

● 高等学校教材

数值分析简明教程

(第二版)

王能超 编著



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

高等学校教材

数值分析简明教程

(第二版)

王能超 编著

高等教育出版社

内容提要

本书在第一版的基础上，经过补充、修改而成。原书已发行30余万册，深受读者喜爱。本版继续保持了原书内容精练、深入浅出、通俗易懂的突出特点，在编排上贯穿了数值算法设计与分析的思想。为方便读者深入掌握有关内容，同时为“数值分析”的习题课提供参考资料，第二版新增了“例题选讲”部分，提炼、归纳了数值分析中最重要的一些方法，并对若干例题进行了解析，使本书增添新的特色。

本书可作为高等院校理工科专业学生的教材，亦可供工程技术人员阅读参考。

本书第一版于1988年获国家教委优秀教材二等奖。

图书在版编目(CIP)数据

数值分析简明教程/王能超编著. —2 版. —北京：
高等教育出版社，2003.8(2004重印)

ISBN 7-04-012800-4

I . 数... II . 王... III . 数值计算 - 高等学校 - 教
材 IV . 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 038069 号

出版发行 高等教育出版社

购书热线 010-64054588

社址 北京市西城区德外大街 4 号

免费咨询 800-810-0598

邮政编码 100011

网 址 <http://www.hep.edu.cn>

总机 010-82028899

<http://www.hep.com.cn>

经 销 新华书店北京发行所

印 刷 北京铭成印刷有限公司

版 次 1984 年 10 月第 1 版

开 本 787 × 960 1/16

2002 年 8 月第 2 版

印 张 13.5

印 次 2004 年 2 月第 2 次印刷

字 数 240 000

定 价 17.30 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题，请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

初 版 前 言

人类社会正迈进电子计算机时代。在今天，熟练地运用计算机进行科学计算，已经成为广大科技工作者的一项基本技能，这就需要向高等工科院校的学生普及有关计算方法的知识。本书正是为适应这一形势而编写的。

要提高运用计算机进行科学计算的能力，关键在于加强数学修养。不应当将计算方法片面地理解为各种算法的简单罗列和堆积，同数学分析一样，它也是一门内容丰富、思想方法深刻而有着自身的理论体系的数学学科。本书取名为数值分析正是基于这一认识。

本书是以《工程数学——计算方法》(王能超编，人民教育出版社，1978年版)一书为基础，经过补充修改编写而成的。

在教育部直属工科院校计算数学教材讨论会上(1983年，武汉)，曾对本书原稿进行了审议。参加审议的有清华大学、浙江大学、西安交通大学、大连工学院、南京工学院、天津大学、重庆大学和华侨大学等院校的老师。由西安交通大学游兆永教授负责主审。参加审议的同志在推荐本书出版的同时，还提出了许多宝贵的意见和建议，编者对此表示深切的谢意。

王能超

1984年12月25日

于华中工学院

第二版前言

拙作《数值分析简明教程》(后文简称《简明教程》)自 1984 年由高等教育出版社出版以来, 迄今已过去了 19 个年头。这期间年年重印, 累计已发行 30 余万册。作者衷心感谢关注、支持本书的广大老师和同学们。

承蒙高等教育出版社垂爱, 今又推出第二版。同初版比较, 新版正文始终未作大的变动, 只是新添了“例题选讲”部分, 希望这些资料能更加有利于读者自学。

本书追求简明。数值分析的基本内容是数值算法的设计与分析。本书坚持这样的观点: 对于数值微积分, 无论是算法的设计还是算法的分析, 其高等数学的基础都是泰勒公式。一些学术界同行评价本书是“泰勒公式包打天下”。这种说法是中肯的。

微积分的发明是人类智慧的伟大发展。什么是微积分? 华人数学家项武义先生精辟地指出: “俗语常常用‘程咬金三斧头’来笑话一个人的招式贫乏, 那么微积分可就只有‘逼近法’这一斧头了! 可是逼近法这一斧头却是无往不利、无坚不摧的! 学微积分也就是要学会灵活地运用逼近法去简化和解决实际问题。”(项武义著, 微积分大意, 人民教育出版社, 1978 年版)

