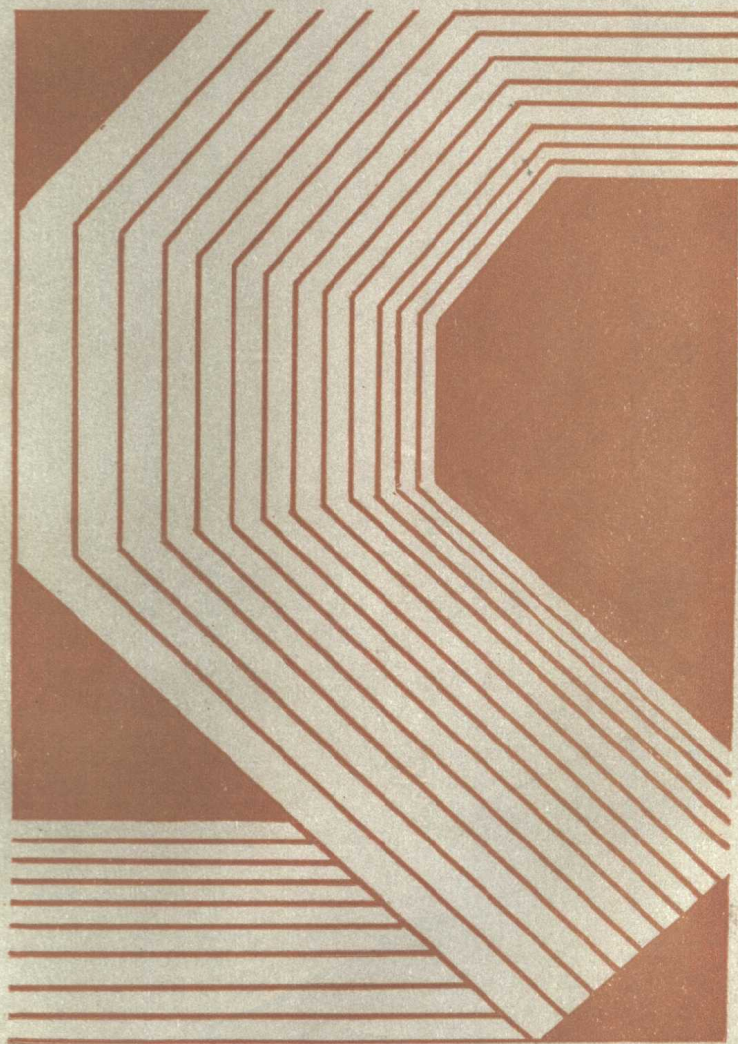


高等学校试用教材

数值分析

胡祖炽 林源渠 编



高等教育出版社

高等学校试用教材

数值分析

胡祖炽 林源渠 编

高等教育出版社

内 容 提 要

本书较全面地介绍了数值分析的基础知识、插值法、最小二乘法、最佳一致逼近、快速富氏变换、数值积分、非线性方程和方程组的解法、常微分方程初值问题的数值解等。该书取材适中，由浅入深，论理清楚，并注意给出数值例子，从正反两方面说明方法的好坏。

本书可作为高等学校有关专业的教材或教学参考书，也可供科技人员阅读参考。

高等学校试用教材

数值分析

胡祖焯 林源渠 编

*

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

二二〇七工厂印装

*

开本 850×1168 1/32 印张 8.125 字数 196,000

1986年3月第1版 1986年3月第1次印刷

印数 00,001—6,610

书号 13010·01197 定价 1.45 元

序 言

这本数值分析不包括数值线性代数的内容，因为在我们学校数值分析和数值代数分为两个课程，都是讲授一学期 68 学时。

这是一本教材，从 1979 年起曾对各届计算专业学生讲授过多次，其间作过几次修改。这本教材与通行的教材有些不同，去掉了一部分繁琐的材料，加进了一些较新的、有效的方法。论证力求严格。为了内容的完整性还叙述了一些结果而不给出证明。读者可按指明的参考书作进一步的了解。本书难易程度基本上符合计算数学专业必修课和其他专业选修课教学之用。我们没有附上程序或框图。但学习本书之后，再去编制程序或看现成的有关软件资料，应该是没有困难的。

