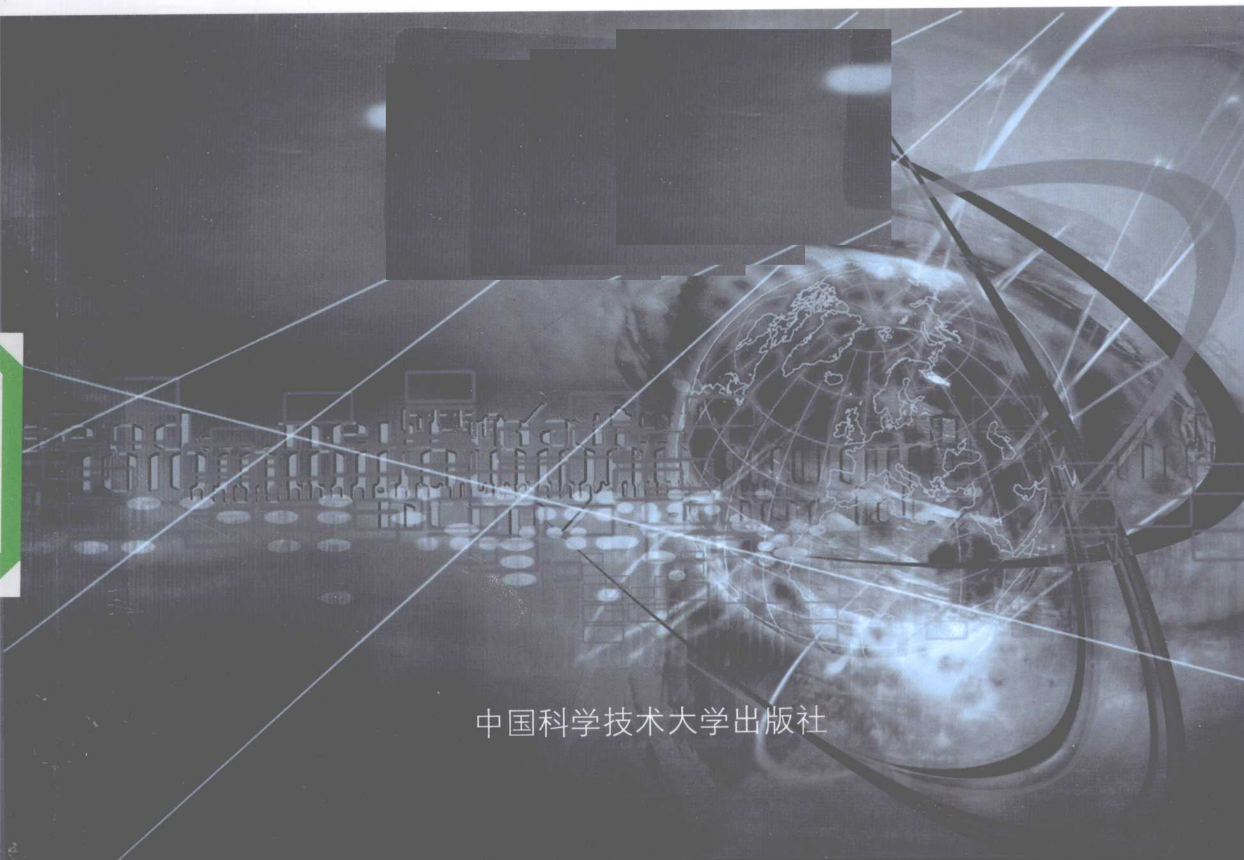
●普通高等学校“十一五”规划教材●

Shuzhi Fenxi

数值分析

朱晓临　主编



中国科学技术大学出版社

数值分析

●普通高等学校“十一五”规划教材●

Shuzhi Fenxi

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”或“计算方法”课程编写的教材，本书列选安徽省高等学校“十一五”省级规划教材.

