研究生教学用书
湖南省教育厅推荐

数值分析

韩旭里

中南大学出版社

研究生教学用书
湖南省教育厅推荐

数 值 分 析

韩旭里

中南大学出版社

数值分析

韩旭里

□责任编辑 谢贵良
□出版发行 中南大学出版社
社址:长沙市麓山南路 邮编:410083
发行科电话:0731-8876770 传真:0731-8710482
电子邮件:csucbs@public.cs.hn.cn
□经　　销 湖南省新华书店
□印　　装 湖南航天长宇印刷有限责任公司

□开　　本 787×960 1/16 □印张 15.25 □字数 284千字
□版　　次 2003年3月第1版 □2003年3月第1次印刷
□书　　号 ISBN 7-81061-608-0/O·032
□定　　价 20.00元

内容简介

本书内容是现代科学计算中常用的数值计算方法及其理论，包括插值和拟合、数值积分和数值微分、线性方程组的直接解法和迭代解法、非线性方程和方程组的数值解法、矩阵特征值问题的数值解法和常微分方程的数值解法。每章都有实际问题的引入、算法程序文件、练习题和数值试验题。

本书注重内容的实用性、基本思想的阐述、数值计算方法的应用能力。内容取材精炼，叙述清晰，系统性强，数值计算的例子较多。各章分别给出了若干算法的 Matlab 函数文件（作为算法描述和方法应用的补充）。本书可作为理工科专业研究生和数学专业大学生数值分析课程的教材或教学参考书，也可供从事科学与工程计算的科技人员学习参考。

前　言

随着计算科学的迅速发展以及在其他科学技术问题中的广泛应用,继理论方法和实验方法之后,数值计算已成为科学研究的第三种基本手段。数值分析日益受到数学、计算机科学以及各种工程技术科学领域的专家和科技工作者的重视。数值分析课程已经成为高等学校理工科专业的一门重要基础课程。本书是作者根据多年数值分析课程教学实践的感受和理工科专业研究生教学的要求,在教学内容不断充实与更新的基础上编写的。教材的内容为数值计算的基本理论与基本方法,包括函数的插值和拟合、数值积分与微分、线性方程组的直接解法和迭代解法、非线性方程和方程组的数值解法、矩阵特征值问题的计算与常微分方程数值解法。

编写本教材的指导思想是:着重内容的实用性,着重基本原理和方法的基本思想的阐述,着重数值计算方法的应用能力的培养和提高。教材在体系结构和内容取材上,致力于取材精炼、由浅入深、衔接顺畅,尽量综合国内外同类教材的优点。在理论方法的分析和内容表述上,力求重点突出、思路清晰、脉路分明、便于理解。在实际应用上,尽量联系问题的应用背景,每章开头精选了实际问题引入,各章节配备了丰富的数值计算例题。在实践环节上,各章都给出了适当的数值试验题,对数值计算的优秀软件 Matlab 作了简要介绍。考虑到 Matlab 用于数值计算的核心内容是函数文件,结合本书的内容,在各章都分别给出了若干算法的 Matlab 函数文件,作为算法描述和方法应用的补充,以便读者更好地理解和应用本课程所学的内容。希望通过本教材的学习使读者掌握数值计算的基本理论和基本方法,提高数学素养,提高应用计算机进行科学与工程计算的能力,提高应用数学与计算机解决实际问题的能力。

本教材可作为理工科专业研究生和数学专业大学生的数值分析课程教材或教学参考书,也可供从事科学与工程计算的科技人员学习参考。教材内容涉及的范围和深度具有一定的弹性,教学时可根据学生的实际情况选用。60 学时左右可以讲授本书的主要内容,讲授完全部内容需 80 学时左右。

中南大学研究生院对本教材的编写非常重视,给予了大力的支持和鼓励,作者在此深表感谢。本书有幸被湖南省教育厅首批推荐为“研究生教学用书”,并得到资助,在此表示感谢,也感谢参加评审工作的各位专家和教授。作者还要感谢中南大学出版社有关编辑同志对出版本书所做的大量工作和帮助。

