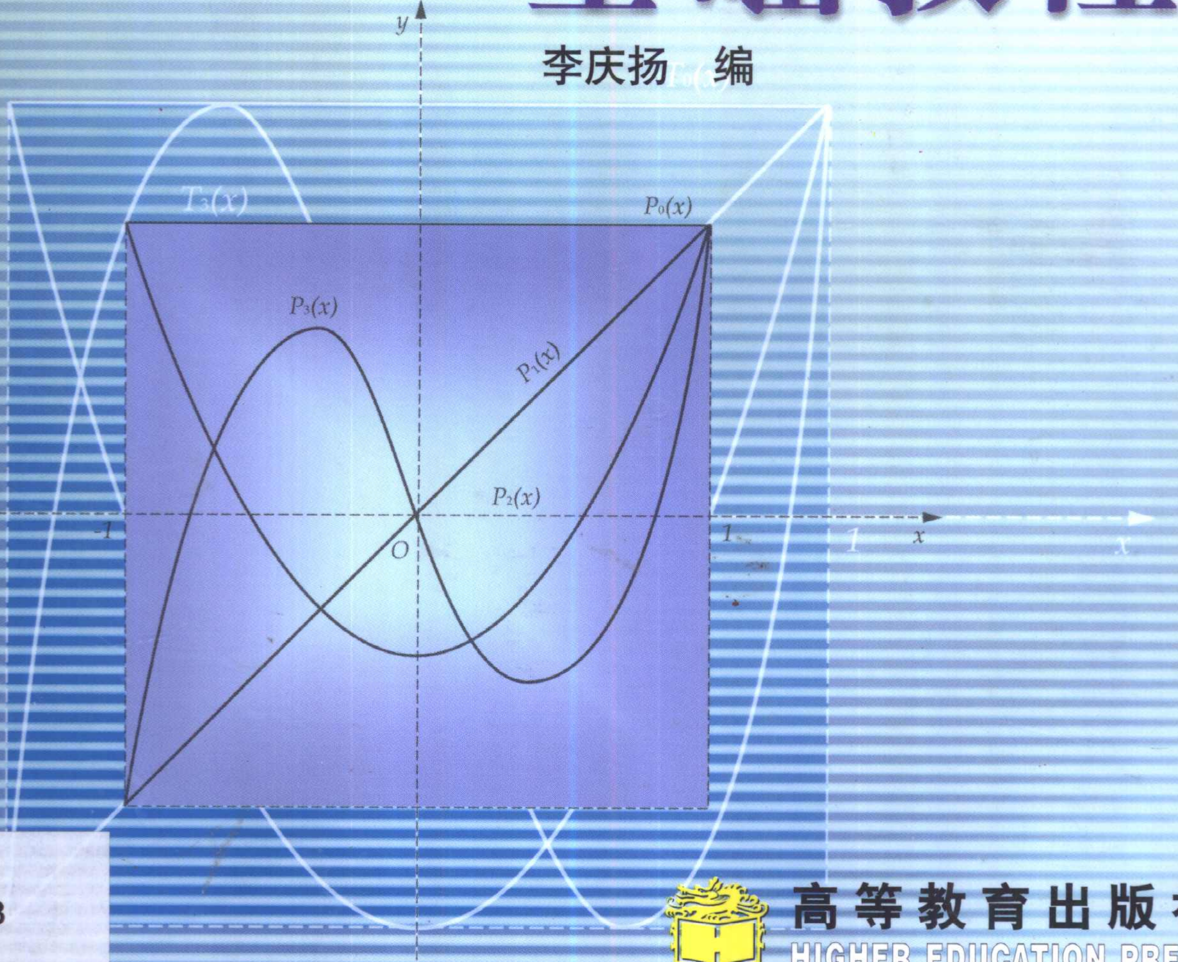
高等学校研究生系列教材

数值分析基础教程

李庆扬 编



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

内容提要

本书是根据工程硕士"数值分析"课程教学基本要求和同等学力人员申请硕士学位全国统一考试"数值分析"大纲编写的.

主要内容有数值计算的误差,方程求根,解线性方程组的直接法与迭代法,插值与最小二乘法,数值积分,常微分方程数值解.每章附有习题其解答均在与该书配套的《数值分析复习与考试指导》(已由高等教育出版社出版)书中给出.书后还附有计算实验题.

本书适合作为工程硕士及同等学力人员申请硕士学位"数值分析"课程教材,也适合作为一般理工科研究生教材,还可以供科技人员学习参考.