微积分的精华是逼近法。逼近法的精髓是泰勒公式。作者在编写数值分析教材的过程中始终坚持这一指导思想。

本书的宗旨是追求精简实用。关于教材的“简明”, 不同时代有不同的内涵与需求。本书的原型是 1978 年出版的《工程数学——计算方法》一书。该书自 1978 年元月“接受任务”到当年 5 月在上海通过评审, 其出版过程是仓促的。在上海审稿会上, 参与审稿的诸位先生协助弥补了书稿中的不少缺陷与不足。西安交通大学游兆永先生在会上建议增补有关曲线拟合方面的内容, 并亲自赶写了一份材料附在书后。后来, 作者将这份珍贵的“附录”稍加充实, 改写成“曲线拟合的最小二乘法”一节纳入《简明教程》一书的正文, 留作永久的纪念。

正如“初版前言”所指出的, 《简明教程》一书得以顺利出版, 完全仰仗游兆永先生的鼎力支持。游先生以其崇高的威望和博大的胸怀, 无微不至地关怀爱护《简明教程》这本小书的命运。在本书再版的今天, 作者深切地怀念良师挚友游兆永先生。

20 多年前使用计算机还只是少数人的“专利”, 而今已广泛普及, 人类已

进入信息化时代。新的世纪，新的时代，数值分析(计算方法)教材也应做到“与时俱进”。作者对《数值分析简明教程》一而再地重版感到忐忑不安，真诚地期盼数值分析(计算方法)的教学体系今后会有更为新巧的构思。

王能超

2003年2月8日

于华中科技大学

目 录

引论	1
A 算法	1
B 误差	7
引论习题	11
第一章 插值方法	13
1.1 问题的提法	13
1.2 拉格朗日插值公式	15
1.3 插值余项	19
1.4 埃特金算法	21
1.5 牛顿插值公式	23
1.6 埃尔米特插值	28
1.7 分段插值法	30
1.8 样条函数	33
1.9 曲线拟合的最小二乘法	36
例题选讲 1.1 拉格朗日插值基函数	41
例题选讲 1.2 插值余项	43
例题选讲 1.3 差商与差分	44
例题选讲 1.4 牛顿插值公式	47
例题选讲 1.5 埃尔米特插值	50
习题一	54
第二章 数值积分	58
2.1 机械求积	58
2.2 牛顿 - 柯特斯公式	61
2.3 龙贝格算法	66
2.4 高斯公式	71
2.5 数值微分	76
例题选讲 2.1 机械求积	80
例题选讲 2.2 求积公式的设计	81
例题选讲 2.3 高斯求积公式	86
例题选讲 2.4 龙贝格加速算法	90

例题选讲 2.5 数值微分	93
习题二	94
第三章 常微分方程的差分方法	97
3.1 欧拉方法	97
3.2 改进的欧拉方法	100
3.3 龙格 – 库塔方法	102
3.4 亚当姆斯方法	107
3.5 收敛性与稳定性	112
3.6 方程组与高阶方程的情形	114
3.7 边值问题	116
例题选讲 3.1 龙格 – 库塔格式的精度分析	117
例题选讲 3.2 线性多步法的设计与分析	120
习题三	124
第四章 方程求根的迭代法	126
4.1 迭代过程的收敛性	126
4.2 迭代过程的加速	132
4.3 牛顿法	135
4.4 弦截法	139
例题选讲 4.1 压缩映像原理	141
例题选讲 4.2 迭代过程的收敛速度	145
例题选讲 4.3 牛顿法的误差分析	147
例题选讲 4.4 牛顿法的修正与改进	149
习题四	153
第五章 线性方程组的迭代法	156
5.1 迭代公式的建立	156
5.2 向量和矩阵的范数	162
5.3 迭代过程的收敛性	165
例题选讲 5.1 迭代公式的设计	167
例题选讲 5.2 迭代过程的收敛性	169
习题五	170
第六章 线性方程组的直接法	172
6.1 消去法	172
6.2 追赶法	181
6.3 平方根法	185
6.4 误差分析	188