本书主要内容包括：线性方程组的数值解法（直接法和迭代法），非线性方程（组）的数值解法、数值逼近（包括插值与样条、平方逼近与一致逼近），数值微积分、常微分方程初值问题和边值问题的数值解法以及矩阵特征值、特征向量的数值解法. 每章都有大量例题和习题、相关算法的 MATLAB 程序，并附例题演示；书末附有习题答案、配有上机实习题，供学生上机实习选用. 此外，书中给出了所有概念的英文表达以及书中出现的科学家的简介，书末还有相关概念的中英文索引，方便读者查阅. 全书阐述严谨、脉络分明、深入浅出、注重理论学习和上机实践相结合，便于教学和自学.

本书也可以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/朱晓临主编. —合肥：中国科学技术大学出版社，2010. 7
ISBN 978-7-312-02629-4

Ⅰ. 数…　Ⅱ. 朱…　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(2010)第 070612 号

出版　中国科学技术大学出版社
地址：安徽省合肥市金寨路 96 号，230026
网址：http://press. ustc. edu. cn
印刷　合肥义兴印务有限责任公司
发行　中国科学技术大学出版社
经销　全国新华书店
开本　710 mm×960 mm　1/16
印张　22. 5
字数　454 千
版次　2010 年 7 月第 1 版
印次　2010 年 7 月第 1 次印刷
定价　38. 00 元

前　言

在现代科学研究与工程实际中，电子计算机的应用已渗透到各个领域的方方面面，科学计算的重要性已被愈来愈多的人所认识. 作为理工科大学的学生，应当具备一定的科学计算的知识和能力. 因此，目前各工科院校普遍将“数值分析”(有的叫“计算方法”或“数值计算方法”)列为各专业本科生的必修课程以及工科硕士研究生的学位课程，同时它还是信息与计算科学专业的主干课程.

本书是合肥工业大学数学学院的老师在十多年从事“数值分析”教学的基础上编写的一本教材. 在编写时，我们力求使它既便于教学，也便于自学. 在选材方面，突出基本理论和方法以及它们的应用背景，注重对计算数学最新理论和方法的介绍，强化解决问题能力的培养；在文字叙述方面，力求做到由浅入深，通俗易懂，讲清思想方法来源. 书中每章都配备了大量的例题和习题，尤其对那些读者比较难以理解和掌握的理论和方法，通过例题从多角度给予详尽的解答，同时注意各种方法的比较，书末还附有习题答案. 每章后的小结对所学内容做了高度的概括和总结，使读者更容易掌握其中的脉络和精髓，起到了画龙点睛的作用. “数值分析”是一门实践性很强的课程，为加强上机实践，书后配有很多具有一定综合性的计算实习题，可供读者选用. 为便于读者学习，我们还在每章最后配有该章所有算法的 MATLAB 程序，并附例题演示. 此外，书中给出了主要概念的英文表达，书末还有相关概念的中英文索引，方便读者查阅. 同时，我们还给出了书中出现的科学家的简介，以此表达我们对他们的敬意.

全书共有 9 章，主要内容包括：线性方程组的数值解法(直接法和迭代法)，非线性方程(组)的数值解法、数值逼近(包括插值与样条、平方逼近与一致逼近)，数值微积分、常微分方程初值问题和边值问题的数值解法以及矩阵特征值、特征向量的数值解法. 全书讲授课时为 72 学时，如果少于要求学时，可以选讲其中部分内容，其他内容作为自学或参考资料.

本书第 1 章、第 8 章和第 9 章由朱晓临编写，第 2 章和第 3 章由江平编写，第 4 章由殷明编写，第 5 章由檀结庆编写，第 6 章和第 7 章由郭清伟编写. 全书由朱晓临整理、统稿，并最后定稿.