图书在版编目(CIP)数据

数值分析基础教程/李庆扬编 .—北京:高等教育出版社,2001,5

ISBN 7-04-009850-4

Ⅰ.数… Ⅱ.李… Ⅲ.数值分析-研究生-教材 Ⅳ.0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 10473 号

责任编辑 雷顺加 **封面设计** 王凌波 **责任绘图** 尹文军
版式设计 史新薇 **责任校对** 殷 然 **责任印制** 宋克学

数值分析基础教程

李庆扬 编

出版发行 高等教育出版社
社　　址 北京市东城区沙滩后街 55 号　　**邮政编码** 100009
电　　话 010-64054588　　**传　　真** 010-64014048
网　　址 http://www.hep.edu.cn
http://www.hep.com.cn

经　　销 新华书店北京发行所
排　　版 高等教育出版社照排中心
印　　刷 北京二二〇七工厂

开　　本 787×1092　1/16　　**版　　次** 2001 年 5 月第 1 版
印　　张 9　　**印　　次** 2001 年 5 月第 1 次印刷
字　　数 200 000　　**定　　价** 14.60 元

前　言

本书是根据工程硕士“数值分析”课程教学基本要求和同等学力人员申请硕士学位全国统一考试大纲编写的.根据此要求编写的《数值分析复习与考试指导》(以下简称《指导》),已由高等教育出版社于2000年6月出版.由于没有找到与该书相配套的《数值分析》教材,因此该书所列参考书目中没有一本是完全合适的,其中由李庆扬、王能超、易大义编、华中理工大学出版社出版的《数值分析》与大纲较为接近,但它的内容偏多、偏深,不完全适合工程硕士研究生的教学要求.因此,编写一本适合工程硕士教学要求,并与《指导》一书相匹配的数值分析教材是很有必要的.

作者近年多次为工程硕士研究生讲授“数值分析”课程,长期讲授各种不同要求的“数值分析”课程,写过多种计算数学教材并编写了《指导》一书,积累了一些经验,能较好地掌握教学要求,因而编写的这本教材内容与《指导》一书完全配套,采用的符号也尽可能统一,书中习题也基本上采用了《指导》给出的习题.另外,为使学生更好地掌握数值计算方法,必须进行适当的上机实验,书后给出的数值实验题,供学生选做.

本书适合工程硕士及同等学力人员申请硕士学位的“数值分析”课程教材,也适合作为一般理工科院校研究生“数值分析”课程的教材(全部讲授完约需64学时),还可供科技人员学习参考.

本书编写得到高等教育出版社计算机编辑室的大力支持,在此表示衷心的感谢.希望使用本书的广大读者和教师,对本书缺点和不足之处提出批评指正.

作者

2001年2月

目 录

第一章 绪 论

1.1 “数值分析”研究对象与特点

“数值分析”是计算数学的一个主要部分.而计算数学是数学科学的一个分支,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.计算数学几乎与数学科学的一切分支有联系,它利用数学领域的成果发展了新的更有效的算法及其理论,反过来很多数学分支都需要探讨和研究适用于计算机的数值方法.因此,“数值分析”内容十分广泛.但本书作为“数值分析”基础,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、插值与最小二乘拟合、数值积分与常微分方程数值解法等.这些都是计算数学中最基础的内容.

近几十年来由于计算机的发展及其在各技术科学领域的应用推广与深化,新的计算性学科分支纷纷兴起,如计算力学、计算物理、计算化学、计算经济学等等,不论其背景与含义如何,要用计算机进行科学计算都必须建立相应的数学模型,并研究其适合于计算机编程的计算方法.因此,计算数学是各种计算性科学的联系纽带和共性基础,是一门兼有基础性、应用性和边缘性的数学学科.

计算数学作为数学科学的一个分支,当然具有数学科学的抽象性与严密科学性的特点,但它又具有广泛的应用性和边缘性特点.

现代科学发展依赖于理论研究、科学实验与科学计算三种主要手段,它们相辅相成,互相独立,可以互相补充又都不可缺少,作为三种科学研究手段之一的科学计算是一门工具性、方法性、边缘性的新学科,发展迅速,它的物质基础是计算机(包括其软硬件系统),其理论基础主要是计算数学.

计算数学与计算工具发展密切相关,在计算机出现以前,数值计算方法只能计算规模小的问题,并且也没形成单独的学科,只有在计算机出现以后,数值计算才得以迅速发展并成为数学科学中一个独立学科——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,计算机与计算方法的发展是相辅相成、互相促进的.计算方法的发展启发了新的计算机体系结构,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.例如为在计算机上求解大规模的计算问题、提高计算效率,诞生并发展了并行计算机.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、新课题和能充分发挥计算机潜力、有更大解题能力的新方法,这就构成了现代意义下的计算数学.这也是数值分析的研究对象与特点.

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:

第一,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.

第二,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,这些概念是刻画计算方法的可靠性、准确性、效率以及使用的方便性.

第三,要有良好的复杂性及数值试验,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代数中的 Cramer 法则作为算法求解,其乘除法运算次数需要 9.7×10^{20} 次,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 Gauss 消去法求解,其乘除法运算次数只需 3 060 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.本课程虽然只着重介绍数值方法及其理论,一般不涉及具体的算法设计及编程技巧,但作为基本要求仍希望读者能适当做一些计算机上的数值试验,它对加深算法的理解是很有好处的.