例题选讲 6.1 追赶法的变形与推广	190
例题选讲 6.2 三角分解的两种模式	194
例题选讲 6.3 对称阵的乔累斯基分解	196
习题六	197
习题参考答案	200

引 论

科学技术的发展提出大量复杂的数值计算问题，这些问题的解决不是人工手算（包括使用算盘以及计算器之类简单的计算工具）所能胜任的，必须依靠电子计算机。用电子计算机进行这种科学技术计算的工作，称为**科学计算**，或简称**电算**。

科学计算的应用范围非常广泛，国防尖端的一些科研项目，如核武器的研制、导弹的发射等，始终是科学计算最为活跃的领域。今天，科学计算在工农农业生产各个部门也正在发挥日益重要的作用。

例如，气象资料的汇总、加工并求得天气图像，这方面工作的计算量大而且时间性强，要求电子计算机作高速或超高速运算，以对天气作出短期及中期预报。

又如，将所设计的船型型体数值表转换成初始数据输入电子计算机，经过计算即可求出外板和肋骨的展开数据。在造船工业中用这种方法进行数学放样，既节省了人力物力，又缩短了设计周期。

本门课程将着重介绍进行科学计算所必须掌握的一些最基本、最常用的算法。

A 算 法

1. 研究算法的意义

电子计算机的运算速度高，可以承担大运算量的工作，这是否意味着人们对计算机上的算法可以随意选择呢？

我们知道，行列式解法的克莱姆（Cramer）法则原则上可用来求解线性方程组。用这种方法求解一个 n 阶方程组，要算 $n+1$ 个 n 阶行列式的值，为此总共需要做 $n! (n-1) (n+1)$ 次乘法。当 n 充分大时，这个计算量是相当惊人的。譬如一个 20 阶不算太大的方程组，大约要做 10^{21} 次乘法，这项计算即使用百万次每秒的电子计算机去做，也得要连续工作千百年才能完成。当然这是完全没有实际意义的。其实，解线性方程组有许多实用的算法（参看本书第五章与第六章），譬如用众所周知的消元法，一个 20 阶的方程组即使用计算器也能很快地解出来。这个简单的例子说明，能否正确地制定算法是科学计算成

败的关键.

2. 什么是算法

针对一个具体的数学问题，可以给出多种解法.

例 1 证明二次方程

$$x^2 + 2bx + c = 0 \quad (1)$$

至多有两个不同的实根.

证 下面提供三种解法.

(1) 反证法 假定方程(1)有三个互异的实根 x_1 , x_2 和 x_3 , 则有

$$x_1^2 + 2bx_1 + c = 0$$

$$x_2^2 + 2bx_2 + c = 0$$

$$x_3^2 + 2bx_3 + c = 0$$

以上式子两两相减得

$$x_2 + x_1 + 2b = 0$$

$$x_3 + x_2 + 2b = 0$$

从而有 $x_1 = x_3$, 这与原设矛盾. 证毕.

(2) 图解法 方程(1)配方得

$$(x + b)^2 + c - b^2 = 0 \quad (2)$$

在坐标纸上描出抛物线 $y = (x + b)^2 + c - b^2$, 它与 x 轴的交点(横坐标)即为所求的实根, 而交点至多只有两个.

(3) 公式法 据式(2)可导出直接的求根公式

$$x_{1,2} = -b \pm \sqrt{b^2 - c} \quad (3)$$

上述三种方法, 反证法不是构造性的; 作图法虽是构造性的, 但不是数值的. 我们所说的“算法”, 必须是构造性的数值方法, 即不但要论证问题的可解性, 而且解的构造是通过数值演算过程来完成的.

同传统意义的近似计算方法不同, 我们所要研究的算法是为电子计算机提供的, 因此, 解题方案当中的每个细节都必须准确地加以定义, 并且要完整地描述整个解题过程. 我们所说的“算法”, 不仅仅是单纯的式(3)一类的数学公式, 而是指解题方案的准确和完整的描述.

描述算法可以用多种方式, 本书常用框图直观地显示算法的全貌.