林源渠、滕振寰、雷功炎等同志先后讲授过这本教材，黄禄平和林建祥同志都看过这个教材的稿子，他们提出过具体而又十分宝贵的意见，我们在此表示衷心的感谢。

我们也要感谢北京大学计算数学教研室全体同志经常给予我们的鼓励和帮助。

本书由中山大学计算机科学系黄友谦同志和南京大学数学系何旭初同志先后审阅，他们都提出了很宝贵的意见，使本书生色不少，在此谨致谢忱。

编 者

一九八五年七月

于北京大学数学系

目 录

第一章 误差	1
§ 1 误差的来源.....	1
§ 2 误差与误差限 有效数字.....	2
§ 3 相对误差与相对误差限.....	5
§ 4 误差危害现象及其防止.....	8
习题.....	15
第二章 插值法	18
§ 1 两点线性插值.....	18
§ 2 通过三点作二次插值多项式.....	20
§ 3 通过 $n+1$ 个点的 n 次插值多项式.....	22
§ 4 插值过程的收敛性.....	29
§ 5 分段线性插值.....	36
§ 6 带导数值的插值(埃米特插值).....	40
§ 7 分段三次埃米特插值.....	44
§ 8 高次埃米特插值.....	46
§ 9 三次样条(Spline)函数.....	49
§ 10 数值微分.....	59
习题.....	62
第三章 最小二乘法	67
§ 1 什么是最小二乘法.....	67
§ 2 用正交函数作最小二乘拟合.....	79
§ 3 广义逆矩阵及其与最小二乘法的联系.....	83
习题.....	92
第四章 最佳一致逼近	94
§ 1 维尔斯特拉斯(Weierstrass)定理.....	94

§ 2	用三角多项式一致逼近周期连续函数	96
§ 3	用多项式一致逼近连续函数	98
§ 4	最佳逼近 切比雪夫定理	102
§ 5	切比雪夫多项式	110
§ 6	用切比雪夫多项式降低逼近多项式的阶	112
§ 7	最佳一致逼近多项式的一个近似求法	115
	习题	123
第五章 快速富利叶变换(FFT)		125
§ 1	三角函数插值或有限富利叶变换	125
§ 2	快速富利叶变换	127
§ 3	计算步骤举例	131
	习题	135
第六章 数值积分		136
§ 1	牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)公式	136
§ 2	低阶求积公式的复合使用	144
§ 3	梯形公式误差的再分析	147
§ 4	欧拉-马克劳林(Euler-MacLaurin)公式	148
§ 5	理查逊(Richarson)外推法	152
§ 6	龙伯格(Romberg)方法	153
§ 7	高斯求积公式	164
§ 8	求积过程的收敛性	170
§ 9	振荡函数的积分	173
	习题	179
第七章 非线性方程和方程组的解法		182
§ 1	求实方程实根的平分区间法	182
§ 2	迭代法	184
§ 3	求实方程实根的弦截法	186
§ 4	牛顿法	190
§ 5	米勒(Müller)法或抛物线法	193
§ 6	求多项式根的劈因子法	196
§ 7	解非线性方程组的牛顿法	200

习题	205
第八章 常微分方程初值问题的数值解法	207
§ 1 一阶常微分方程的初值问题及其几种简单的数值解法	207
§ 2 RK 方法	219
§ 3 一般显式一步方法	226
§ 4 线性多步法	229
§ 5 一般的线性多步法	233
§ 6 线性多步法的绝对稳定性	237
§ 7 一阶方程组	239
§ 8 刚性方程组	241
习题	252

第一章 误差

§ 1 误差的来源

用数学方法解决一个具体的科学技术问题，首先要建立它的数学模型，就是要把这个具体问题经过抽象，简化成一个确定的数学问题。数学模型总是近似的，它本身包含了“模型误差”，这种误差会影响结果的好坏。因此，要减少这种影响，就要研究如何提出更为合适的数学模型。这是该具体问题所属专门学科研究的问题，不归数值分析这门学科讨论。

在数学模型确定之后，由于具体的科技问题总包含一些观测数据，这些数据也包含在数学模型中。观测数据是由人用测量工具观测到的，它们不可能绝对准确，总包含一定的“量测误差”，这种误差是不可避免的。

在用计算方法求数学问题的数值解时，也常遇到下面的一些典型问题。如求一个无穷级数之和，总是用它前面的若干项之和来代替，也就是截去了该级数的后段，这就引进了误差。这类误差叫做“截断误差”。例如，

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots,$$

当 $|x|$ 小时，我们可以用 x 作为 $\sin x$ 的近似值。根据收敛的无穷交错级数的理论，它的截断误差的绝对值不会超过 $\frac{1}{6}|x|^3$ 。