在本教材付梓之际，我们衷心感谢合肥工业大学数学学院的朱功勤教授，他拨

冗审阅了书稿，并提出了很多中肯的意见. 事实上，这本教材也凝聚了朱功勤教授近三十年讲授“数值分析”的心血和宝贵经验. 衷心感谢安徽省高等学校“十一五”省级规划教材项目的支持. 同时，衷心感谢中国科学技术大学出版社在保证这本教材高质量完成中所做的工作. 在本教材的编写过程中，黄淑兵、许云云、王燕帮助编写了部分 MATLAB 程序，在此对他们表示感谢.

限于作者的水平，书中难免有不当之处，尚祈读者批评指正，编者将不胜感激.

编　者

2010 年 2 月

目　　录

第 1 章 绪　　论

1.1 引　　言

众所周知,科学研究的 3 个重要环节是:**实验**、**科学计算**和**理论分析**.传统意义上,这三者是独立、分开进行的.由于计算机的出现和发展,使科学计算在科研与工程实际中越来越显示出它的卓越作用,并向实验和理论分析渗透,部分或全部地代替实验和理论分析.例如,在计算机上修改一个设计方案远比在实地做修改要容易得多,而且还节省资源.为此,人们往往用科学计算来取代部分实验.还有些课题是不适宜进行多次或大规模实验的,而只能通过科学计算去解决(例如,计算机模拟核爆炸).这种由实验向计算的巨大转变,也促使一些边缘学科相继出现,例如,计算物理、计算力学、计算化学、计算生物学以及计算经济学等,都应运而生.有些理论证明往往也通过计算去解决,例如,四色问题、机器证明等.也就是说,科学计算可以全部或部分地代替理论证明.

科学计算既然如此重要,而担负科学计算主要任务的学科是计算数学.**计算数学**(Computational Mathematics)是数学科学的一个分支,它主要研究用计算机求解各种数学问题的数值方法及其理论以及软件实现.**数值分析**(Numerical Analysis)(也称**数值计算方法**或**计算方法**)是计算数学的一门主要课程,它不同于纯数学那样研究数学本身的理论,而是一门把数学理论与计算机紧密结合起来进行研究的实用性很强的基础课程,它主要研究用计算机解决数学模型的理论与方法.

那么在实际研究中,数值分析处于一种什么地位呢? 由图 1.1.1 可知:数值分析是处于一种承上启下的地位,它在科学计算中是重要的不可或缺的一环.

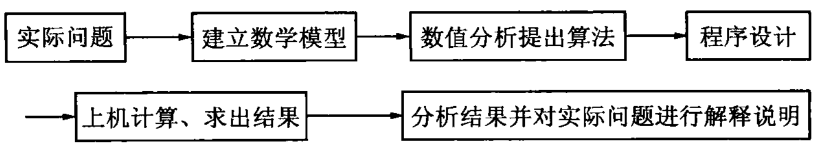


图 1.1.1

由实际问题的提出,到上机计算、求出结果的整个过程,都可以看作是应用数学的范畴.细分起来,由实际问题运用有关学科知识和数学理论,建立数学模型这一过程,通常作为应用数学的任务,这一般要涉及多门学科的知识,本课程不做讨论.而根据数学模型提出求解的数值计算方法(即算法),直到编出程序、上机算出结果,这一过程则是计算数学的任务,也是数值分析研究的对象.

注　随着计算数学的发展,计算数学的研究很多时候已经扩展到上述整个过程.

科学计算离不开计算机,但更离不开计算方法.美国著名的计算数学家Babusk曾说过:"没有好的计算方法,超级计算机就是超级废铁."人类的计算能力等于计算工具的性能与计算方法的效能乘积.这一形象化公式表明了硬件与计算方法对于计算能力的同等重要性.因此计算机只有配上相应的软件才能发挥作用,而一个好的软件的编制则是基于一个好的算法.数值分析的一个重要研究对象就是研究算法以及相应的性质.

所谓**算法**(**Algorithm**),就是用完全确定的规则(包括运算的逻辑顺序),对某一类数值问题的输入数据进行处理,判断此数值问题是否有解.在解存在的情况下,给出输出数据;当解不存在时,算法应能作出明确的判断,最好指出解不存在的关键.