1.2 数值计算的误差

1.2.1 误差来源与分类

用计算机求解科学计算问题,首先由物理模型转化为数学模型时将会产生模型误差,还有许多物理量如温度、重量、长度等等都由观测得到,显然也会产生误差,这称为观测误差.所有这些不属于数学问题产生的误差,均不在"数值分析"讨论的范围内.本书只研究数值求解数学问题时产生的误差,它们主要有以下三类.

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 $f(x)=\mathrm{e}^x$ 的值,用 Taylor 公式展开前 4 项

$$\mathrm{e}^x\approx1+x+\frac{x^2}{2}+\frac{x^3}{6}=p_3(x)$$

当 $|x|<1$ 时其截断误差为

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

截断误差将结合有关数值方法进行讨论,数值方法的误差估计指的就是这类误差.

第二是舍入误差,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 0.333 3,$\pi\approx3.141\,6$ 等等,都有舍入误差.

第三类是输入数据误差,称为初始误差,这些误差对计算也将造成影响,但分析初始误差与对舍入误差分析相似,因此可将它归入第二类.

由于对大规模数值计算问题舍入误差目前尚无有效方法进行定量估计,所以我们主要进行定性分析.但对误差估计的基本概念及较简单的数值运算误差估计还需作简单介绍.

1.2.2 误差与有效数字

定义 2.1 设准确值 x 的近似值为 x^*,则 $\varepsilon = x - x^*$ 称为近似值 x^* 的绝对误差,简称误差,$\varepsilon_r = \dfrac{\varepsilon}{x}$ 称为近似值 x^* 的相对误差.

绝对误差可正可负,一般说 ε 的准确值很难求出,往往只能求 $|\varepsilon|$ 的一个上界 δ,即 $|\varepsilon| = |x - x^*| \leqslant \delta(x^*)$,称为 x^* 的误差限.相对误差 ε_r 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 $\varepsilon = \pi - x^* = 0.001\,592\,6\cdots$,$|\varepsilon| \leqslant 0.002 = \delta(x^*)$,为 x^* 的误差限,而相对误差限 $\delta_r(x^*) = \dfrac{\delta(x^*)}{3.14} < 0.007$.

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 $x^* = 3.14$,$\varepsilon \leqslant 0.002$;取 5 位 $x^* = 3.141\,6$,$\varepsilon \leqslant 0.000\,01$ 它们的误差限都不超过近似数 x^* 末位数的半个单位,即

$$|\pi - 3.14| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2}, \quad |\pi - 3.141\,6| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

定义 2.2 设 x^* 是 x 的一个近似数,表示为

$$x^* = \pm 10^k \times 0, a_1 a_2 \cdots a_n \tag{1.2.1}$$

每个 $a_i (i = 1,2\cdots,n)$ 均为 $0,1,\cdots,9$ 中的一个数字,$a_1 \neq 0$,如果 $|x - x^*| \leqslant \frac{1}{2} \cdot 10^{k-n}$,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 3.141 6 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,反之也对.

定理 2.1 设 x 的近似数 x^* 表示为式(1.2.1),如果 x^* 具有 n 位有效数字,则其相对误差限为

$$\frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leqslant \delta_r(x^*) = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} \tag{1.2.2}$$

反之,若

$$\frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leqslant \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-n+1} \tag{1.2.3}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证明 由式(1.2.1)可得

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

所以当 x^* 有 n 位有效数字时

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

反之,由式(1.2.3)有

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

$$= \frac{1}{2} \times 10^{k-n}$$

故 x^* 有 n 位有效数字.　　证毕.

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) $x = 0.030\ 021 \approx 0.030\ 0 = x^*$.

解(1) 由 $|\mathrm{e} - 2.718\ 28| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-5}$,因 $k=1$,故 $n=6$ 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) $|x - 0.030\ 0| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-4}$,因 $k = -1$,故 $n=3$,即有 3 位有效数字,由 $a_1 = 3$ 知 $\delta_r(x^*) \leqslant \frac{1}{6} \times 10^{-2}$.

1.2.3　函数计算的误差估计

设一元函数 $f(x)$具有二阶导数,自变量 x 的一个近似值 x^*,$f(x)$的近似值为 $f(x^*)$,用 $f(x)$在 x^* 点的 Taylor 展开估计误差,可得

$$|f(x) - f(x^*)| \leqslant |f'(x^*)(x-x^*)| + \frac{1}{2}|f''(\xi)(x-x^*)^2|$$

其中 ξ 在 x 与 x^* 之间,如果 $f'(x^*) \neq 0$,$|f''(\xi)|$ 与 $|f'(x^*)|$ 有相同数量级,而 $\delta(x^*) \geqslant |x - x^*|$很小,则可得

$$\delta f(x^*) \approx |f'(x^*)|\delta(x^*),\ \delta_r f(x^*) \approx \left|\frac{f'(x^*)}{f(x^*)}\right|\delta(x^*) \tag{1.2.4}$$

分别为 $f(x^*)$的一个近似误差限与相对误差限.