本书的选材和内容的叙述可能会有不当,甚至错误之处,诚请读者和同行们批评指正。

编　者

2003 年 1 月

目　录

第1章 绪 论

1.1 数值分析的研究对象和特点

数值分析是研究用计算机求解各种数学问题的数值方法及其理论的一门学科。数值分析也称为数值计算方法。数学学科十分广泛,数值分析属于计算数学的范畴,这里只涉及科学和工程计算中常见的数学问题,如函数的插值、离散数据的拟合、微分与积分、线性和非线性方程、矩阵特征值问题、微分方程等。

由于近几十年来计算机的迅速发展,数值计算方法的应用已经普遍深入到各个科学领域,很多复杂和大规模的计算问题都可以在计算机上进行计算,新的、有效的数值方法不断出现。现在,科学与工程中的数值计算已经成为各门自然科学和工程技术科学研究的一种重要手段,成为与实验和理论并列的一个不可缺少的环节。所以,数值分析既是一个基础性的,同时也是一个应用性的数学学科,与其他学科的联系十分紧密。

用数值方法求解数学问题首先要构造算法,即由运算规则(包括算术运算、逻辑运算和运算顺序)构成的完整的解题过程。同一个数学问题可能有多种数值计算方法,但不一定都有效。评价一个算法的好坏主要有两条标准:计算结果的精度和得到结果所付出的代价。我们自然应该选择代价小又能满足精度要求的算法。计算代价也称为计算复杂性,包括时间复杂性和空间复杂性。时间复杂性好是指节省时间,主要由运算次数决定。空间复杂性好是指节省存储量,主要由使用的数据量决定。

用计算机求数学问题的数值解不是简单地构造算法,它涉及多方面的理论问题,例如,算法的收敛性和稳定性等。除理论分析外,一个数值方法是否有效,最终要通过大量的数值实验来检验。数值计算方法具有理论性、实用性和实践性都很强的特点。

作为数值分析的基础知识,本课程不可能面面俱到。除构造算法外,各章根据内容自身的特点,讨论的问题有所侧重。学习时我们首先要注意掌握方法的基本原理和思想,要注意方法处理的技巧及其与计算机的结合,要重视误差分析、收敛性和稳定性的基本理论。其次,要通过例子,学习使用各种数值方法解决实际计算问题,熟悉数值方法的计算过程。最后,为了掌握本课程的内容,还应做一定数量的理论分析与计算练习。

1.2 数值计算的误差

1.2.1 误差的来源

应用数学工具解决实际问题,首先,要对被描述的实际问题进行抽象、简化,得到实际问题的数学模型。数学模型与实际问题之间会出现的误差,我们称之为**模型误差**。在数学模型中,通常要包含一些由观测数据确定的参数。对数学模型中一些参数的观测结果一般不是绝对准确的。我们把观测模型参数值产生的误差称为**观测误差**。例如,设一根铝棒在温度 t 时的实际长度为 L_t,在 $t=0$ 时的实际长度为 L_0,用 l_t 来表示铝棒在温度为 t 时的长度计算值,并建立一个数学模型:

$$l_t = L_0(1+at),\ a \approx 0.0000238/℃,$$

其中 a 是由实验观测得到的常数,$a\in[0.0000237,0.0000239]$,则称 $L_t - l_t$ 为模型误差,$a-0.0000238$ 是 a 的观测误差。

在解实际问题时,数学模型往往很复杂,因而不易获得分析解,这就需要建立一套行之有效的近似方法和数值方法。我们可能用容易计算的问题代替不易计算的问题而产生误差,也可能用有限的过程代替无限的过程而产生误差。我们将模型的准确解与用数值方法求得的准确解之间的误差称为**截断误差**或**方法误差**。例如,对函数

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \cdots,$$

当 $|x|$ 较小时,我们若用前三项作为 $\sin x$ 的近似值,则截断误差的绝对值不超过 $|x|^7/7!$。

用计算机做数值计算时,一般也不能获得数值计算公式的准确解,需要对原始数据、中间结果和最终结果取有限位数字。我们将计算过程中取有限位数字进行运算而引起的误差称为**舍入误差**。例如,$1/3=0.33333\cdots$ 如果我们取小数点后四位数字,则 $1/3-0.3333=0.000033\cdots$ 就是舍入误差。