算法的好坏直接影响到实际问题解决的效率.例如,在大型水利工程、天气预报等实际问题中,往往需要解大型方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$,其阶数一般都在几十万阶以上.下面对两种不同的算法进行比较:问题是解一个 20 阶的方程组,计算平台是一台 10 亿次/秒的计算机.第一种方案是用线性代数中的 Cramer 法则作为算法.第二种方案是采用本课程将要介绍的 Gauss 消去法作为算法.经分析,第一种方案所需的时间为 3 万多年,显然这个运算时间在实际中是不可接受的;而第二种方案所用的时间远远少于 1 秒.这个例子说明一个好的算法对科学研究、实际工程是多么重要.

一个有效、实用的算法必须是符合计算机的要求,在理论上收敛、稳定,在实际计算中精确度高,计算复杂性小,能通过试验验证的数值方法.

数值分析的主要内容包括:线性方程组的数值解法、非线性方程的数值解法、函数的数值逼近、数值微分与数值积分、微分方程的数值解、数值线性代数等.

1.2　误差的基本理论

1.2.1　误差的来源和分类

数值计算中的解都是近似解，**误差**(error)是不可避免的，关键是找到误差的来源以及控制误差的方法. 误差的来源主要有以下 4 种：

1. 模型误差

数学模型与实际问题之间的误差称为**模型误差**(model error).

我们知道，要进行数值计算，首先必须将实际问题归结为数学问题，建立合适的数学模型. 在建立数学模型的过程中，通常要加上许多限制，忽略一些次要因素，这样建立起来的数学模型与实际问题之间一定有误差，这种误差就是模型误差.

2. 观测误差

实验或观测得到的数据与实际数据之间的误差称为**观测误差**(observation error)或**数据误差**(data error).

数学模型中通常包含一些由观测(实验)得到的数据，例如，温度，气压、物体运动的速度、人体体重、身高，等等，它们和实际的数值之间是有出入的，其间的误差就是观测误差. 误差的形成既有测量仪器的精度原因，也有观测人员本身素质、实验环境变化等原因.

3. 截断误差

数学模型的精确解与数值方法得到的数值解之间的误差称为**方法误差**或**截断误差**(truncation error).

因为计算机上只能完成有限次运算，而理论上的精确值往往要求用无限次运算过程才能求出. 例如，由 Taylor 公式得

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots + (-1)^{n-1}\frac{x^{2n}}{(2n-1)!} + R_{2n}(x),$$

通常用 $x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots + (-1)^{n-1}\frac{x^{2n}}{(2n-1)!}$ 近似代替 $\sin x$，这时的截断误差为

$$R_{2n}(x) = \frac{\sin[\theta x + (2n+1)\pi/2]}{(2n+1)!}x^{2n+1},\quad 0 < \theta < 1.$$

4. 舍入误差

对数据进行四舍五入后产生的误差称为**舍入误差**(roundoff error).

计算机的数系是有限集，不仅无理数 e，π 等不属于计算机数系，很多有理数，

如 1/3＝0.333…也不属于计算机数系，于是人们常常用计算机数系中和它们比较接近的数来表示它们，由此产生的误差即为舍入误差.

每一步的舍入误差是微不足道的，但经过计算过程的传播和积累，舍入误差甚至可能会“淹没”所要的真值.

注 观测误差和原始数据的舍入误差，就其来源来说，有所不同，就其对计算结果的影响来看，完全一样. 数学描述和实际问题之间的误差，即模型误差，往往是计算工作者不能独立解决的，甚至是尚待研究的课题. 基于这些原因，在数值分析课程中所涉及的误差，一般是指截断误差和舍入误差. 数值分析讨论它们在计算过程中的传播和对计算结果的影响，研究控制它们的影响以保证最终结果的精度. 既希望解决数值问题的算法简便、有效，又要使最终结果准确、可靠.