如果 f 为多元函数,自变量为 $x_1, \cdots, x_n$,其近似值为 $x_1^*, \cdots, x_n^*$,则类似于一元函数可用多元函数 $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$的 Taylor 展开,取一阶近似得误差限

$$\delta f(x_1^*, \cdots, x_n^*) \approx \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i}\right| \delta(x_i^*) \tag{1.2.5}$$

及相对误差限

$$\delta_r f(x_1^*, \cdots, x_n^*) \approx \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i}\right| \frac{\delta(x_i^*)}{|f(x_1^*, \cdots, x_n^*)|} \tag{1.2.6}$$

若把(1.2.5)用到两个或多个数的算术运算中,则可得到近似数 x_1^* 及 x_2^* 的四则运算误差估计:

$$\delta(x_1^* \pm x_2^*) = \delta(x_1^*) + \delta(x_2^*) \tag{1.2.7}$$

$$\delta(x_1^* x_2^*) = |x_1^*|\delta(x_2^*) + |x_2^*|\delta(x_2^*) \tag{1.2.8}$$

$$\delta\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) = \frac{|x_1^*|\delta(x_2^*) + |x_2^*|\delta(x_1^*)}{|x_2^*|^2}, x_2^* \neq 0 \tag{1.2.9}$$

例 1.3 已测得某场地长 l 的值为 $l^* = 110$ m,宽 d 的值为 $d^* = 80$ m,已知 $|l - l^* \leqslant 0.2$ m, $|d - d^*| \leqslant 0.1$ m,试求面积 $S = ld$ 的绝对误差限与相对误差限.

解 因 $S = ld, \frac{\partial S}{\partial l} = d, \frac{\partial S}{\partial d} = l$,由(1.2.5)知

$$\delta(S^*) = \left|\left(\frac{\partial S}{\partial l}\right)^*\right|\delta(l^*) + \left|\left(\frac{\partial S}{\partial d}\right)^*\right|\delta(d^*)$$

其中 $\left(\frac{\partial S}{\partial l}\right)^* = d^* = 80$ m, $\left(\frac{\partial S}{\partial d}\right)^* = l^* = 110$ m, $\delta(l^*) = 0.2$ m, $\delta(d^*) = 0.1$ m,从而有

$$\delta(S^*) = 80 \times 0.2 + 110 \times 0.1 = 27 \text{ m}^2$$

相对误差限为

$$\delta_r(S^*) = \frac{\delta(S^*)}{|S^*|} = \frac{27}{80 \times 110} = 0.31\%$$

1.3 误差定性分析与避免误差危害

上面给出的误差估计方法只对运算量很少的情形适用,对大规模数值计算的舍入误差估计目前尚无有效的方法做出定量估计,为了确保数值计算结果的正确性,应对数值计算问题进行定性分析,以保证其舍入误差不会影响计算的精度,这就是本节要讨论的问题.

1.3.1 病态问题与条件数

对一个数值问题,往往由于问题本身而使计算结果相对误差很大,这种问题就是病态问题.例如计算函数值 $f(x)$,若 x 的近似值为 x^*,其相对误差为 $\frac{x - x^*}{x}$,函数值 $f(x^*)$ 的相对误差为 $\frac{f(x) - f(x^*)}{f(x)}$,它们相对误差之比的绝对值为

$$\left|\frac{[f(x) - f(x^*)]/f(x)}{(x - x^*)/x}\right| \approx \left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right| = C_p \tag{1.3.1}$$

C_p 称为计算函数值 $f(x)$ 的条件数,如果 C_p 很大,将引起函数值 $f(x^*)$ 的相对误差很大,出现这种情况时,就认为问题是病态的.例如 $f(x) = x^n, f'(x) = nx^{n-1}$,则 $C_p = n$,它表示相对误差可能放大 n 倍.如 $n = 10$,有 $f(1) = 1, f(1.02) \approx 1.24$,若 $x = 1, x^* = 1.02$,则自变量相对误差为 2%,而函数值 $f(1.02)$ 的相对误差为 24%,这时就认为问题是病态的.一般情况下若条件数

$C_p \geqslant 10$，则认为是问题病态，C_p 越大病态越严重.

其他计算问题也要分析是否病态，例如解线性方程组，如果输入数据有微小误差，引起解的误差绝对值很大，就认为是病态方程组.

例 1.4 求解方程组

$$\begin{cases} x + \alpha y = 1 \\ \alpha x + y = 0 \end{cases}$$

解 当 $\alpha = 1$，系数矩阵奇异，方程无解，当 $\alpha \neq 1$，解为 $x = \frac{1}{1-\alpha^2}$，$y = \frac{\alpha}{1-\alpha^2}$，当 $\alpha \approx 1$，若输入数据 α 有误差，则解的误差很大，例如，当 $\alpha = 0.99$，解 $x \approx 50.25$，当 α 有误差，$\alpha^* = 0.991$，则解 $x^* \approx 55.81$，误差 $|x - x^*| \approx 5.56$ 很大，问题病态. 对此例中 $x = (1-\alpha^2)^{-1}$ 应用式(1.3.1)求 C_p 得

$$C_p = \left| \frac{\alpha x'(\alpha)}{x(\alpha)} \right| = \left| \frac{2\alpha^2}{1-\alpha^2} \right|$$

当 $\alpha = 0.99$ 时 $C_p \approx 100$，故问题病态. 只当 $|\alpha| \ll 1$ 时问题才为良态.

