研究生教学用书

数值分析

Numerical Analysis

欧阳洁　聂玉峰　车刚明　王振海　编著

高等教育出版社

研究生教学用书

数值分析

Numerical Analysis

欧阳洁　聂玉峰　车刚明　王振海　编著

高等教育出版社

内容简介

本书系统地介绍了科学与工程计算中常用的数值计算方法，其内容包括：误差分析的基本知识、非线性方程求根、线性代数方程组的直接解法和迭代解法、函数插值、函数逼近与数据拟合、数值积分与数值微分、常微分方程数值求解以及矩阵特征值与特征向量的计算。

本书注重数值计算基本思想的阐述以及计算方法的应用。内容取材精炼，层次清晰，逻辑严谨，系统性强。书中每章都附有数值计算的应用实例、习题以及数值实验题。

本书可作为高等学校工科硕士研究生“数值分析”课程以及力学、计算机等专业本科生“计算方法”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参考。

图书在版编目(CIP)数据

数值分析/欧阳洁等编著.—北京：高等教育出版社，2009.9

ISBN 978-7-04-028030-2

Ⅰ.数… Ⅱ.欧… Ⅲ.数值计算… Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 140397 号

策划编辑 张长虹 **责任编辑** 李华英 **封面设计** 李卫青 **责任绘图** 尹文军
版式设计 张 岚 **责任校对** 刘 莉 **责任印制** 毛斯璐

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010-58581118
社 址	北京市西城区德外大街 4 号	咨询电话	400-810-0598
邮政编码	100120	网 址	http://www.hep.edu.cn
总 机	010-58581000		http://www.hep.com.cn
		网上订购	http://www.landraco.com
			http://www.landraco.com.cn
经 销	蓝色畅想图书发行有限公司	畅想教育	http://www.widedu.com
印 刷	北京北苑印刷有限责任公司		
开 本	787×960 1/16	版 次	2009 年 9 月第 1 版
印 张	17.5	印 次	2009 年 9 月第 1 次印刷
字 数	320 000	定 价	27.90 元

物料号 28030-00

前　言

随着计算机发展而日益兴起的计算科学已经深入渗透到自然科学与工程技术等各个领域，并成为继牛顿与伽利略创立理论研究与科学实验两大科学方法后的第三种科学方法。因此，目前数值分析受到了工程技术领域专家以及科技工作者的重视。

本书介绍了现代科学与工程计算中常用的数值计算方法，其内容包括：误差分析的基本知识、非线性方程求根、线性代数方程组的直接解法和迭代解法、函数插值、函数逼近与数据拟合、数值积分与数值微分、常微分方程数值求解以及矩阵特征值与特征向量的计算。

本书以提高学生的数学素养、培养学生科学计算的实际能力为要旨，其特点是：(1) 语言通俗易懂，内容组织由浅入深；(2) 着重数值计算基本原理和各种方法的基本思想阐述，注重数学概念的严密性和准确性；(3) 加强数值实验，强化实践能力的培养。书中每章都给出了数值计算的应用实例以及数值实验题，以帮助读者掌握各种数值计算方法，并提高应用数值计算方法解决实际问题的能力。

本书可作为高等学校工科硕士研究生以及力学、计算机等专业本科生“数值分析”（或“计算方法”）课程的教材或参考书，也可供从事科学与工程计算的科技人员参考。其中第一、二章由欧阳洁执笔，第三、四章由车刚明执笔，第五、六、七章由聂玉峰执笔，第八、九章由王振海执笔。最后由欧阳洁统一定稿。全书的讲授约需60学时。

限于水平和时间，书中定有疏漏之处，恳望读者批评指正。

作　者

2009年3月

郑 重 声 明

目　　录

第一章 绪论

§1.1 数值分析的任务

现代科学的发展依赖于理论研究、科学实验与科学计算三种手段，它们相互独立，又相互补充. 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、边缘性的学科，它的物质基础是计算机（包括其软硬件系统），其理论基础的核心是计算数学.

通常，运用计算机解决科学或工程问题包括下面几个环节：

(1) 数学建模：建立数学模型.

(2) 算法设计：设计求解数学模型的算法.

(3) 程序设计：设计计算机上实现算法的程序.

(4) 上机计算：在计算机上运行实现算法的程序.

(5) 数据处理：用图与表格表示计算结果，进行图像的可视化处理.

(6) 结果分析：分析计算结果的可靠性.