1.2.2 误差、误差限和有效数字

1.2.2.1 绝对误差和绝对误差限、相对误差和相对误差限

定义 1.2.1 设 x 为准确值，x^* 是 x 的近似值，称

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

为近似值 x^* 的**绝对误差**(**absolute error**)，简称**误差**(**error**)，或记作 x 的微分 $\mathrm{d}x = x - x^*$.

称绝对误差绝对值的上界 ε 为近似值 x^* 的**绝对误差限**(**absolute error bound**)，简称**误差限**或**精度**(**precision**)，即

$$|e| = |x - x^*| \leqslant \varepsilon. \tag{1.2.2}$$

注 绝对误差 e 不是误差的绝对值，它既可为正，也可为负. 一般来说，准确值 x 是不知道的，因此误差 e 的准确值无法求出. 不过在实际工作中，可根据相关领域的知识、经验及测量工具的精度，事先估计出误差绝对值不超过某个正数 ε，即绝对误差限. 例如

$$x = \sin 1,\quad x^* = 1 - \frac{1}{3!} + \frac{1}{5!} - \frac{1}{7!} + \frac{1}{9!},$$

$$e = x - x^* = \sin 1 - \left(1 - \frac{1}{3!} + \frac{1}{5!} - \frac{1}{7!} + \frac{1}{9!}\right) = \frac{\sin^{(11)}\xi}{11!},$$

根据数学知识可估计出其误差限：

$$|e| = \left|\frac{\sin^{(11)}\xi}{11!}\right| \leqslant \frac{1}{11!} = \frac{1}{39916800} \approx 2.5 \times 10^{-8} = \varepsilon.$$

由式(1.2.2)得

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

这表示准确值 x 在区间$[x^*-\varepsilon,x^*+\varepsilon]$内，有时将准确值 x 写成$x=x^*\pm\varepsilon$. 例如用卡尺测量一个圆杆的直径为 $x^*=150$ 毫米，它是圆杆直径的近似值，由卡尺的精度知道这个近似值的误差不会超过半个毫米，则有

$$|x-x^*|=|x-150|\leqslant 0.5(\text{毫米}).$$

于是该圆杆的直径为 $x=150\pm0.5$(毫米).

用 $x=x^*\pm\varepsilon$ 表示准确值可以反映它的准确程度，但不能说明近似值的好坏. 例如，测量一根 10 厘米长的圆钢时发生了 0.1 厘米的误差和测量一根 10 米长的圆钢时发生了 0.1 厘米的误差，其绝对误差都是 0.1 厘米，但是，后者的测量结果显然比前者要准确得多. 决定一个量的近似值的好坏，除了要考虑绝对误差的大小，还要考虑这个量本身的大小，这就需要引入相对误差的概念.

定义 1.2.2　设 x 为准确值，x^* 是 x 的近似值，称

$$e_r=\frac{e}{x}=\frac{x-x^*}{x} \tag{1.2.3}$$

为近似值 x^* 的**相对误差(relative error)**. 称相对误差绝对值的上界 ε_r 为近似值 x^* 的**相对误差限(relative error bound)**，即

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

注 1　在实际计算中，由于准确值 x 总是未知的，因此也把

$$e_r=\frac{e}{x^*}=\frac{x-x^*}{x^*} \tag{1.2.5}$$

称为近似值 x^* 的相对误差.

注 2　绝对误差和绝对误差限有量纲，而相对误差和相对误差限没有量纲，通常用百分数来表示.

在上面的例子中，前者的相对误差是 $0.1/10=1\%$，而后者的相对误差是 $0.1/1000=0.01\%$. 一般来说，相对误差越小，表明近似程度越好. 与绝对误差一样，近似值 x^* 的相对误差的准确值也无法求出.

1.2.2.2　有效数字

在工程实际中，一个近似值的近似程度往往用它含有的有效数字的多少来衡量，为此引进有效数字的概念.