1.3.2 算法的数值稳定性

一个数值方法进行计算时，由于原始数据有误差，在计算中这些误差会传播，有时误差增长很快使计算结果误差很大，影响了结果不可靠.

定义 3.1 一个算法如果原始数据有扰动(即误差)，而计算过程舍入误差不增长，则称此算法是数值稳定的. 否则，若误差增长则称算法不稳定.

例 1.5 计算积分 $I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx, n = 0, 1, \cdots$.

当 $n = 0$ 时，$I_0 = 1 - e^{-1}$，对 I_n 用分部积分法得

$$I_n = 1 - nI_{n-1}, n = 1, 2, \cdots \tag{1.3.2}$$

若计算 I_0 时取 $e^{-1} \approx 0.367\,9$ 由(1.3.2)依次计算 $I_1, \cdots, I_9$ 考察其计算结果是否正确.

解 由 $I_0 = 1 - e^{-1} \approx 0.632\,1 = I_0^*$，故有误差

$\varepsilon_0 = I_0 - I_0^*$，由式(1.3.2)，计算 $I_n^* = 1 - nI_{n-1}^*, n = 1, 2, \cdots, 9$ 得

$$\begin{array}{lll} I_1^* = 0.367\,9, & I_2^* = 0.264\,2, & I_3^* = 0.207\,4, \\ I_4^* = 0.170\,4, & I_5^* = 0.148\,0, & I_6^* = 0.112\,0, \\ I_7^* = 0.216\,0, & I_8^* = -0.728\,0, & I_9^* = 7.552. \end{array}$$

显然，结果不正确，因为 $I_n > 0$，而 $I_8^* < 0$. 实际上，$\varepsilon_n = I_n - I_n^* = -n(I_{n-1} - I_{n-1}^*) = \cdots = (-1)^n n! \varepsilon_0$，当 n 增大时 ε_n 是递增的，且 I_9^* 的误差达到 $-9! \varepsilon_0$，是严重失真的. 它表明式(1.3.2)给出的算法是不稳定的. 如果在式(1.3.2)中将算法改为

$$I_{n-1}=\frac{1}{n}(1-I_n),n=9,8,\cdots,2,1 \tag{1.3.3}$$

由于
$$\frac{1}{n+1}e^{-1}\leqslant I_n\leqslant\frac{1}{n+1},取\ I_n\approx\frac{1}{2}\frac{1}{n+1}(e^{-1}+1)$$

当 $n=9,I_9=\frac{1}{20}(1+e^{-1})\approx 0.068\,4=\tilde{I}_9$，再由式(1.3.3)，可求出 $\tilde{I}_8=0.103\,5,\cdots,\tilde{I}_2=0.264\,3$，$\tilde{I}_1=0.267\,3,\tilde{I}_0=0.632\,1$，此时 $\tilde{\varepsilon}_{n-1}=I_{n-1}-\tilde{I}_{n-1}=-\frac{1}{n}(I_n-\tilde{I}_n),|\tilde{\varepsilon}_0|=\frac{1}{n!}|\tilde{\varepsilon}_n|$，计算是稳定的.

数值不稳定的算法是不能使用的.

1.3.3 避免误差危害的若干原则

数值计算中除了要分清问题是否病态和算法的数值稳定性外，还应尽量避免误差危害.通常运算中应注意以下若干原则：

(1) 避免用绝对值很小的数做除法.

(2) 避免两个相近数相减，以免有效数字损失.

(3) 注意运算次序，防止大数“吃掉”小数，如多个数相加减，应按绝对值由小到大的次序运算.

(4) 简化计算步骤，尽量减少运算次数.

为了说明以上原则，下面给出一些例题.

例 1.6 求 $x^2-16x+1=0$ 的小正根.

解 方程的两根为 $x_1=8-\sqrt{63}$ 及 $x_2=8+\sqrt{63}$，小正根 $x_1=8-\sqrt{63}\approx 8-7.94=0.06$ 只有一位有效数字.为避免两相近数相减可改用 $x_1=8-\sqrt{63}=\frac{1}{8+\sqrt{63}}\approx\frac{1}{15.94}\approx 0.062\,7$ 仍有三位有效数字.

例 1.7 求 $x=1-\cos 2^\circ\approx 1-0.999\,4=0.000\,6$，若改用

$1-\cos 2^\circ=\frac{(\sin 2^\circ)^2}{1+\cos 2^\circ}\approx\frac{(0.034\,90)^2}{1.999\,4}\approx 6.092\times 10^{-4}$，具有四位有效数字.

