普通高等教育"十二五"规划教材
21世纪大学数学精品教材

丛书主编　蔡光兴　戴明强

数值分析

何汉林　主编

第二版

科学出版社

普通高等教育“十二五”规划教材

21 世纪大学数学精品教材

丛书主编　蔡光兴　戴明强

数值分析

（第二版）

何汉林　主编

科学出版社

北京

内 容 简 介

《21世纪大学数学精品教材》为大学本科（本科1普通类和本科2一类）数学系列教材，体现了对数学精品的归纳及本套教材的精品特征，具有鲜明的特点，按照统一的指导思想组编而成。

本书是《数值分析》的第二版，着重介绍了与现代计算有关的数值分析的基本概念、理论和基本方法．特别是数值方法在计算机上的实现，以期学生在使用本书后能够在计算机上进行有关的科学与工程计算．本书理论叙述严谨、精练，概念明确，系统性较强，可用作理工科学校《数值分析》课程教材．全书主要包括线性代数方程组求解、非线性方程求根、插值方法、数值积分与微分、微分方程数值解法、最佳平方逼近理论、求矩阵特征值与特征向量等内容．

本书可作为高等学校工科各专业和部分理科专业的《数值分析》课程教材，也可作为教研工作者的参考书。

图书在版编目（CIP）数据

数值分析/何汉林主编．—2版．—北京：科学出版社，2011.9

普通高等教育"十二五"规划教材．21世纪大学数学精品教材/蔡光兴，戴明强主编

ISBN 978-7-03-032221-0

Ⅰ.数…　Ⅱ.何…　Ⅲ.数值分析—高等学校—教材　Ⅳ.O241

中国版本图书馆CIP数据核字（2011）第175877号

责任编辑：王雨舸／责任校对：安　凌

责任印制：彭　超／封面设计：苏　波

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

武汉市新华印刷有限责任公司印刷

科学出版社发行　各地新华书店经销

*

2007年2月第 一 版

2011年8月第 二 版　开本：B5（720×1000）

2011年8月第三次印刷　印张：21

印数：9 001—13 000　字数：402 000

定价：35.80元

（如有印装质量问题，我社负责调换）

《21 世纪大学数学精品教材》丛书序

《21 世纪大学数学精品教材》为大学本科(本科 1 普通类和本科 2 一类)数学系列教材,体现了对数学精品的归纳及本套教材的精品特征.

一、组编机构

丛书设组编委员会,编委由 12 所高校数学院系的负责人构成(按姓氏笔画):

王公宝　方承胜　江志宏　李逢高　杨鹏飞　时　宝　何　穗　张志军

欧贵兵　罗从文　周　勇　殷志祥　高明成　黄朝炎　蔡光兴　戴明强

丛书主编:

蔡光兴　戴明强

二、编写特点

1. 适用性

教材的适用性是教材的生命力所在,每本教材的篇幅结合绝大部分高等院校数学院系对课程学时数的要求.部分教材配有教学光盘,便于教学.

2. 先进性

把握教改、课改动态和学科发展前沿,反映学科、课程的先进理念、知识和方法.

3. 创新性

市场需求和市场变化决定教材创新需要,数学教学在知识创新、思维创新等方面负有责任,一定程度的创新使教材更具冲击力和影响力.

创新与继承相结合,是继承基础上的创新.

创新转变为参编者、授课者的思想和行为,达到文化融合.

4. 应用性

丛书的读者对象为应用型和研究应用型大学本科(本科 1 普通类和本科 2 一类)学生,应用性是数学学科和数学教学发展的新特点,或展现在教材内容结构上,或体现于某些章节,或贯穿于其中.

5. 教学实践性和系统性

教材具有可操作性,教师好教,学生好学,同时保持知识完整.二者发生矛盾时,前者优先,不过分追求体系完整.

三、指导思想

《21世纪大学数学精品教材》大致可划分为两大类:基础知识类;方法与应用类.

1. 基础知识类

(1) 遵循高等院校教学指导委员会关于课程的教学基本要求,知识体系相对完整,结构严谨,内容精炼,循序渐进,推理简明,通俗易懂.

(2) 融入现代数学思想(如数学建模),分别将 Mathematica、MATLAB、SAS、SPS 等软件的计算方法,恰当地融入课程教学内容中,培养学生运用数学软件的能力.

(3) 强化学生的实验训练和动手能力,可将实验训练作为模块,列入附录,供教学选用或学生自学自练,使用者取舍也方便.