譬如, 设要用公式(3)求解二次方程(1), 则需依判别式 $d = b^2 - c$ 的符号区分下列三种情况:

1° $d < 0$, 无实根;

2° $d = 0$, 有重根 $x_1 = x_2 = -b$;

3° $d > 0$, 可用公式(3)求得两个互异实根 x_1, x_2 .

图 0-1 形象地描述了上面的算法.

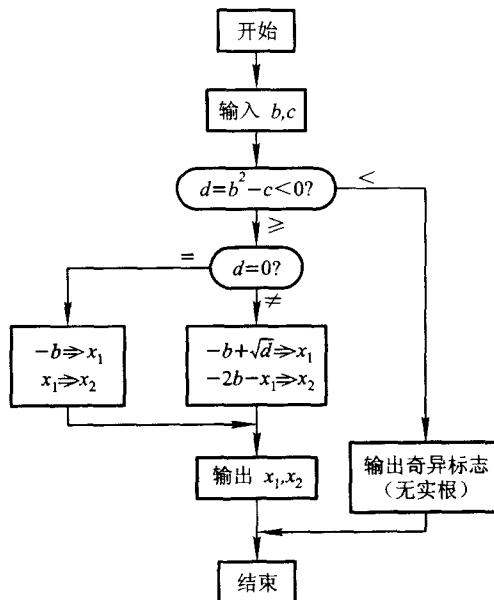


图 0-1

这里使用了两种形式的框. 一种是矩形框 $\boxed{\quad}$, 称叙述框. 计算公式就填在这种框内. 另一种是圆边框 (\quad) , 称检查框, 表示算法的判断检查部分. 检查框有两个出口, 究竟选择哪个出口, 要看框内的检查条件是否成立来决定.

今后所有的框图均以 **开始** 框标志计算过程开始启动, 而用 **结束** 框表示计算过程的最终结束. 另外, 将用箭头 “ \rightarrow ” 指明各框执行的顺序.

下面剖析两个常用算法来阐述算法的基本特征.

3. 多项式求值的秦九韶方法

计算公式通常是算法的核心部分. 计算机上使用的算法, 其计算公式常采取递推化形式. 递推化的基本思想是将一个复杂的计算过程归结为简单过程的多次重复, 这种重复在算法上表现为循环, 描述是容易的.

譬如, 设要对给定的 x 求下列多项式的值

$$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n \quad (4)$$

一种看起来很“自然”的算法是直接逐项求和. 我们用 t_k 表示 x 的 k 次幂, u_k 表示式(4)右端前 $k+1$ 项的部分和

$$t_k = x^k$$

$$u_k = a_0 + a_1 x + \cdots + a_k x^k$$

则

$$\begin{cases} t_k = x \cdot t_{k-1}, \\ u_k = u_{k-1} + a_k t_k, \end{cases} \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (5)$$

作为初值，令

$$\begin{cases} t_0 = 1 \\ u_0 = a_0 \end{cases} \quad (6)$$

利用初值(6)对 $k = 1, 2, \dots$ ，直到 n 反复执行算式(5)，最终得出的 u_n 就是所求的值 $p(x)$.

统计上述算法的计算量。加减操作的机器运行时间比乘除操作少得多，在统计计算量时，可忽略加减法，而只统计乘除法的次数。递推公式(5)的每一步需做两次乘法，因此总的计算量为 $2n$ 次乘法。

下面再介绍一种求值方案。为此首先加工计算公式，设将式(4)按降幂的顺序重排为

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

从它的前两项提出 x^{n-1} ，则有

$$p(x) = (a_n x + a_{n-1}) x^{n-1} + a_{n-2} x^{n-2} + \cdots + a_1 x + a_0$$

经过这个手续，如果算出括号内的值，则问题归结为计算一个 $n-1$ 次多项式（注意降了一次）。再施行同样的手续，则进一步有

$$p(x) = ((a_n x + a_{n-1}) x + a_{n-2}) x^{n-2} + a_{n-3} x^{n-3} + \cdots + a_1 x + a_0$$

这样每做一步，所归结出的多项式就降低一次，最终可将所给计算公式(4)加工成如下嵌套形式

$$p(x) = (\cdots ((a_n x + a_{n-1}) x + a_{n-2}) x + \cdots + a_1) x + a_0 \quad (7)$$