计算数学的任务主要是用计算机计算出数学模型的数值解. 在这个意义上，计算数学是为各具体学科服务的. 它的着眼点不在于纯数学的、公理化的、独立的抽象结论，而在于设计合适的算法去寻求具体问题（通常来自于其他领域）的数值解. 因此，计算数学作为数学学科的一个分支，不仅具有数学学科科学性的特点，而且更具有广泛的应用性和边缘性. 它是计算力学、计算物理、计算化学、计算生物学等各种计算性科学的共性基础.

计算数学的任务决定了它的研究内容是：基于某些数学模型，寻求或者设计相应的数值求解方法，并对它们的数值性质进行研究. 这种研究称为数值分析.

基于给定的数学模型而进行算法设计，首先需要将数学模型可算化，其常用的手段是：(1) 用有限维空间代替无限维空间，如多项式逼近连续函数等；(2) 用有限过程代替无限过程，如积分与无穷级数用有限项之和代替，导数用差商代替等；(3) 用简单问题代替复杂问题，如用代数方程代替微分方程，线性问题代替非线性问题，低阶系统代替高阶系统，简单函数代替复杂函数等. 因此，提供数学模型近似求解的计算方法（算法）是数值分析的第一个任务.

在求解数学模型而进行算法设计时,人们自然希望利用等解变换将问题可算化.然而,实际上这种等解变换往往并不可能.这意味着原问题的解往往并不等于变换后替代问题的解.因而我们需要分析逼近解(变换后的替代问题的解)与精确解(原数学模型的解)之间的误差及其收敛性.另外,由于运算过程中存在舍入误差,实际中也需要讨论舍入误差对计算结果的影响,即数值稳定性.因此,研究算法的可靠性(收敛性、稳定性、误差估计)是数值分析的第二个任务.

一个可靠的算法还应具备适用范围广、运算量少、存贮单元省、逻辑结构简单等特点.因此,研究算法的时间复杂度(计算机运行时间)、空间复杂度(占据计算机存贮空间的多少)以及逻辑复杂度(影响程序开发的周期以及维护的因素)等,是数值分析的第三个任务.

科学与工程计算中涉猎的许多算法具有普适性.现在流行的软件(如 Matlab、Maple、Mathematica 等)已将一些具有普适性的算法设计成简单的函数,调用之后便可以得到计算结果.但由于实际问题的具体特征、复杂性以及算法自身的适用范围,决定了应用中必须选择、设计适合于特定问题的求解算法,因而掌握一些具有普适性的算法以及数值分析的基本思想非常重要.本书将介绍科学与工程计算中最常用的基本数值方法以及相关理论,具体内容包括:非线性方程求根、线性代数方程组求解、函数插值、函数逼近与数据拟合、数值微积分、常微分方程数值求解以及矩阵特征值与特征向量计算.

§1.2 误差基础知识

1.2.1 误差的来源

一个物理量的真实值和计算得到的值往往并不相等,它们之差称为误差.引起误差的原因主要有以下几种:

(1) **模型误差**:将实际问题转化为数学问题而建立数学模型时,往往将对被描述的实际问题进行抽象和简化.因此,数学模型只是客观现象的一种近似描述.数学模型与实际问题之间出现的误差称为模型误差.

(2) **观测误差**:在给出的数学模型中往往涉及一些根据观测得到的物理量,而观测不可避免地会出现偏差.由观测引起的误差称为观测误差.

(3) **截断误差**:根据实际问题建立的数学模型往往难以求解.通常需要通过近似替代,将所要求解的数学模型简化为易于求解的数值计算问题后再进行求解.数学模型的理论解与数值计算问题的精确解之间的误差称为截断误差.这是计算方法本身所带来的误差,所以也称为方法误差.

(4) **舍入误差**:在用计算机实现数值求解方法的过程中,由于计算机的字长

有限，所以对原始数据、中间结果和最后结果所存贮的数据都要舍入. 对数据进行舍入而产生的误差称为舍入误差. 少量的舍入误差微不足道，但在计算机上做了成千上万次运算后，舍入误差的积累有时可能十分惊人.

例 1.1 取 $n=8$，用 $e_n=1+\frac{1}{1!}+\frac{1}{2!}+\cdots+\frac{1}{n!}$ 计算 e 的近似值，并进行误差分析.

解 众所周知，$\mathrm{e}=1+\frac{1}{1!}+\frac{1}{2!}+\cdots$，如果取 $n=8$，以 e_8 作为 e 的近似值，得

$$\mathrm{e}\approx e_8=2.718\,278\,77\cdots\approx 2.718\,3 \overset{\text{记为}}{=\!=\!=} e^*.$$

在上述计算过程中，由 $e^*-\mathrm{e}=(e^*-e_n)+(e_n-\mathrm{e})$，知 e^* 作为 e 的近似包含有截断误差和舍入误差两部分. e_n 与 e 的差异是 e_n 近似 e 的截断误差；e^* 与 e_n 的差异是 e^* 近似 e_n 的舍入误差. 利用计算机计算 e 的近似值 e_n 时，实际上得不到 e_n 的精确值，只能得到 e_n 的近似值 e^*.