在数值分析中,除了研究数学问题的算法外,还要研究计算结果的误差是否满足精度要求,这就是误差估计问题。在数值计算方法中,主要讨论的是截断误差和舍入误差。

1.2.2 误差与有效数字

定义 1.1 设 x 是某实数的精确值,x_A 是它的一个近似值,则称 $x-x_A$ 为近似值 x_A 的**绝对误差**,或简称**误差**。$(x-x_A)/x$ 称为 x_A 的**相对误差**。

当 $x=0$ 时,相对误差没有意义。在实际计算中,精确值 x 往往是不知道的,所以通常把 $(x-x_A)/x_A$ 作为 x_A 的相对误差。

定义 1.2 设 x 是某实值的精确值，x_A 是它的一个近似值，并可对 x_A 的绝对误差作估计 $|x-x_A|\leqslant\varepsilon_A$，则称 ε_A 是 x_A 的**绝对误差界**，或简称**误差界**。称 $\varepsilon_A/|x_A|$ 是 x_A 的**相对误差界**。

例 1.1 我们知道 $\pi=3.1415926\cdots$ 若取近似值 $\pi_A=3.14$，则 $\pi-\pi_A=0.0015926\cdots$，可以估计绝对误差界为 0.002，相对误差界为 0.0006。

例 1.2 测量一木板长是 954cm，问测量的相对误差界是多大？

解 因为实际问题中所截取的近似数，其绝对误差界一般不超过最小刻度的半个单位，所以当 $x=954\text{cm}$ 时，有 $\varepsilon_A=0.5\text{cm}$，其相对误差界为

$$\frac{\varepsilon_A}{|x|}=\frac{0.5}{954}=0.0005241\cdots<0.53\%。$$

定义 1.3 设 x_A 是 x 的一个近似值，将 x_A 写成

$$x_A=\pm10^k\times0.a_1a_2\cdots a_i\cdots, \tag{1.2.1}$$

它可以是有限或无限小数的形式，其中 $a_i(i=1,2,\cdots)$ 是 $0,1,\cdots,9$ 中的一个数字，$a_1\neq0$，k 为整数。如果

$$|x-x_A|\leqslant0.5\times10^{k-n},$$

则称 x_A 为 x 的具有 n 位**有效数字**的近似值。

可见，若近似值 x_A 的误差界是某一位的半个单位，该位到 x_A 的第一位非零数字共有 n 位，我们就说 x_A 有 n 位有效数字。

通常在 x 的准确值已知的情况下，若要取有限位数的数字作为近似值，就采用四舍五入的原则。不难验证，采用四舍五入得到的近似值，其绝对误差界可以取为被保留的最后数位上的半个单位。例如

$$|\pi-3.14|\leqslant0.5\times10^{-2},\ |\pi-3.142|\leqslant0.5\times10^{-3}。$$

按定义，3.14 和 3.142 分别是具有三位和四位有效数字的近似值。

显然，近似值的有效数字位数越多，相对误差界就越小，反之也对。下面，我们给出相对误差界与有效数字的关系。

定理 1.1 设 x 的近似值 x_A 有(1.2.1)的表达式。

(1) 如果 x_A 有 n 位有效数字，则

$$\frac{|x-x_A|}{|x_A|}\leqslant\frac{1}{2a_1}\times10^{1-n}; \tag{1.2.2}$$

(2) 如果

$$\frac{|x-x_A|}{|x_A|}\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{1-n}, \tag{1.2.3}$$

则 x_A 至少具有 n 位有效数字。

证 由(1.2.1)可得到

$$a_1\times10^{k-1}\leqslant|x_A|\leqslant(a_1+1)\times10^{k-1}。 \tag{1.2.4}$$

所以，当 x_A 有 n 位有效数字时，

$$\frac{|x-x_A|}{|x_A|}\leqslant\frac{0.5\times10^{k-n}}{a_1\times10^{k-1}}=\frac{1}{2a_1}\times10^{1-n},$$

即(1.2.2)得证。

由(1.2.3)和(1.2.4)有

$$|x-x_A|\leqslant(a_1+1)\times10^{k-1}\times\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{1-n}=0.5\times10^{k-n},$$