可利用式(7)结构上的特点，从里往外一层一层地计算。设用 v_k 表示第 k 层（从里面数起）的值

$$v_k = (\cdots ((a_n x + a_{n-1}) x + \cdots + a_{n-k+1}) x + a_{n-k})$$

那么，第 k 层的结果 v_k 显然等于第 $k-1$ 层的结果 v_{k-1} 乘上 x 再加上系数 a_{n-k} ：

$$v_k = xv_{k-1} + a_{n-k}, \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (8)$$

作为初值，令

$$v_0 = a_n \quad (9)$$

显然，这一算法的总计算量为 n 次乘法。比较式(5)~(6)和式(8)~(9)两种算法，后一种不但逻辑结构简单，而且计算量节约了一半。

多项式求值的这种算法称做秦九韶算法，它是我国宋代大数学家秦九韶最先提出的^①.

秦九韶算法的特点在于，它通过一次式的反复计算，逐步得出高次多项式的值. 具体地说，它将一个 n 次多项式的求值问题，归结为重复计算 n 个一次式(8)来实现. 这种化繁为简的处理方法在数值分析中是屡见不鲜的.

现在考虑秦九韶方法的计算程序.

按式(8)计算，每求出一个“新值” v_k 以后，“老值” v_{k-1} 便失去继续保存的价值，因此可以将新值 v_k 存放在老值 v_{k-1} 所占用的单元内. 这样，只需设置一个单元 v 进行累算，而将式(8)表示为下列动态形式

$$x \cdot v + a_{n-k} \Rightarrow v, \quad k = 1, 2, \dots, n$$

执行这组算式之前，应先送初值 a_n 到单元 v 中

$$a_n \Rightarrow v$$

图 0-2 描述了秦九韶算法，其中：

[框 1] 准备部分. 单元 v 中送初值 a_n ，

单元 k 中送计数值 1.

[框 2] 计算部分. 每循环一次，单元 v 中的老值 v_{k-1} 为新值 v_k 所替换.

[框 3] 控制部分. 检查单元 k 中计数值以判断循环是否结束. 当计数值为 n 时输出 v 中结果，否则转框 4.

[框 4] 修改部分. 修改单元 k 中计数值，然后转框 2 再做下一步的计算.

4. 方程求根的二分法

许多实际算法表现为某种无穷递推过程的截断，实现这类算法，不但需要建立计算公式，还需要解决精度控制问题. 下述方程求根算法就是这类算法的一个范例.

设函数 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续， $f(a)f(b) < 0$ ，根据连续函数的性质， $f(x)$ 在 $[a, b]$ 内一定有实的零点，即方程 $f(x) = 0$ 在 $[a, b]$ 内一定有实根. 这里假定它在 $[a, b]$ 内有唯一的单实根 x^* .

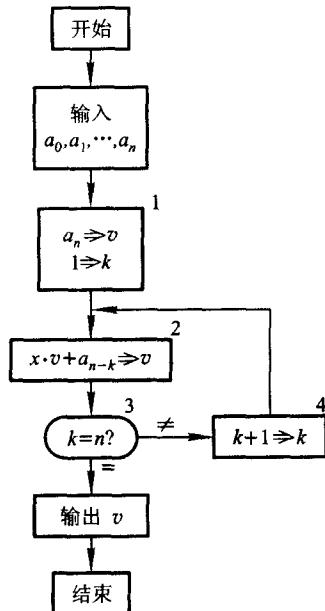


图 0-2

^① 外国文献称这一算法为霍纳(Horner)算法，其实霍纳的工作比秦九韶晚了五百多年.

考察有根区间 $[a, b]$, 取中点 $x_0 = \frac{a+b}{2}$ 将它分为两半, 然后进行根的搜索, 即检查 $f(x_0)$ 与 $f(a)$ 是否同号; 若确系同号, 说明所求的根 x^* 在 x_0 的右侧, 这时令 $a_1 = x_0$, $b_1 = b$; 否则 x^* 必在 x_0 的左侧, 这时令 $a_1 = a$, $b_1 = x_0$ (图 0-3). 不管出现哪一种情形, 新的有根区间 $[a_1, b_1]$ 的长度仅为 $[a, b]$ 的一半.