例 1.2 取地球半径 $r=6\,370$ km 计算地球的表面积，并进行误差分析.

解 计算地球表面积的公式为 $A=4\pi r^2$. 根据无穷乘积公式

$$\frac{\pi}{2}=\frac{2}{\sqrt{2}}\cdot\frac{2}{\sqrt{2+\sqrt{2}}}\cdot\frac{2}{\sqrt{2+\sqrt{2+\sqrt{2}}}}\cdot\frac{2}{\sqrt{2+\sqrt{2+\sqrt{2+\sqrt{2}}}}}\cdot\cdots,$$

可用有限项乘积近似圆周率 π 的值，即

$$\pi\approx p_n=2\cdot\frac{2}{q_1}\cdot\frac{2}{q_2}\cdot\cdots\cdot\frac{2}{q_n},$$

其中

$$\begin{cases} q_1=\sqrt{2}, \\ q_{k+1}=\sqrt{2+q_k} \quad (k=1,2,\cdots,n-1). \end{cases}$$

如果取 $n=8$，得 $\pi\approx p_8=3.141\,587\,725\cdots\approx 3.141\,6$，故

$$A=4\pi r^2\approx 4\times 3.141\,6\times 6\,370^2\approx 5.099\,1\times 10^8(\mathrm{km}^2).$$

在上述计算过程中，存在着各种误差，其中将地球视为球体而产生的误差是模型误差；将地球半径取为估计值 $r=6\,370$ km 而产生的误差是观测误差；截取无穷乘积中有限项乘积计算 π 值而产生的误差是截断误差；计算过程中因舍入而产生的误差是舍入误差，如上述 p_8 用 3.141 6 近似、A 用 $5.099\,1\times10^8$ 近似则产生舍入误差.

由上述误差来源的分析可以看出：对于实际问题的求解，误差不可避免. 建立数学模型时，通常本身已经存在着模型误差和观测误差. 本课程仅涉及后两种误差. 尽管数值分析里所讨论的解往往只是原问题的近似解，但我们仍然需要在算法设计中尽量设法减少截断误差与舍入误差，以提高计算精度.

1.2.2 误差与有效数字

1. 绝对误差与绝对误差限

定义 1.1 设 x^* 是准确值 x 的一个近似值,称 $e(x^*)=x^*-x$ 为 x^* 近似 x 的**绝对误差**,简称误差. 绝对误差可正可负. 在不引起混淆时,简记符号 $e(x^*)$ 为 e^*.

通常准确值 x 并不知道,故不能计算出绝对误差 e^* 的准确值. 实际中,往往只能根据测量工具或计算情况估计出误差的绝对值不超过某个正数. 如果存在正数 $\varepsilon=\varepsilon(x^*)$,使得绝对误差 $|e^*|=|x^*-x|\leqslant\varepsilon$,则称 ε 为 x^* 近似 x 的一个**绝对误差限**,简称误差限. 对于 $|x^*-x|\leqslant\varepsilon$,工程上习惯用 $x=x^*\pm\varepsilon$ 表示 x 的范围,即 $x\in[x^*-\varepsilon,x^*+\varepsilon]$.

实际中要求计算的绝对误差限,是指估计一个尽可能小的绝对误差限.

2. 相对误差与相对误差限

绝对误差限能够刻画对同一真值不同近似数的近似程度,但不能刻画对不同真值相应近似数的近似程度. 要刻画对不同真值相应近似数的近似程度,还应考虑准确值(或近似值)本身的大小.

定义 1.2 设 x^* 是准确值 $x(\neq 0)$ 的一个近似值,称 $e_r(x^*)=\dfrac{x^*-x}{x}$ 为 x^* 近似 x 的**相对误差**. 在不引起混淆时,简记符号 $e_r(x^*)$ 为 e_r^*.