(4) 教材章后均列出重要概念的英文词汇,布置若干道英文习题,要求学生用英文求解,以适应教育面向世界的需要,也为双语教学打下基础.

(5) 为使学生巩固知识和提高应用能力,章末列出习题,形式多样.书后配测试题,书末提供解题思路或参考答案.

2. 方法与应用类

(1) 融入现代数学思想和方法(如数学建模思想),体现现代数学创新思维,着力培养学生运用现代数学工具(软件)的能力,使教材真正成为基于现代数学软件的、将数学软件融合到教材与教学内容的现代精品教材.

(2) 加强教学知识与内容的应用性,注重数学思想和方法的操作与应用及其实用性.通过实例、训练、实验等各种方式,提高学生对数学知识、数学方法的应用能力及解决问题的能力.

(3) 强化学生的实验训练,通过完整的程序与实例介绍,教会学生分析问题、动手编程、分析结果,提高学生的实验操作水平、实际动手能力和创新能力.

(4) 教材章后均列出重要概念的英文词汇,布置若干道英文习题,要求学生用英文求解,以适应教育面向世界的需要,也为双语教学打下基础.

(5) 为使学生巩固知识和提高应用能力,章末列出习题,形式多样.书后配测试题,书末提供解题思路或参考答案.

《21世纪大学数学精品教材》组编委员会

2006年9月

第二版前言

科学技术各领域的问题通过建立数学模型与数学产生了紧密的联系，但实际应用中所导出的数学模型往往不能方便地求出精确解，只能简化模型或利用其他方法求出近似解，数值计算方法就是求模型近似解的重要方法. 因此，在高等理工科学校中相继开设了“数值分析”或“计算方法”课程.

本书是编者在《数值分析》(第一版)的基础上，总结多年从事“数值分析”课程教学的教学经验并吸取大量参考资料的长处编写而成. 由于计算机算法语言的多样化和有关数学软件的普及，编者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. 本书着重介绍数学传统领域内的常用的计算方法，在介绍方法的同时，尽可能地阐明算法的误差、稳定性、所研究问题的性态等的数学理论基础；并在每一章的最后给出其基于 MATLAB 的工程数值算法.

本书共 9 章. 包括算法及误差的有关概念，MATLAB 简介；解线性方程组的直接法与迭代法；非线性方程求根；函数逼近与计算中的插值与最佳平方逼近理论；数值积分与微分；常微分方程数值解法以及矩阵的特征值与特征向量的计算.

本书可以作为理工科“数值分析” 或工科研究生同名课程的教材，也可供相关科研人员和技术人员从事研究工作参考之用.

《数值分析》(第二版)由何汉林主编，李薇、王天虹、许松林、覃太贵任副主编. 其中第 1、2、3 章由李薇、覃太贵编写，第 4、5、6 章和模拟试卷由王天虹、李金兰编写，第 7、8、9 章由何汉林、许松林编写，全书由何汉林统稿、定稿.

由于编者水平有限，不足之处在所难免，敬请批评指正.

编　者

2011 年 5 月

目　录

第1章　绪　　论

本章简要介绍数值分析的研究对象、内容和特点,介绍误差的基本概念以及有效数字与误差的关系,并讨论了数值计算的误差估计问题.其中利用函数的泰勒(Taylor)展开式估计误差是误差定量估计的一种基本方法.除此之外,本章还着重讨论了误差的定性分析以及在数值计算中应当普遍遵循的若干原则.考虑到基于MATLAB软件的数值计算日益广泛,本章最后简要介绍了MATLAB软件的基础知识.

1.1　数值分析的研究对象与特点

数值分析也称为计算方法,是数学科学的一个重要分支,它研究用计算机求解数学问题的数值计算方法及其软件实现.随着电子技术的发展和科学技术的进步,电子计算机的使用日益广泛.计算机作为科学计算的主要工具越来越不可缺少,因而需要研究适合计算机使用的数值计算方法.为了更具体地说明数值分析的研究对象,我们考察用计算机解决科学计算问题的一般过程,可以概括为

实际问题 → 数学模型 → 计算方法 → 程序设计 → 上机计算

由实际问题应用有关科学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.而根据数学模型提出求解的计算方法及编出程序并上机算出结果,进而对计算结果进行分析,这一过程则是计算数学的任务,也是数值分析的研究对象.因此,数值分析就是研究用计算机解决数学问题的数值方法及其理论.它的内容包括:误差理论、线性与非线性方程(组)的数值解、矩阵的特征值与特征向量计算、曲线拟合与函数逼近、插值方法、数值积分与数值微分、常微分方程与偏微分方程数值解等.本书只介绍科学与工程计算中最常用的基本数值方法,包括线性方程组与非线性方程求根、插值与最佳平方逼近、数值积分与数值微分、常微分方程数值解法、矩阵的特征值与特征向量计算.这些都是数值分析中最基础的内容.