又如在计算机上，最简单的有理数如 $1/3$ ， $1/7$ 等都只能用有穷多位小数代替。至于无理数如 π ， e ， $\sqrt{2}$ 等就更是这样。这都要产生截断误差。

最后,在作乘法、除法时,得到的积和商都只能保留一定的位数,这也要引起误差,这就是“舍入误差”。比如作4位数乘4位数的乘法,若乘积只许保留4位,通常把第5位数字进行“四舍五入”。这就是若第5位数字 <5 则用前4位作为乘积;若第5位数字 ≥ 5 ,则在第4位上加1,并用这个结果的前4位作为乘积。

初始数据误差,截断误差和舍入误差对于计算结果的影响,都是计算方法中要研究的问题。

§2 误差与误差限 有效数字

设 x^* 代表准确值 x 的近似值,这个近似值的误差 e^* 为

$$e^* = x^* - x.$$

于是 $x^* - e^* = x$, 即近似值减去它的误差就是该量的准确值。误差是可正可负的。

一般我们不能算出准确值 x , 也不能算出误差 e^* 的准确值。我们只能根据测量的工具或计算的情况,估计出误差的绝对值的一个上界 e^* , 通常叫做近似值 x^* 的误差限,误差限总是正数。对于近似值为 x^* , 误差限为 e^* 的数 x 也常记作 $x = x^* \pm e^*$ 。

例 “四舍五入”的误差限。

设 x 为一实数,其十进制表示的标准形式为

$$x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n a_{n+1} \cdots \times 10^m, \quad (1.2.1)$$

其中 m 为整数, $a_1 \neq 0$ 且 $0 \leq a_i \leq 9, i = 1, 2, 3, \dots$ 。若经过四舍五入,保留几位数字,得到的近似值 x^* 为

$$x^* = \begin{cases} \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m, & \text{当 } a_{n+1} \leq 4 \text{ 时(称为四舍);} \\ \pm 0.a_1 a_2 \cdots (a_n + 1) \times 10^m, & \text{当 } a_{n+1} \geq 5 \text{ 时(称为五入).} \end{cases}$$

四舍时的误差限为

$$\begin{aligned} |x - x^*| &= 10^m \{0.a_1 a_2 \cdots a_n a_{n+1} \cdots - 0.a_1 a_2 \cdots a_n\} \\ &\leq 10^m \{0.a_1 a_2 \cdots a_n 499 \cdots - 0.a_1 a_2 \cdots a_n\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= 10^m \times \underbrace{0.0 \cdots 0}_{n \text{ 个 } 0} 499 \cdots \\
 &\leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}.
 \end{aligned}$$

五入时的误差限为

$$\begin{aligned}
 |x - x^*| &= 10^m \{0.a_1 a_2 \cdots (a_n + 1) - 0.a_1 a_2 \cdots a_n a_{n+1} \cdots\} \\
 &\leq 10^m \{ \underbrace{0.00 \cdots 01}_{(n-1) \text{ 个 } 0} - \underbrace{0.00 \cdots 0 a_{n+1} \cdots}_{n \text{ 个 } 0} \} \\
 &\leq 10^{m-n} \{1 - 0.a_{n+1}\}.
 \end{aligned}$$

由于此时 $a_{n+1} \geq 5$, 故 $\{1 - 0.a_{n+1}\} \leq 1/2$. 因此也有

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}.$$

所以, 不论是四舍还是五入, 误差限都是被保留的最后数位上的半个单位.

有效数字 设数 x 的近似值为 x^* . x^* 的标准形式设为

$$x^* = \pm 10^m \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n \cdots,$$

其中 $a_1 \neq 0, 0 \leq a_i \leq 9, i = 1, 2, 3, \dots, m$ 为整数. 如果

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n},$$

则称 x^* 为 x 的具有 n 位有效数字的近似数.

例 我们采用迭代法计算 $\sqrt{7}$, 取

$$\begin{cases} x_0 = 2, \\ x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{7}{x_k} \right), k = 0, 1, 2, \dots \end{cases}$$

若 x_k 是 $\sqrt{7}$ 的具有 n 位有效数字的近似值, 则 x_{k+1} 是 $\sqrt{7}$ 的具有 $2n$ 位有效数字的近似值.