实际计算中,由于准确值 x 并不知道,通常取 $\dfrac{e^*}{x^*}=\dfrac{x^*-x}{x^*}$ 作为 x^* 近似 x 的相对误差,其条件是 $\left|\dfrac{e^*}{x}\right|$ 比较小. 此时有

$$e_r^*-\frac{e^*}{x^*}=\frac{e^*}{x}-\frac{e^*}{x^*}=\frac{e^*(x^*-x)}{x^*x}=\frac{(e^*)^2}{x(x+e^*)}$$
$$=\frac{(e^*/x)^2}{1+e^*/x}=O((e_r^*)^2),$$

即 $\dfrac{e^*}{x^*}$ 与 e_r^* 之差为小量 $O((e_r^*)^2)$. 因此,理论分析中可视情况而选用 $\dfrac{e^*}{x}$ 或 $\dfrac{e^*}{x^*}$ 作为 x^* 近似 x 的相对误差,且往往并不区分二者间的差异.

相对误差也可正可负,称数值 $|e_r^*|$ 的上界为**相对误差限**,记为 $\varepsilon_r=\varepsilon_r(x^*)$. 要求计算相对误差限时,是指估计一个尽可能小的相对误差限.

3. 有效数字与有效数

工程技术中对于测量得到的数经常表示成 $x^*\pm\varepsilon$,它虽然表示了近似值 x^* 的准确程度,但用这个量进行数值计算非常麻烦. 因此希望所表示的数本身就能显示出它的准确程度,于是有必要引进有效数字和有效数的概念.

例 1.3 确定十进制数 x "四舍五入"后所得 x^* 的绝对误差限.

解 设十进制数 x 有如下的标准形式

$$x=\pm 10^m\times 0.a_1a_2\cdots a_na_{n+1}\cdots,$$

其中 m 为整数,$\{a_i\}\subset\{0,1,2,\cdots,9\}$ 且 $a_1\neq 0$.

对 x 四舍五入保留 n 位数字的近似值 x^* 为

$$x^*=\begin{cases}\pm 10^m\times 0.a_1a_2\cdots a_n, & 当\ a_{n+1}\leqslant 4,\\ \pm 10^m\times 0.a_1a_2\cdots(a_n+1), & 当\ a_{n+1}\geqslant 5.\end{cases}$$

近似值 x^* 在"四舍"情形下($a_{n+1}\leqslant 4$)的误差限为

$$|x^*-x|=10^{m-n}\times|0.a_{n+1}\cdots|<10^{m-n}\times 0.5=\frac{1}{2}\times 10^{m-n}.$$

近似值 x^* 在"五入"情形下($a_{n+1}\geqslant 5$)的误差限为

$$\begin{aligned}|x^*-x|&=10^{m-(n-1)}\times|0.(a_n+1)-0.a_na_{n+1}\cdots|\\&\leqslant 10^{m-(n-1)}\times 0.05=\frac{1}{2}\times 10^{m-n}.\end{aligned}$$

综合以上两点,对十进制数 x "四舍五入"后所得 x^* 的绝对误差限是 $\frac{1}{2}\times 10^{m-n}$.

定义 1.3 设 x 的近似值 x^* 有如下标准形式

$$x^*=\pm 10^m\times 0.a_1a_2\cdots a_n\cdots a_p, \tag{1.1}$$

其中 m 为整数,$\{a_i\}\subset\{0,1,2,\cdots,9\}$ 且 $a_1\neq 0,p\geqslant n$. 如果 n 是满足

$$|e^*|=|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{m-n}$$

的最大正整数,则称 x^* 为 x 的具有 n 位**有效数字**的近似数. 当 x^* 准确到末位,即 $n=p$ 时,则称 x^* 为**有效数**.

例 1.4 设 $x=12.49$,问 x 的近似值 $x_1^*=12.5,x_2^*=12.4$ 和 $x_3^*=12.48$ 分别有几位有效数字,它们是有效数吗?

解 根据近似值表示的标准形式(1.1),对 x_1^*,x_2^*,x_3^* 得 $m_1=m_2=m_3=2$,并有

$$|e(x_1^*)|=|x_1^*-x|=0.01,$$

$$|e(x_2^*)|=|x_2^*-x|=0.09,$$

$$|e(x_3^*)|=|x_3^*-x|=0.01.$$

因为 x_1^*,x_2^* 和 x_3^* 至多分别具有 3 位、3 位、4 位有效数字,而上述误差计算表明

$$|e(x_1^*)|<\frac{1}{2}\times 10^{2-3},$$

$$\frac{1}{2}\times 10^{2-3}<|e(x_2^*)|<\frac{1}{2}\times 10^{2-2},$$

$$\frac{1}{2}\times 10^{2-4} < |e(x_3^*)| < \frac{1}{2}\times 10^{2-3}.$$

所以 x_1^*,x_2^* 和 x_3^* 分别为 x 的具有 3 位、2 位、3 位有效数字的近似数,故 x_1^* 是有效数,而 x_2^* 和 x_3^* 不是有效数.