数值分析是一门与计算机密切结合的实用性很强的数学课程,它既具有纯数学的高度抽象性与严密科学性的特点,又具有应用广泛性与实际试验的高度技术性的特点.例如,考虑线性方程组的解,在线性代数中,只介绍解的存在唯一性及有关理论和精确解法,用这些理论和方法还不能直接在计算机上求解.我们知道,用克莱姆(Cramer)法则求解一个 n 阶线性方程组,要算 $n+1$ 个 n 阶行列式,总共

需要$(n-1)(n+1)n!$次乘法，当n较大时，计算量是相当惊人的. 而如果用消元法，求解一个n阶线性方程组大约需要$\frac{1}{3}n^3+n^2$次乘法. 这一简单的例子告诉我们，能否正确地制定算法，是科学计算成败的关键. 另外，求解这类问题还应根据方程特点，研究适合计算机使用的、满足精度要求的、计算时间节省的有效算法及其相关理论. 在实现这些算法时往往还要根据计算机容量、字长、速度等指标，研究具体求解步骤和程序设计技巧. 有的方法在理论上虽不够严密，但通过实际计算、对比分析等手段，证明是行之有效的方法，也应该采用，这些都是数值分析应有的特点.

概括地说，数值分析是研究适合于在计算机上使用的实际可行、理论可靠、计算复杂性好的数值计算方法. 具体说就是：

(1) 面向计算机，要根据计算机特点提供实际可行的算法. 即算法只能由计算机可执行的加减乘除四则运算和各种逻辑运算组成.

(2) 要有可靠的理论分析. 数值分析中的算法理论主要是连续系统的离散化及离散型方程数值求解. 有关基本概念包括误差、稳定性、收敛性、计算量、存储量等，这些概念用于刻画计算方法的可靠性、准确性、效率以及使用的方便性.

(3) 要有良好的计算复杂性及数值试验. 计算复杂性是算法好坏的标志，它包括时间复杂性(指计算时间多少)和空间复杂性(指占用存储单元多少). 对很多数值问题使用不同算法，其计算复杂性将会大不一样，例如对20阶的线性方程组若用克莱姆法则作为算法求解，其乘除法运算次数需要9.7×10^{20}，若用每秒运算1亿次的计算机计算也要30万年，这是无法实现的，而用数值分析中介绍的高斯(Gauss)消去法求解，其乘除法运算次数只需3060次，这说明选择算法的重要性. 当然有很多数值方法不可能事先知道其计算量，故对所有数值方法除理论分析外，还必须通过数值试验检验其计算复杂性.

1.2 数值计算的误差

一个实际问题的真值与我们算出来的值之间往往存在差异，这种差异称为误差. 除了极个别的情况外，数值计算总是存在误差，数值分析的任务之一是将误差控制在一定的允许范围内或者至少对误差有所估计.

1.2.1 误差的来源与分类

用数值计算方法解决实际问题时，首先必须建立数学模型，由于实际问题的复杂性，在对实际问题进行抽象与简化时，往往为了抓住主要因素而忽略了一些次要因素，这样就会使得建立起来的数学模型与实际问题之间存在一定的差异，我们把

数学模型与实际问题之间出现的这种差异称为模型误差. 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. 在数学模型中往往包含一些由观测或实验得到的物理量,如温度、重量、长度等,由于测量工具精度和测量手段的限制,它们与实际量大小之间必然存在差异,这种差异称为观测误差. 观测误差在数值分析中也不予讨论. 数值分析中所涉及的误差,主要指以下两类:

第一类是截断误差或方法误差,它是指将数学问题转化为数值计算问题时产生的误差,通常是用有限过程近似无限过程时产生的误差. 例如,计算 $f(x)=e^x$ 的值,用泰勒公式展开前4项为

$$e^x \approx 1+x+\frac{x^2}{2}+\frac{x^2}{6}=P_3(x)$$

当 $|x|<1$ 时其截断误差为

$$R_3(x)=e^x-p_3(x)=\frac{1}{4!}e^{\xi}x^4 \quad (\xi \text{在 } 0 \text{ 与 } x \text{ 之间})$$

第二类是舍入误差,数值计算时由于计算是有限位的,所以原始数据、中间结果和最后结果都要舍入,这就产生舍入误差. 在十进制运算中一般采用四舍五入,例如 $\frac{1}{3}$ 写成 0.3333,$\pi\approx 3.1416$ 等,都有舍入误差.