例 1.8 计算多项式

$$p(x)=a_nx^n+\cdots+a_1x+a_0$$

的值，若直接计算 $a_kx^k(k=1,\cdots,n)$ 再逐项相加，需进行 $1+2+\cdots+n=\frac{n(n+1)}{2}$ 次乘法和 n 次加法，若采用以下算法：

$$S_n=a_n,S_k=xS_{k+1}+a_k,k=n-1,n-2,\cdots,1,0 \tag{1.3.4}$$

只需 n 次乘法和 n 次加法，则得 $p(x)=S_0$，此算法称为秦九韶算法，也称霍纳(Horner)算法.(秦九韶于 1247 年提出此算法.比霍纳 1819 年提出此算法早 500 多年).

习　题　一

1. 设 $x>0$，x^* 的相对误差限为 δ，求 $f(x)=\ln x$ 的误差限.

2. 下列各数都是经过四舍五入得到的近似值，试指出它们有几位有效数字，并给出其误差限与相对误差限.

$$x_1^*=1.102\ 1,\quad x_2^*=0.031,\quad x_3^*=560.40$$

3. 下列公式如何计算才比较准确？

(1) $\dfrac{e^{2x}-1}{2}$，$|x|\ll 1$

(2) $\displaystyle\int_N^{N+1}\frac{1}{1+x^2}dx$，$N\gg 1$

(3) $\sqrt{x+\dfrac{1}{x}}-\sqrt{x-\dfrac{1}{x}}$，$|x|\gg 1$

4. 序列 $\{y_n\}$ 满足递推关系 $y_n=10y_{n-1}-1$，$n=1,2,\cdots$，若 $y_0=\sqrt{2}\approx 1.41$，计算到 y_{10} 时误差有多大？这个计算数值稳定吗？

5. 计算 $x=(\sqrt{2}-1)^6$，取 $\sqrt{2}\approx 1.41$，直接计算 x 和利用以下等式

$$\frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6},\quad (3-2\sqrt{2})^3,\quad \frac{1}{(3+2\sqrt{2})^3},\quad 99-70\sqrt{2}$$

计算，哪一个最好？

第二章 方程求根

2.1 方程求根与二分法

2.1.1 引言

单个变量的方程

$$f(x)=0 \tag{2.1.1}$$

求根是数值计算经常遇到的问题. 当 $f(x)$为一般连续函数时,称式(2.1.1)为超越方程,如果 f 为多项式

$$f(x)=p(x)=a_0x^n+a_1x^{n-1}+\cdots+a_{n-1}x+a_n=0 \tag{2.1.2}$$

若 $a_0\neq 0$, $p(x)$为 n 次多项式,此时方程(2.1.1)称为代数(或多项式)方程. 如果 x^*(实数或复数)使 $f(x^*)=0$,则称 x^* 为方程(2.1.1)的根,若 $f(x)=(x-x^*)^m g(x)$, $m\geqslant 1$,且 $g(x^*)\neq 0$,当 $m>1$ 时,称 x^* 为方程(2.1.1)的 m 重根或称 x^* 是 f 的 m 重零点. 若 x^* 是 f 的 m 重零点,且 g 充分光滑,则 $f(x^*)=f'(x^*)=\cdots=f^{(m-1)}(x^*)=0$. 当 f 为式(2.1.2)表示的代数多项式时,根据代数基本定理可知方程(2.1.1)有 n 个根(含复根, m 重根为 m 个根),对 $n=2$ 的代数方程

$$ax^2+bx+c=0$$

它的根可由公式表示为

$$x_{1,2}=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

而当 $n=3,4$ 时方程的根虽可用公式表示,但表达式太复杂,一般不用,当 $n\geqslant 5$ 已没有直接用公式表达的求根算法. 因此对 $n\geqslant 3$ 的代数方程求根方法与一般超越方程(2.1.1)一样都采用迭代方法求根,设 $f\in C[a,b]$(表示 f 在区间$[a,b]$上连续),若有 $f(a)f(b)<0$,则 $f(x)=0$ 在区间$[a,b]$上至少有一个实根,$[a,b]$称为有根区间,通常可用逐次搜索法求得方程(2.1.1)的有根区间.

例 2.1 求方程 $f(x)=x^3-11.1x^2+38.8x-41.77=0$ 的有根区间.

解 根据有根区间定义,对方程的根进行搜索计算,结果如下表:

x	0	1	2	3	4	5	6
$f(x)$符号	−	−	+	+	−	−	+

方程的三个有根区间为[1,2],[3,4],[5,6].