解 首先

$$x_k = \frac{1}{2} \left(x_{k-1} + \frac{7}{x_{k-1}} \right) \geq \sqrt{x_{k-1} \cdot \frac{7}{x_{k-1}}} = \sqrt{7},$$

故

$$\begin{aligned}x_{k+1} - \sqrt{7} &= \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{7}{x_k} \right) - \sqrt{7} = \frac{(x_k - \sqrt{7})^2}{2x_k} \\ &\leq \frac{(x_k - \sqrt{7})^2}{2\sqrt{7}}.\end{aligned}$$

又因 $1 < x_0 < 7$, 可用归纳法证明对任意 $k > 0$ 恒有 $1 < x_k < 7$. 所以对任意 $k > 0$, 均有 $x_k = 10 \times 0.a_1 a_2 a_3 \cdots$, $a_1 \neq 0$, 而 $m = 1$. 又 x_k 具有 n 位有效数字, 即

$$|x_k - \sqrt{7}| \leq \frac{1}{2} \times 10^{1-n},$$

故

$$\begin{aligned}|x_{k+1} - \sqrt{7}| &\leq \frac{1}{2\sqrt{7}} (x_k - \sqrt{7})^2 \leq \frac{1}{2\sqrt{7}} \left(\frac{1}{2} \times 10^{1-n} \right)^2 \\ &= \frac{1}{2} \times 10^{1-2n} \cdot \frac{10}{4\sqrt{7}} < \frac{1}{2} \times 10^{1-2n}.\end{aligned}$$

这说明 x_{k+1} 具有 $2n$ 位有效数字. □

所以, 如果近似值 x^* 的误差限是某一位上的半个单位, 由该位到 x^* 的第一位非零数字一共有 n 位, x^* 就有 n 位有效数字, 我们也说 x^* 准确到该位. 用四舍五入法取准确值的前 n 位作为近似值 x^* , 则 x^* 有 n 位有效数字, 其中每一位数字也都叫做 x^* 的有效数字. 但是, 如果 x^* 准确到某位数字, 把这位数字以后的数字进行四舍五入(可简称舍入)则不一定得到有效数字. 例如, 3.145 作为 π 的近似值准确到百分位, 四舍五入得 3.15, 其最后一位不是有效数字了. 3.15 只有两位有效数字.

设 x^* 是 x 的近似值, y^* 是 y 的近似值. 自然, $x^* \pm y^*$ 是 $x \pm y$ 的近似值, 它的误差是

$$(x^* \pm y^*) - (x \pm y) = (x^* - x) \pm (y^* - y),$$

即和(差)的误差是误差的和(差). 但是,

$$|(x^* \pm y^*) - (x \pm y)| \leq |x^* - x| + |y^* - y|,$$

因此误差限之和是和或差的误差限。

§ 3 相对误差与相对误差限

误差限的大小还不能完全反映近似值的好坏。例如，若 $x = 10 \pm 1$, $y = 1000 \pm 5$, 则

$$x^* = 10, y^* = 1000, e_x^* = 1, e_y^* = 5.$$

显然 $e_y^* = 5e_x^*$, 即 y 的误差限是 x 的误差限的 5 倍, 但是 $e_y^*/y^* = 5/1000$, $e_x^*/x^* = 1/10$, x^* 的误差范围为 10% 而 y^* 的则不超过 5%。显然 y^* 对于 y 的近似程度远比 x^* 对于 x 的近似程度好。所以用近似值的误差与准确值的比值

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

来衡量误差, 更能反映实际, 通常称之为相对误差。但在实际计算中, 准确值 x 总是未知的。所以, 一般用

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

作为相对误差, 要比用 e^*/x 更方便。同时, 只要 e_r^* 比较小, 二者的差

$$\begin{aligned} \frac{e^*}{x} - \frac{e^*}{x^*} &= \frac{e^*(x^* - x)}{xx^*} = \frac{(e^*)^2}{x^*(x^* - e^*)} \\ &= \left(\frac{e^*}{x^*}\right)^2 \bigg/ \left(1 - \frac{e^*}{x^*}\right) \end{aligned}$$

是 e_r^* 的平方项级, 可以忽略不计。所以, 改用 e_r^* 作为相对误差是合适的。

相对误差也是可正可负的, 它的绝对值的上界叫做相对误差限, 记作 e_r^* , 自然, 若 e^* 是 x^* 的误差限, 则 $e^*/|x^*|$ 是 x^* 的一个相对误差限。