数值分析需要讨论这两类误差在计算过程中的传播和对计算结果的影响,研究控制它们的方法以保证最终结果有足够的精度.

1.2.2　误差与有效数字

定义 1.1　设准确值 x 的近似值为 x^*,则 $e(x^*)=x^*-x$ 称为近似值 x^* 的绝对误差,简称误差,$e_r(x^*)=\dfrac{x^*-x}{x}$ 称为近似值 x^* 的相对误差.

绝对误差可正可负,一般来说 $e(x^*)$ 的准确值很难求出,往往只能求 $|e(x^*)|$ 的一个上界 $\delta(x^*)$,即 $|e(x^*)|=|x^*-x|\leqslant\delta(x^*)$,$\delta(x^*)$ 称为 x^* 的误差限. 相对误差 $e_r(x^*)$ 当 $x=0$ 时没有意义,且准确值 x 往往未知,故常用 $\dfrac{x^*-x}{x^*}$ 作为相对误差,而称 $\delta_r(x^*)=\dfrac{\delta(x^*)}{|x^*|}$ 为相对误差限.

例 1.1　已知 $\pi=3.141\,592\,6\cdots$,若取近似数为 $x^*=3.14$,则

$$e(x^*)=x^*-\pi=-0.001\,592\,6\ldots,\qquad |e(x^*)|\leqslant 0.002=\delta(x^*)$$

为 x^* 的误差限,而相对误差限

$$\delta_r(x^*)=\frac{\delta(x^*)}{3.14}<0.007$$

通常在 x 有多位数字时,若取前有限位数的数字作近似值,都采用四舍五入原则. 例如,$x=\pi$,取 3 位:$x^*=3.14$,$|e(x^*)|\leqslant 0.002$;取 5 位:$x^*=3.1416$,$|e(x^*)|\leqslant 0.000\,01$,它们的误差限都不超过近似数 x^* 末位数的半个单位,即

$$|\pi-3.14|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-2},\quad |\pi-3.1416|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-4}$$

定义 1.2　设 x^* 是 x 的一个近似数,表示为

$$x^*=\pm 0.a_1a_2\cdots a_n\times 10^k \tag{1-1}$$

每个 $a_i(i=1,2,\cdots,n)$ 均为 $0,1,\cdots,9$ 中的一个数字,且 $a_1\neq 0$,如果 $|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{k-n}$,则称 x^* 近似 x 有 n 位有效数字.

例如,用 3.14 近似 π 有 3 位有效数字,用 3.1416 近似 π 有 5 位有效数字. 显然,近似数的有效位数越多,相对误差限就越小,反之也正确.

定理 1.1　设 x 的近似数 x^* 表示为式(1-1),如果 x^* 具有 n 位有效数字,则其相对误差限为

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

反之,若

$$\frac{|x^*-x|}{|x^*|}\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-(n-1)} \tag{1-3}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证　由式(1-1),得

$$a_1\times 10^{k-1}\leqslant|x^*|\leqslant(a_1+1)\times 10^{k-1}$$

所以当 x^* 有 n 位有效数字时,

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

反之,由式(1-3),有

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

故 x^* 有 n 位有效数字.

例 1.2　下列近似数有几位有效数字?其相对误差限是多少?

(1) $x=\mathrm{e}\approx 2.718\,28=x^*$　　(2) $x=0.030\,021\approx 0.0300=x^*$.

解　(1) 由 $|2.718\,28-\mathrm{e}|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-5}$,因 $k=1$,故 $n=6$,即 x^* 有 6 位有效数字. 因 $a_1=2$,相对误差限 $\delta_r(x^*)=\frac{1}{4}\times 10^{-5}$.

(2) $|0.0300-x|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-4}$,因 $k=-1$,故 $n=3$,即 x^* 有 3 位有效数字.