2.1.2 二分法

设 $f\in C[a,b]$,且$[a,b]$为有根区间,取中点 $x_0=\dfrac{a+b}{2}$,将它分为两半,检查$f(x_0)$与 $f(a)$是否同号,若是,说明根 x^* 仍在 x_0 右侧,取 $a_1=x_0$, $b_1=b$,否则取 $a_1=a$,$b_1=x_0$,得到新的有根区间$[a_1,b_1]$长度仅为$[a,b]$的一半(见图 2-1).重复以上过程,即取 $x_1=\dfrac{a_1+b_1}{2}$,将$[a_1,b_1]$再分半,确定根在 x_1 的哪一侧,得到新区间$[a_2,b_2]$,其长度为$[a_1,b_1]$的一半,从而可得一系列有根区间

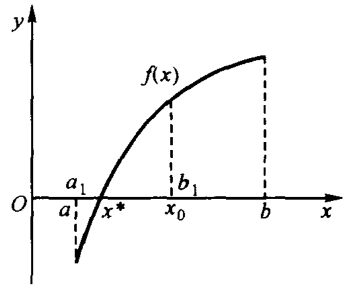


图 2-1

$$[a,b]\supset[a_1,b_1]\supset[a_2,b_2]\supset\cdots\supset[a_n,b_n]\supset\cdots$$

其中每一个区间长度都是前一个区间长度的一半,因此,$[a_n,b_n]$的长度为

$$b_n-a_n=\frac{b-a}{2^n}$$

且 $\lim\limits_{n\to\infty}x_n=\lim\limits_{n\to\infty}\dfrac{a_n+b_n}{2}=x^*$,$x_n$ 即为方程(2.1.1)的根 x^* 的一个足够精确的近似根,且误差为

$$|x_n-x^*|\leqslant\frac{b_n-a_n}{2}=\frac{b-a}{2^{n+1}} \tag{2.1.3}$$

以上过程称为解方程的二分法.它计算简单且收敛性有保证,但收敛较慢,通常可用于求迭代法的一个足够好的初始近似.

例 2.2 求方程 $f(x)=x^3-x-1=0$ 在区间[1.0,1.5]内的一个实根,要求准确到小数点后第二位.

解 这里 $a=1.0$,$b=1.5$,而 $f(a)<0$,$f(b)>0$,故在[1.0,1.5]中有根,由式(2.1.3)知

$|x_n-x^*|\leqslant\dfrac{b-a}{2^{n+1}}=\dfrac{1}{2^{n+2}}\leqslant\dfrac{1}{2}\times10^{-2}$,即 $2^{n+1}\geqslant10^2$,当 $n=6$ 时得 $|x_6-x^*|\leqslant0.005$,已达到精度要求,各次计算结果见表 2-1.

表 2-1

n	a_n	b_n	x_n	$f(x_n)$的符号
0	1.0	1.5	1.25	−
1	1.25		1.375	+
2		1.375	1.312 5	−
3	1.312 5		1.343 8	+
4		1.343 8	1.328 2	+
5		1.328 2	1.320 4	−
6	1.320 4		1.324 3	−

故 $x_6=1.324$ 为方程的近似根,误差不超过 0.005.

2.2　迭代法及其收敛性

2.2.1　不动点迭代法

求方程(2.1.1)的根时将方程改写为等价形式

$$x=\varphi(x) \tag{2.2.1}$$

若 x^* 满足 $x^*=\varphi(x^*)$,则称 x^* 为 φ 的一个不动点,x^* 也是方程(2.1.1)的一个根,如果 φ 连续,可构造迭代法

$$x_{k+1}=\varphi(x_k),\quad k=0,1,\cdots \tag{2.2.2}$$

称为不动点迭代法,φ 称为迭代函数.若给定初始近似 x_0,由式(2.2.2)逐次迭代得到序列 $\{x_k\}$,如果 $\lim\limits_{k\to\infty}x_k=x^*$,则由式(2.2.2)两端取极限,得

$$x^*=\lim_{k\to\infty}x_{k+1}=\lim_{k\to\infty}\varphi(x_k)=\varphi(\lim_{k\to\infty}x_k)=\varphi(x^*),\text{即 } x^* \text{ 为 } \varphi \text{ 的不动点.}$$

从几何图象(参见图 2-2)可知,φ 的不动点就是直线 $y=x$ 与曲线 $y=\varphi(x)$ 的交点 P^*,横坐标 x^* 即为不动点,从它的某个初始近似 x_0 出发,在曲线 $y=\varphi(x)$ 确定一点 P_0,引平行 x 轴直线,与直线 $y=x$ 交于点 Q_1,其横坐标即为 x_1,由式(2.2.2)逐次求得 $x_1,x_2,\cdots$,即为如图 2-2 所示点 $P_1,P_2\cdots$的横坐标.

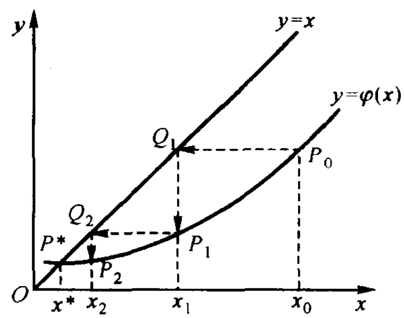


图 2-2

例 2.3　求方程 $f(x)=x^3-x-1=0$ 在 $x_0=1.5$ 附近的根.