定义 1.2.3　设 x^* 是 x 的近似值. 如果 x^* 的误差限是它的某一位的半个单位，那么称 x^* 准确到这一位，并且从这一位起直到左边第一个非零数字为止的所有数字称为 x^* 的**有效数字(significant figure 或 significant digit)**. 具体来说，就是先将 x^* 写成规范化形式

$$x^*=\pm0.a_1a_2\cdots a_n\times10^m, \tag{1.2.6}$$

其中 $a_1,a_2,\cdots,a_n$ 是 0 到 9 之间的自然数，$a_1\neq 0$，m 为整数. 如果 x^* 的误差限

$$|x-x^*|\leqslant 0.5\times 10^{m-l},\quad 1\leqslant l\leqslant n,\tag{1.2.7}$$

那么称近似值 x^* 具有 l 位有效数字.

注 1 一般而言，对一个数据取其可靠位数的全部数字加上第一位可疑数字，就称为这个数据的有效数字.

一个近似数据的有效位数是该数中有效数字的个数，指从该数左方第一个非零数字算起到最末一个数字(包括零)的个数，它不取决于小数点的位置.

有效数字的位数是由被测物体、测量工具决定的. 例如，用厘米刻度尺测量某一物体的长度为 6.5 厘米，6.5 有 2 位有效数字，最后的“5”是可疑数字. 若用毫米刻度尺测量某一物体的长度为 6.50 厘米，则 6.50 有 3 位有效数字，最后的“0”是可疑数字. 从上面的例子也可以看出有效数字和测量工具的准确程度有关，即有效数字不仅表明数量的大小而且也反映测量的准确度. 此外，变换单位不能增加有效数字的位数，如将 6.50 厘米改为 65.0 毫米或 0.0650 米，仍为 3 位有效数字.

注 2 数字“0”在有效数字中有两种意义：一种是作为数字定值，另一种是有效数字. 例如在 10.1430 中两个“0”都是有效数字，所以它有 6 位有效数字. 在 0.2104中，小数点前面的“0”是定值用的，不是有效数字，而在数据中的“0”是有效数字，所以它有 4 位有效数字. 在 0.0120 中，“1”前面的两个“0”都是定值用的，而在末尾的“0”是有效数字，所以它有 3 位有效数字. 因此，数字中间的“0”和末尾的“0”都是有效数字，而数字前面所有的“0”只起定值作用.

以“0”结尾的正整数，有效数字的位数不确定. 例如 1200 这个数，就不能确定是几位有效数字，可能是 2 位或 3 位，也可能是 4 位. 遇到这种情况，应根据实际有效数字书写成

1.2×10^3 2 位有效数字，

1.20×10^3 3 位有效数字，

1.200×10^3 4 位有效数字.

因此很大或很小的数，常用 10 的乘方表示.

例 1.2.1 设 $x=20.03157$，确定它的近似值 $x_1^*=20.03$，$x_2^*=20.031$，$x_3^*=20.032$分别具有几位有效数字？

解 因为

$$x_1^*=0.2003\times 10^2,\quad m=2,$$
$$|x-x_1^*|=0.00157=0.157\times 10^{-2}<0.5\times 10^{-2},$$

所以 $m-l=-2$，得 $l=4$. 故 $x_1^*=20.03$ 具有 4 位有效数字.

因为

$$x_2^*=0.20031\times 10^2,\quad m=2,$$

$$|x - x_2^*| = 0.00057 = 0.057\times 10^{-2} < 0.5\times 10^{-2},$$

所以 $m-l=-2$,得 $l=4$.故 $x_2^*=20.031$ 具有4位有效数字.

因为

$$x_3^* = 0.20032\times 10^2,\quad m=2,$$

$$|x - x_3^*| = 0.00043 = 0.43\times 10^{-3} < 0.5\times 10^{-3},$$

所以 $m-l=-3$,得 $l=5$.故 $x_3^*=20.032$ 具有5位有效数字.