即说明 x_A 有 n 位有效数字，(2)得证。

例 1.3 已知近似数 x_A 的相对误差界为 0.3%，问 x_A 至少有几位有效数字？

解 设 x_A 有 n 位有效数字，由于 x_A 的第一个有效数 a_1 没有具体给定，而我们知道 a_1 一定是 1，2，…，9 中的一个，由

$$\frac{|x-x_A|}{|x_A|}\leqslant\frac{3}{1000}<\frac{1}{2\times10^2}=\frac{1}{2(9+1)}\times10^{-1},$$

故由(1.2.3)式知 $n=2$，即 x_A 至少有 2 位有效数字。

1.2.3 函数求值的误差估计

对一元函数 $f(x)$，自变量 x 的一个近似值为 x_A，以 $f(x_A)$ 近似 $f(x)$，其误差界记作 $\varepsilon(f(x_A))$。若 $f(x)$ 具有 2 阶连续导数，$f'(x_A)$ 与 $f''(x_A)$ 的比值不太大，则可忽略 $|x-x_A|$ 的二次项，由 Taylor 展开式得到 $f(x_A)$ 的一个近似误差界：

$$\varepsilon(f(x_A))\approx|f'(x_A)|\varepsilon(x_A)。$$

对 n 元函数 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，自变量 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的近似值分别为 $x_{1A},x_{2A},\cdots,x_{nA}$，则有

$$f(x_1,x_2,\cdots,x_n)-f(x_{1A},x_{2A},\cdots,x_{nA})\approx\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)_A(x_k-x_{kA}),$$

其中 $\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)_A=\frac{\partial}{\partial x_k}f(x_{1A},x_{2A},\cdots,x_{nA})$。可以得到函数值的一个近似误差界：

$$\varepsilon(f(x_{1A},x_{2A},\cdots,x_{nA}))\approx\sum_{k=1}^{n}\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)_A\right|\varepsilon(x_{kA})。$$

特别地，对 $f(x_1,x_2)=x_1\pm x_2$ 有

$$\varepsilon(x_{1A}\pm x_{2A})=\varepsilon(x_{1A})+\varepsilon(x_{2A})。$$

同样，可以得到

$$\varepsilon(x_{1A}x_{2A})\approx|x_{1A}|\varepsilon(x_{2A})+|x_{2A}|\varepsilon(x_{1A}),$$

$$\varepsilon\left(\frac{x_{1A}}{x_{2A}}\right)\approx\frac{|x_{1A}|\varepsilon(x_{2A})+|x_{2A}|\varepsilon(x_{1A})}{|x_{2A}|^2},\ x_{2A}\neq0。$$

例 1.4 设有长为 l，宽为 d 的某场地。现测得 l 的近似值 $l_A=120\text{ m}$，d 的近

似值 $d_A=90$ m,并已知它们的误差界为 $|l-l_A|\leqslant 0.2$ m, $|d-d_A|\leqslant 0.2$ m。试估计该场地面积 $S=ld$ 的误差界和相对误差界。

解 这里 $\varepsilon(l_A)=0.2,\varepsilon(d_A)=0.2$,并且有

$$\frac{\partial S}{\partial l}=d,\ \frac{\partial S}{\partial d}=l,\ S_A=l_Ad_A=10800\ \text{m}^2。$$

于是有误差界

$$\varepsilon(S_A)\approx 120\times 0.2+90\times 0.2=42\text{m}^2,$$

相对误差界

$$\varepsilon_r(S_A)=\frac{\varepsilon(S_A)}{l_Ad_A}\approx\frac{42}{10800}=0.39\%。$$

例 1.5 设有三个近似数

$$a=2.31,b=1.93,c=2.24,$$

它们都有三位有效数字。试计算 $p=a+bc$ 的误差界和相对误差界,并问 p 的计算结果能有几位有效数字?