解　若将方程改写为 $x=x^3-1$,构造迭代法

$$x_{k+1}=x_k^3-1,k=0,1,\cdots \tag{2.2.3}$$

由 $x_0=1.5,x_1=2.375,x_2=12.39,\cdots$,可知,$x_k$ 显然不收敛.

若将方程改为 $x=(x+1)^{1/3}$,构造迭代法

$$x_{k+1}=(x_k+1)^{1/3},k=0,1,\cdots \tag{2.2.4}$$

计算结果见表 2-2.

表　2-2

k	x_k	k	x_k
0	1.5	5	1.324 76
1	1.357 21	6	1.324 73
2	1.330 86	7	1.324 72
3	1.325 88	8	1.324 72
4	1.324 94		

从结果看它是收敛的，且在 6 位有效数字时 $x_7 = x_8 = 1.324\ 72$ 即为根 x^* 的近似值.

例题表明构造迭代法(2.2.2)，必须使迭代序列 $\{x_k\}$ 收敛，才能求得方程(2.2.1)的解 x^*. 下面给出解的存在唯一性和迭代收敛性定理.

定理 2.1 设 $\varphi \in C[a,b]$，如果对 $\forall x \in [a,b]$ 有 $a \leqslant \varphi(x) \leqslant b$，且存在常数 $L \in (0,1)$ 使

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \leqslant L|x - y|, \quad \forall x, y \in [a,b] \tag{2.2.5}$$

则 φ 在区间 $[a,b]$ 上存在唯一不动点 x^*，且由式(2.2.2)生成的迭代序列 $\{x_k\}$ 对任何 $x_0 \in [a,b]$ 收敛于 x^*，并有误差估计

$$|x_k - x^*| \leqslant \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0| \tag{2.2.6}$$

证明 先证明不动点存在性，记 $f(x) = x - \varphi(x)$，由定理条件有 $f(a) = a - \varphi(a) \leqslant 0$ 及 $f(b) = b - \varphi(b) \geqslant 0$，若有一等号成立，则 $f(a) = 0$ 或 $f(b) = 0$，即 φ 有不动点，否则必有 $f(a)f(b) < 0$，因 $f(x) = x - \varphi(x) \in C[a,b]$ 故必有 $x^* \in [a,b]$，使 $f(x^*) = x^* - \varphi(x^*) = 0$，$x^*$ 即为 φ 的不动点.

再证明唯一性，设 $x_1^*, x_2^* \in C[a,b]$ 都是 φ 的不动点，且 $x_1^* \neq x_2^*$，则由式(2.2.5)得

$$|x_1^* - x_2^*| = |\varphi(x_1^*) - \varphi(x_2^*)| \leqslant L|x_1^* - x_2^*| < |x_1^* - x_2^*|$$

与假设矛盾，这表明 $x_1^* = x_2^*$，即不动点是唯一的.

下面证明由式(2.2.2)生成的迭代序列 $\{x_k\}$ 收敛于 φ 的唯一不动点 x^*，由于 $\varphi(x) \in [a,b]$，故 $\{x_k\} \in [a,b]$，再由式(2.2.5)有

$$|x_k - x^*| = |\varphi(x_{k-1}) - \varphi(x^*)| \leqslant L|x_{k-1} - x^*| \leqslant \cdots \leqslant L^k|x_0 - x^*|$$

因 $0 < L < 1$，故 $\lim\limits_{k\to\infty}|x_k - x^*| = 0$，即 $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = x^*$，

再利用式(2.2.5)考察

$$\begin{aligned}
|x_{k+p} - x_k| &= |x_{k+p} - x_{k+p-1} + x_{k+p-1} - \cdots + x_{k+1} - x_k| \\
&\leqslant |x_{k+p} - x_{k+p-1}| + |x_{k+p-1} - x_{k+p-2}| + \cdots + |x_{k+1} - x_k| \\
&\leqslant (L^{p-1} + L^{p-2} + \cdots + L + 1)|x_{k+1} - x_k| \\
&= \frac{1-L^p}{1-L}|x_{k+1} - x_k| < \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0|
\end{aligned}$$

上式中令 $p \to \infty$ 则得式(2.2.6). 定理证毕.

推论 若 $\varphi \in C^1[a,b]$（表示 φ 在 $[a,b]$ 上一阶导数连续），则定理 2.1 中的条件式(2.2.5)可改为

$$\max_{a \leqslant x \leqslant b}|\varphi'(x)| \leqslant L < 1 \tag{2.2.7}$$

则定理 2.1 中结论全部成立.

实际上，由微分中值定理可得，对 $\forall x, y \in [a,b]$ 有

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| = |\varphi'(\xi)(x - y)| \leqslant \max_{a \leqslant \xi \leqslant b}|\varphi'(\xi)||x - y| \leqslant L|x - y|$$

故式(2.2.5)成立.

以后使用时，如果 $\varphi'(x)$ 连续都可用式(2.2.7)代替式(2.2.5). 根据定理 2.1 可验证例 2.3