1.2.2.3 有效数字的运算规则

1. 有效数字的加减

多个数加减时,各数的取位是以小数位数最少的数为标准,按四舍五入进行取舍,然后加、减.最后结果中的有效数字位数与运算前诸量中有效数字位数最少的一个相同.例如

$$0.0231+12.34+1.06752\approx 0.02+12.34+1.07=13.43.$$

2. 有效数字的乘除

多个数相乘或相除,以有效数字最少的数为标准,将有效数字多的其他数字,按四舍五入进行取舍,然后进行运算.最后结果中的有效数字位数与运算前诸量中有效数字位数最少的一个相同.例如

$$0.0231\times 12.34\div 1.06752\approx 0.0231\times 12.3\div 1.07\approx 0.266.$$

3. 有效数字的乘方和开方

有效数字在乘方和开方时,运算结果的有效数字位数与其底的有效数字的位数相同.

4. 对数函数、指数函数和三角函数的有效数字

对数函数运算后,结果中尾数的有效数字位数与真数有效数字位数相同.

指数函数运算后,结果中有效数字的位数与指数小数点后的有效数字位数相同.

三角函数的有效数字位数与角度的有效数字的位数相同.

1.2.2.4 有效数字与相对误差限的联系

从上面的讨论可以看出,有效数字位数越多,绝对误差限就越小.同样地,有效数字位数越多,相对误差限也就越小.下面阐述有效数字与相对误差限的联系.

定理 1.2.1 设 x^* 是 x 的近似值,且

$$x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n\times 10^m,$$

其中 $a_1,a_2,\cdots,a_n$ 是0到9之间的自然数,$a_1\neq 0$,m 为整数.

(1) 如果 x^* 具有 $l\,(1\leqslant l\leqslant n)$ 位有效数字,那么 x^* 的相对误差限为

$\frac{1}{2a_1}\times 10^{-l+1}$.

(2) 如果 x^* 的相对误差限为 $\frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-l+1}$,那么 x^* 至少具有 l 位有效数字.

证明 (1) 因为 x^* 具有 l 位有效数字,所以由定义 1.2.3 知

$$|x-x^*|\leqslant 0.5\times 10^{m-l}.$$

又因为 $|x^*|\geqslant a_1\times 10^{m-1}$,所以

$$\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{0.5\times 10^{m-l}}{a_1\times 10^{m-1}}=\frac{1}{2a_1}\times 10^{-l+1}.$$

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

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

故由定义 1.2.3 知:x^* 至少具有 l 位有效数字.证毕!

例 1.2.2 设 $\sqrt{50}$ 的近似值 x^* 的相对误差的绝对值不超过 0.01%,问 x^* 至少应具有几位有效数字?

解 设 x^* 至少应具有 l 位有效数字.因为 $7<\sqrt{50}<8$,所以 $\sqrt{50}$ 的第一个非零数字是 7,即 x^* 的第一位有效数字 $a_1=7$,根据题意及定理 1.2.1 知

$$\frac{|\sqrt{50}-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{1}{2a_1}\times 10^{-l+1}=\frac{1}{2\times 7}\times 10^{-l+1}\leqslant 0.01\% = 10^{-4},$$

解得 $l\geqslant 3.85$.故取 $l=4$,即 x^* 至少应具有 4 位有效数字.

1.2.3 误差的运算

1. 绝对误差的四则运算

设 x^* 和 y^* 分别是 x 和 y 的近似值,它们的绝对误差分别是

$$e(x^*)=x-x^* \quad 和 \quad e(y^*)=y-y^*,$$

则

$$\left.\begin{aligned} &e(x^*\pm y^*)\approx e(x^*)\pm e(y^*),\\ &e(x^*y^*)\approx y^*e(x^*)+x^*e(y^*),\\ &e\left(\frac{x^*}{y^*}\right)\approx\frac{y^*e(x^*)-x^*e(y^*)}{(y^*)^2}.\end{aligned}\right\} \tag{1.2.8}$$

2. 相对误差的四则运算

设 x^* 和 y^* 分别是 x 和 y 的近似值,它们的相对误差分别是