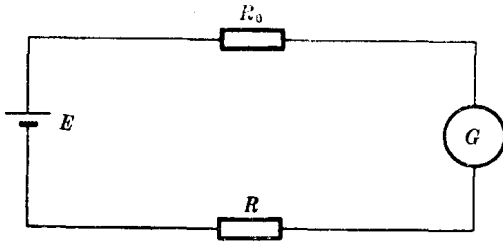
为了区别相对误差与前文讲的误差，我们有时把后者叫做**绝对误差**；同样，把前文讲的误差限叫做**绝对误差限**，但要注意，绝对误差并非误差的绝对值。

例如，光速 $C = (2.997925 \pm 0.000001) \times 10^{10}$ 厘米/秒。所以

$$\frac{\varepsilon^*}{|x^*|} = \frac{0.000001}{2.997925} < 0.0000004,$$

即 $C^* = 2.997925 \times 10^{10}$ 厘米/秒的相对误差限是 4×10^{-7} 。 C^* 是目前光速的公认值。

例 如下图所示的欧姆计电路。测量未知电阻 R 时，设观测刻度的误差不变。求证当 $R = R_0$ 时测量电阻的相对误差最小。



解 测量电阻 R 是通过显示在电流计 G 上的电流值来实现的。设 G 的满度电流为 I_0 ，则 $I_0 = E/R_0$ 。接上电阻 R 流经 G 的电流为 $I = E/(R + R_0)$ ，因此

$$I/I_0 = R_0/(R + R_0) = 1/(1 + R/R_0).$$

若记 $x = R/R_0$ ，则 $I/I_0 = (1 + x)^{-1} \equiv f(x)$ 是决定电阻表盘刻度的函数。由

$$df(x) = -(1 + x)^{-2} dx, \quad x = R/R_0,$$

R 的相对误差

$$\begin{aligned} \left| \frac{dR}{R} \right| &= \left| \frac{dx}{x} \right| = \frac{(1+x)^2}{x} |df| = \left(\sqrt{x} + \frac{1}{\sqrt{x}} \right)^2 |df| \\ &\geq 4|df|, \end{aligned}$$

此处等号仅当 $x=1$ 时成立。可见，如果观察刻度的误差 $|df|$ 一

定, 则当 $x=1$ 时, 即当 $R=R_0$ 时, 测量电阻的相对误差 $\left|\frac{dR}{R}\right|$ 最小.

所以一般只有对 R_0 附近的 R , 才能保证测量时的相对误差较小, 这就是欧姆计要分档的道理.

下面定理给出相对误差限 e_r^* 与有效数字之间的关系.

定理 1 (1) 设 $x^* = \pm 10^m \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n \cdots$, $a_1 \neq 0$, 是 x 的具有 n 位有效数字的近似值, 则

$$e_r^* \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}.$$

(2) 设 $x^* = \pm 10^m \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n \cdots$, $a_1 \neq 0$, 是 x 的一个近似值, 相对误差限

$$e_r^* \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{1-n},$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证明 (1) 的证明是直接的, 现证明(2). 由于

$$|x^*| \leq (a_1 + 1) \times 10^{m-1},$$

故

$$\begin{aligned} |x - x^*| &= |x^*| e_r^* \leq (a_1 + 1) \times 10^{m-1} \times \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{1-n} \\ &= \frac{1}{2} \times 10^{m-n}, \end{aligned}$$

所以 x^* 至少有 n 位有效数字. □

从本节例题可以看出, 微分是认识绝对误差和相对误差的一个有效工具. x^* 作为 x 的近似值的误差 $e^* = x^* - x$ 可看作 x 的微分:

$$dx = x^* - x;$$

x^* 作为 x 的近似值的相对误差是

$$e_r^* = \frac{x^* - x}{x} = \frac{dx}{x} = d(\ln x),$$

它是 x 的对数微分.

由微分公式

$$d(\ln(xy)) = d(\ln x) + d(\ln y),$$

及

$$d(\ln(x/y)) = d(\ln x) - d(\ln y),$$

我们得到关于乘积与商的相对误差的定理:

定理 2 (1) 乘积的相对误差是各因子的相对误差之和;

(2) 商的相对误差是被除数的相对误差减去除数的相对误差之差.

由此可见, 两近似数的积与商的相对误差限是各数相对误差限之和.

§ 4 误差危害现象及其防止

1 两个相近的数作减法时有效数字会损失.