对于压缩了的有根区间 $[a_1, b_1]$ 又可施行同样的手续, 即用中点 $x_1 = \frac{a_1+b_1}{2}$ 将区间 $[a_1, b_1]$ 再分为两半, 然后通过根的搜索判定所求的根在 x_1 的哪一侧, 从而又确定一个新的有根区间 $[a_2, b_2]$, 其长度是 $[a_1, b_1]$ 的一半.

如此反复二分下去, 即可得出一系列有根区间

$$[a, b] \supset [a_1, b_1] \supset [a_2, b_2] \supset \cdots \supset [a_k, b_k] \supset \cdots$$

其中每个区间都是前一个区间的一半, 因此二分 k 次后的有根区间 $[a_k, b_k]$ 的长度

$$b_k - a_k = \frac{1}{2^k} (b - a)$$

可见, 如果二分过程无限地继续下去, 这些有根区间最终必收缩于一点 x^* , 该点显然就是所求的根.

第 k 次二分后, 设取有根区间 $[a_k, b_k]$ 的中点

$$x_k = \frac{1}{2} (a_k + b_k)$$

作为根的近似值, 则在二分过程中可以获得一个近似根的序列 x_0, x_1, x_2, \dots , 该序列以根 x^* 为极限.

在实际计算时, 人们不可能也没有必要完成这种无穷过程, 因为计算结果允许带有一定的误差. 由于

$$|x^* - x_k| \leq \frac{1}{2} (b_k - a_k) = \frac{1}{2^{k+1}} (b - a)$$

只要二分足够多次(即 k 充分大), 便有

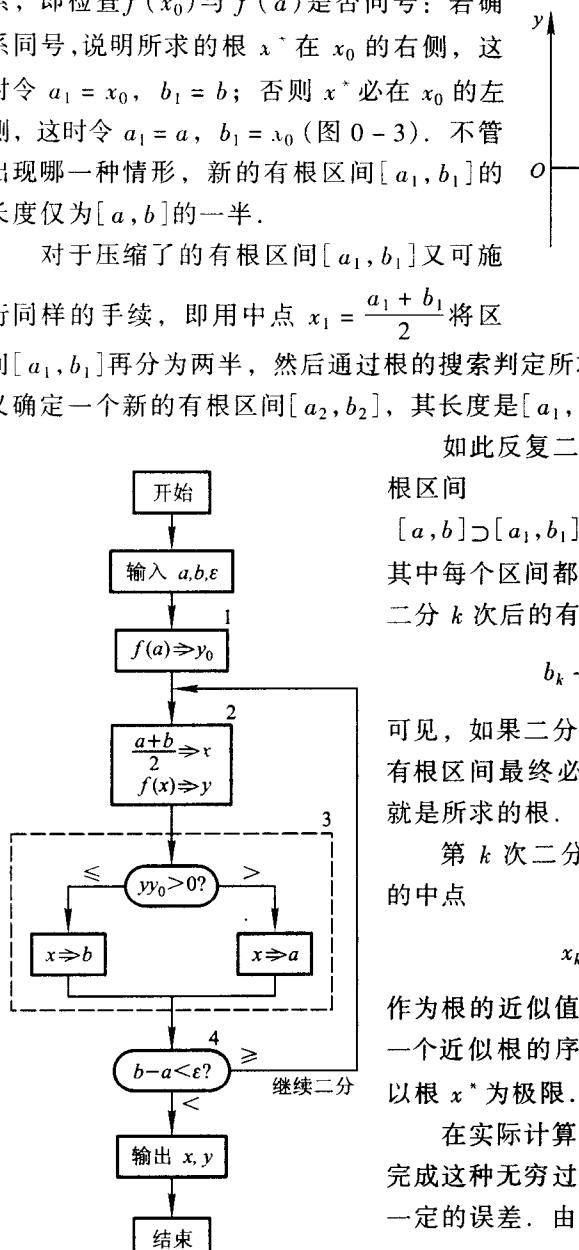


图 0-4

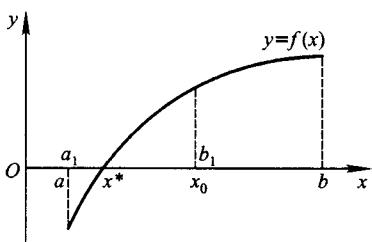


图 0-3

$$|x^* - x_k| < \epsilon$$

这里 ϵ 为预定精度.