解 $p=2.31+1.93\times 2.24=6.6332$。于是有误差界

$$\begin{aligned}\varepsilon(p)&=\varepsilon(a)+\varepsilon(bc)\\&\approx\varepsilon(a)+|b|\varepsilon(c)+|c|\varepsilon(b)\\&=0.005+0.005(1.93+2.24)=0.02585,\end{aligned}$$

相对误差界

$$\varepsilon_r(p)=\frac{\varepsilon(p)}{|p|}\approx\frac{0.02586}{6.6332}\approx 0.39\%。$$

因为 $\varepsilon(p)\approx 0.02585<0.05$,所以 $p=6.6332$ 能有两位有效数字。

1.2.4 计算机中数的表示和舍入误差

任意一个非零实数用(1.2.1)表示,是规格化的十进制科学记数方法。在计算机中通常采用二进制的数系(或其变形的十六进制等),并且表示成与十进制类似的规格化形式,即浮点形式

$$\pm 2^m\times 0.\beta_1\beta_2\cdots\beta_t,$$

这里整数 m 称为**阶码**,用二进制表示为 $m=\pm\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_s,\alpha_j=0$ 或 $1(j=1,2,\cdots,s)$, s 是阶的位数。小数 $0.\beta_1\beta_2\cdots\beta_t$ 称为**尾数**,其中 $\beta_1=1,\beta_j=0$ 或 $1(j=2,3,\cdots,t)$, t 是尾数部位的位数。s 和 t 与具体的机器有关。由于计算机的字长总是有限位的,所以计算机所能表示的数系是一个特殊的离散集合,此集合的数称为**机器数**。

十进制数输入计算机时转换成二进制,并对 t 位后面的数作舍入处理,使得尾数为 t 位,因此一般都有舍入误差。两个二进制数作算术运算时,对计算结果也要作类似的舍入处理,使得尾数为 t 位,从而也有舍入误差。

在实现算法时,计算的最后结果与算法的精确解之间的误差,从根本上说是由机器的舍入误差造成的,包括输入数据和算术运算的舍入误差。因此有必要对计算机中数的浮点表示方法和舍入误差有一个初步的了解。有时为了分析某一个计算方法可能出现的误差现象,为了适应人们的习惯,我们会采用十进制实数系统进行误差分析。

1.3 数值稳定性和要注意的若干原则

1.3.1 数值方法的稳定性

定义 1.4 对于某个数值计算方法,如果输入数据的误差在计算过程中迅速增长而得不到控制,则称该算法是**数值不稳定**的,否则是**数值稳定**的。

举例说明如下。

例 1.6 计算积分值 $I_n=\int_0^1 \frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x,\ n=0,1,\cdots,6$。

解 由于要计算系列的积分值,我们先推导 I_n 的一个递推公式。由

$$I_n+5I_{n-1}=\int_0^1 \frac{x^n+5x^{n-1}}{x+5}\mathrm{d}x=\int_0^1 x^{n-1}\mathrm{d}x=\frac{1}{n},$$

可得下面两个递推算法。

算法 1: $$I_n=\frac{1}{n}-5I_{n-1},\ n=1,2,\cdots,6。$$

算法 2: $$I_{n-1}=\frac{1}{5}\left(\frac{1}{n}-I_n\right),\ n=6,5,\cdots,1。$$

直接计算可得 $I_0=\ln 6-\ln 5$。如果我们用四位数字计算,得 I_0 的近似值为 $I_0^*=0.1823$。记 $E_n=I_n-I_n^*$,I_n^* 为 I_n 的近似值。

对算法 1,有

$$E_n=-5E_{n-1}=\cdots=(-5)^nE_0。$$

按以上初始值 I_0 的取法有 $|E_0|\leqslant 0.5\times10^{-4}$,事实上 $|E_0|\approx0.22\times10^{-4}$。这样,我们得到 $|E_6|=5^6|E_0|\approx0.34$。这个数已经大大超过了 I_6 的大小,所以 I_6^* 连一位有效数字也没有了,误差掩盖了真值。

对算法 2,有

$$E_{k-n}=\left(-\frac{1}{5}\right)^nE_k,\ |E_0|=\left(\frac{1}{5}\right)^6|E_6|。$$

如果我们能够给出 I_6 的一个近似值,则可由算法 2 计算 $I_n(n=5,4,\cdots,0)$ 的近似值。并且,即使 E_6 较大,得到的近似值的误差将较小。由于

$$\frac{1}{6(k+1)}=\int_0^1 \frac{x^k}{6}\mathrm{d}x<I_k<\int_0^1 \frac{x^k}{5}\mathrm{d}x=\frac{1}{5(k+1)},$$