两数 x 与 y 之差 $u = x - y$ 的相对误差是

$$d \ln u = \frac{dx - dy}{x - y}.$$

如果 x 和 y 很接近, $x - y$ 就很小, 因而 u 的相对误差就大. 这是由于 x^* 与 y^* 接近, 它们的前面几位有效数字必然相同, 作减法后, 差 $x^* - y^*$ 的有效数字就减少了几位, $x^* - y^*$ 的相对误差就增大了. 遇到这种情形, 最好改变计算公式, 以防止出现相近数的相减. 实在没有办法时, 就要多保留几位有效数字, 再进行减法运算.

例 为了求 $x = 1 - \cos 2^\circ$, 用四位数学用表做工具, 采用两种不同算法. 我们比较这两种算法结果的误差.

算法 1

$$x=1-c, \quad c=\cos(2^\circ) \xrightarrow{\text{查表}} c^*=0.9994,$$

$$\uparrow |c^*-c| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4} \uparrow$$

因此 $x_1^*=1-c^*=6 \times 10^{-4}$, $|x-x_1^*|=|c-c^*| \leq 0.5 \times 10^{-4}$.

算法 2

$$x=2s^2, \quad s=\sin(1^\circ) \xrightarrow{\text{查表}} s^*=0.0175,$$

$$\uparrow |s^*-s| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4} \uparrow$$

因此 $x_2^*=2 \times (s^*)^2=6.125 \times 10^{-4}$.

但是

$$|\varepsilon_r^{(1)}| = \frac{|x_1^*-x|}{|x_1^*|} = \frac{|c^*-c|}{|x_1^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{-4}}{6 \times 10^{-4}} = \frac{1}{12},$$

而

$$|\varepsilon_r^{(2)}| = \frac{|x_2^*-x|}{|x_2^*|} = \frac{2|s^{*2}-s^2|}{|x_2^*|} = \frac{2|s^*-s| \cdot |s^*+s|}{|x_2^*|}.$$

由于

$$s = \sin \frac{\pi}{180} < \frac{\pi}{180} < \frac{3.1416}{180} < 0.0175 = s^*,$$

因而

$$|\varepsilon_r^{(2)}| < \frac{2|s^*-s| \cdot 2s^*}{2s^{*2}} \leq \frac{2 \times \frac{1}{2} \times 10^{-4}}{0.0175} = \frac{1}{175},$$

于是

$$|x_2^*-x| \leq |x_2^*| \cdot |\varepsilon_r^{(2)}| \leq 6.125 \times 10^{-4} \times \frac{1}{175} = 0.035 \times 10^{-4}.$$

x_2^* 的相对误差限比 x_1^* 小, 可知 x_2^* 的有效数字较多.

今证 x_2^* 的绝对误差比 x_1^* 的小. 用反证法. 设

$$|x_2^*-x| < |x_1^*-x| \quad (1.4.1)$$

不成立, 则有 $|x_1^* - x| \leq |x_2^* - x|$. 于是

$$0.125 \times 10^{-4} = |x_1^* - x_2^*| \leq |x_1^* - x| + |x_2^* - x| \\ \leq 2|x_2^* - x| \leq 0.07 \times 10^{-4}.$$

这个不等式显然是错误的, 而这个错误是由反证法的假设造成的, 因此(1.4.1) 成立. 这说明算法 2 比算法 1 好. 因为前者算出的绝对误差小.

这个例子也说明, 在数学分析中

$$1 - \cos \alpha \equiv 2 \sin^2 \frac{\alpha}{2}, \quad (1.4.2)$$

但在数值分析中, 由于是用近似值作运算, 按(1.4.2)的两端算出的结果并不一定相等. 当 α 小时, 按左边计算, 出现两个相近的数相减, 要损失有效数字; 若按右边计算, 则误差较小.

2 大数“吃”小数的现象.

例如求二次方程 $x^2 - (10^9 + 1)x + 10^9 = 0$ 的根时, 由因式分解, 知其两根为 $x_1 = 10^9$ 及 $x_2 = 1$. 但是如果按公式

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

编制程序让计算机计算, 而设这个计算机只能将数表达达到小数点后 8 位, 那末

$$-b = 10^9 + 1 = 0.1 \times 10^{10} + 0.1 \times 10^1.$$

由于在机器中两数相加时, 要先对阶(即把两数都写成绝对值小于 1 而阶码相同的数), 此时阶码小的数的阶码要升高得和阶码大的数的一样:

$$-b = 0.1 \times 10^{10} + 0.000,000,000,1 \times 10^{10}.$$

由于机器只能表示 8 位小数, 所以

$$-b \triangleq 0.1 \times 10^{10} = 10^9 \quad (\triangleq \text{表示在机器中相等}).$$

同理