上述求根方法称为二分法, 它是电子计算机上一种常用算法. 我们给出其算法框图(图 0-4), 图中 a , b 表示有根区间的左、右端点; x 表示近似根.

图 0-4 中各框的具体含义如下:

- [框 1] 从所给区间 $[a, b]$ 着手二分.
- [框 2] 取有根区间 $[a, b]$ 的中点 x 作为近似根.
- [框 3] 判定二分后生成的有根区间 $[a, b]$.
- [框 4] 检查近似根 x 是否满足精度要求.

例 2 用二分法求方程 $x^3 - x - 1 = 0$ 在区间 $[1, 1.5]$ 内的一个实根, 要求误差不超过 0.005.

解 首先预估所要二分的次数. 按误差估计式

$$|x^* - x_k| \leq \frac{1}{2^{k+1}}(b - a)$$

只要二分 6 次, 便能达到所要求的精度.

二分法的计算结果如表 0-1 所示.

表 0-1

k	a_k	b_k	x_k
0	1.000 0	1.500 0	1.250 0
1	1.250 0		1.375 0
2		1.375 0	1.312 5
3	1.312 5		1.343 8
4		1.343 8	1.328 1
5		1.328 1	1.320 3
6	1.320 3		1.324 2

B 误 差

1. 误差分析不容忽视

在研究算法的同时, 必须注重误差分析, 否则, 一个合理的算法也可能得出错误的结果.

例 3 用中心差商公式求 $f(x) = \sqrt{x}$ 在 $x = 2$ 的导数值

$$f'(2) \approx \frac{\sqrt{2+h} - \sqrt{2-h}}{2h} \quad (10)$$

从理论上说，步长 h 愈小，计算结果愈准确。上机计算的实际情况将会怎样呢？

解 我们知道，在计算机上数的表示受机器字长的限制，设取 5 位数字计算，若令 $h = 0.1$ ，得

$$f'(2) \approx \frac{1.4491 - 1.3784}{0.2} = 0.35350$$

与导数的精确值 $f'(2) = 0.353553\cdots$ 比较，这项计算还是可取的。但是，如果缩小步长取 $h = 0.0001$ ，则得

$$f'(2) \approx \frac{1.4142 - 1.4142}{0.0002} = 0$$

算出的结果反而毫无价值。

由此例可知：两个相近的数相减，会造成有效数字的严重损失。实际计算中要尽量避免这种情况发生。

例 4 求解方程 $x^2 - (10^5 + 1)x + 10^5 = 0$ 。

解 仍取 5 位数字进行计算，并用“ \triangleq ”标记对阶舍入的计算过程。具体求根利用式(3)，这里 $c = 10^5$ ，而

$$b = -\frac{1}{2} \times (10^5 + 1) \triangleq -\frac{1}{2} \times 10^5$$

$$\sqrt{b^2 - c} = \sqrt{\left[-\frac{1}{2}(10^5 + 1)\right]^2 - 10^5} \triangleq \frac{1}{2} \times 10^5$$

故有

$$x_1 = -b + \sqrt{b^2 - c} \triangleq 10^5$$

$$x_2 = -b - \sqrt{b^2 - c} \triangleq 0$$

原方程的精确解显然是 $x_1 = 10^5$ ， $x_2 = 1$ ，可见上面求出的结果严重失真。

在计算机上，加减运算之前先要“对阶”，例 4 说明，对阶手续会造成大数“吃掉”小数的后果，因而实际计算时不宜用相差悬殊的两个数做加减运算。

例 5 考察方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{11}{6} \\ \frac{13}{12} \\ \frac{47}{60} \end{bmatrix}$$

其解为

$$x_1 = x_2 = x_3 = 1$$