例 1.5 设 $x_1^*=20.12$ 和 $x_2^*=20.120$ 均为有效数,求其绝对误差限及相对误差限.

解 根据近似值表示的标准形式(1.1),得 $m_1=m_2=2$. 根据有效数的定义,知 x_1^* 和 x_2^* 分别有 4 位、5 位有效数字. 并有

$$|e(x_1^*)|=|x_1^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{2-4}=0.005,$$

$$|e_r(x_1^*)|=\frac{|x_1^*-x|}{|x_1^*|}\leqslant\frac{0.005}{20.12}<0.000\,25,$$

$$|e(x_2^*)|=|x_2^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{2-5}=0.000\,5,$$

$$|e_r(x_2^*)|=\frac{|x_2^*-x|}{|x_2^*|}\leqslant\frac{0.000\,5}{20.120}<0.000\,025.$$

所以 x_1^* 和 x_2^* 的绝对误差限分别为 0.005 和 0.000 5,相对误差限分别为 0.000 25和 0.000 025.

例 1.6 将重力常数 g 按四舍五入原则舍入后得到近似值 $g_1^*=9.81\mathrm{m/s^2}$,$g_2^*=0.009\,81\ \mathrm{km/s^2}$,它们是有效数吗?

解 根据近似值表示的标准形式(1.1),得 $m_1=1$,$m_2=-2$,再根据例1.3有

$$|e(g_1^*)|=|g_1^*-g|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{1-3},$$

$$|e(g_2^*)|=|g_2^*-g|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-2-3}.$$

所以 g_1^*,g_2^* 尽管写法不同,但它们近似 g 均有 3 位有效数字,故 g_1^*,g_2^* 均为有效数.

对这两个近似数,通过计算也可以知道:由于度量它们的单位不同,它们绝对误差限的数值并不相同,但它们的相对误差限却是相同的.

综合定义 1.3 及例 1.3 ~ 例 1.6 可以得到:(1) 对某有效数而言,末位数位的半个单位是其绝对误差限,即有效数本身就反映了近似数的绝对误差限;(2) 对真值进行四舍五入得到的近似数是有效数;(3) 对近似同一真值的近似数而言,有效数字位数越多,其绝对误差限越小;(4) 有效数的末尾不能随意添加零;(5) 有效数字位数与介于第一位非零数字和小数点之间零的个数没有关系;(6) 准确值具有无穷位有效数字.

本书约定,未作说明的近似数都是有效数.

4. 有效数字与相对误差的关系

有效数字与相对误差之间的关系由如下定理表述.

定理 1.1 设 x 的近似数 x^* 具有式(1.1)所示的标准形式.

(1) 若 x^* 具有 n 位有效数字,则

$$|e_r^*| \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}; \tag{1.2}$$

(2) 若

$$|e_r^*| \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n}, \tag{1.3}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证明 由式(1.1)可得

$$a_1 \times 10^{m-1} \leqslant |x^*| \leqslant (a_1+1) \times 10^{m-1}. \tag{1.4}$$

(1) 若 x^* 具有 n 位有效数字,根据有效数字的定义及式(1.4),得

$$|e_r^*| = \left|\frac{e^*}{x^*}\right| \leqslant \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{a_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}.$$

即式(1.2)得证.

(2) 若式(1.3)成立,根据式(1.4),得

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

由有效数字定义可知,x^* 至少具有 n 位有效数字.

该定理的第一个结论说明:有效数字位数越多,相对误差限越小.

例 1.7 (1)为使 $\sqrt{20}$ 的近似值 x^* 的相对误差限不超过 0.1%,问查开方表时 x^* 需要保留几位有效数字?

(2) 已知 $\sqrt{20}$ 的近似值 x^* 的相对误差限不超过 0.1%,问 x^* 至少有几位有效数字?

解 对于 $x = \sqrt{20}$,有 $a_1 = 4$.

(1) 设近似数 x^* 保留 n 位有效数字可满足题设要求. 由定理 1.1 第一个结论知,此时有

$$|e_r^*| \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n} = \frac{1}{8} \times 10^{1-n}.$$

令 $\frac{1}{8} \times 10^{1-n} \leqslant 0.1 \times 10^{-2}$,解得 $n \geqslant 3.0969\cdots$.

故对 $\sqrt{20}$ 的近似值保留 4 位有效数字,就有 $\varepsilon_r = \frac{1}{8} \times 10^{1-4} < 0.1\%$. 此时由