SHUZHI FENXI

数值分析

徐跃良 编

西南交通大学出版社
Http://press.swjtu.edu.cn

数 值 分 析

徐跃良 编

西南交通大学出版社
·成 都·

内 容 简 介

本书介绍了数值分析中常用的基本概念及理论，详细地介绍了数值计算中的基本算法. 内容包括：插值方法，函数逼近与曲线拟合，数值积分与数值微分，解线性方程组的直接解法，解线性方程组的迭代法，非线性方程求根，矩阵特征值问题的计算，常微分方程初值问题的数值解法.

本书理论证明严谨，概念叙述清晰. 可作为高等院校各类工科专业研究生和数学系各专业本科生的教材或参考用书，也可供从事科学与工程计算的科研工作者参考.

图书在版编目（CIP）数据

数值分析 / 徐跃良编. 一成都：西南交通大学出版社，2005.9

ISBN 7-81104-094-8

Ⅰ. 数… Ⅱ. 徐… Ⅲ. 数值计算－高等学校－教材 Ⅳ. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2005）第 057898 号

数 值 分 析

徐跃良 编

*

责任编辑 张宝华

责任校对 韩松云

封面设计 肖 勤

西南交通大学出版社出版发行

（成都二环路北一段 111 号 邮政编码：610031 发行部电话：87600564）

http: //press.swjtu.edu.cn

E-mail: cbsxx@.swjtu.edu.cn

四川森林印务有限责任公司印刷

*

成品尺寸：170 mm×230 mm 印张：13.625

字数：257 千字 印数：1—3 000 册

2005 年 9 月第 1 版 2005 年 9 月第 1 次印刷

ISBN 7-81104-094-8/O・009

定价：18.00 元

前　言

随着科技的进步和经济的迅猛发展，计算机这一工具在人们的生活和工作中越来越重要．数值分析作为工程计算和科学计算连接计算机的一门基础课程日益受到人们的重视，已成为各高校计算和信息专业学生的必修课，同时也成为工科硕士研究生学位公共必修课．

为已掌握高等数学、线性代数及学习过一门计算机语言的学生编写一本（共约68学时）数值分析课程的基本内容及常用方法的适用教材（周学时4)，是编者的愿望。针对工科研究生既要有一定的理论基础，又能学以致用，解决实际问题的要求，在教材的编写过程中，对涉及的定理大多有详细的证明，对介绍的方法多有例题及计算框图，每章都配适量的习题，以期对介绍的理论及方法有较深入的理解．

本书的编写、出版得到了西南交通大学出版基金资助及西南交通大学出版社的大力支持，作者在此表示衷心的感谢．

由于编者水平所限，教材中难免有不妥之处，恳请读者指正，以便作进一步的修改．

编　者

2005.8

目　　录

第一章　绪　　论

第一节　数值分析与算法

一、什么是数值分析

数值分析是计算数学的一个主要部分．它不仅要研究各种数学问题数值解法，同时也要分析所用的数值解法在理论上的合理性，如解法所产生的误差能否满足精度要求；解法是否稳定、是否收敛及收敛的速度等．例如，为了计算 $\sum\limits_{k=1}^{99}\frac{1}{k(k+1)}$，可以用直接累加的解法，也可以对其分析后，采用 $\sum\limits_{k=1}^{99}\frac{1}{k(k+1)}=1-\frac{1}{100}=0.99$. 尽管直接累加在理论上是可行的，但费时且有误差，后一解法既快又准确．实际工程中的数学问题比上面提到的数学问题要复杂得多，往往要借助于计算机这一工具进行运算．由于计算机实质上只会做加减乘除等基本运算，所以研究怎样通过计算机所能执行的基本运算，求得数学问题的有效数值解是数值分析的最终任务．而数学问题的数值解的得到，必须有严格的数学理论作基础．本书将介绍一些常用的算法及算法所涉及的数学理论．所谓算法是指由基本运算及运算顺序的规定所构成的完整的解题步骤．

二、算法中应注意的问题

求解一个问题的算法可以有多种，一个好的算法应该注意的是：

(1) 方法的收敛性．由算法所求值从理论上讲应该是可无限地接近准确值，或者说误差可以无限接近 0. 所谓误差是指准确值 x 与近似值 x^* 的差，即 $e^*=x-x^*$

例 1　计算 $\sin x$ 在 $x=\frac{\pi}{7}$ 的值，由于

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

故设计算法如下

$$\begin{cases} S_0 = \dfrac{\pi}{7} \\ S_n = S_{n-1} + \dfrac{(-1)^n}{(2n+1)!}\left(\dfrac{\pi}{7}\right)^{2n+1} \end{cases}$$

由高等数学知识知：如用 S_n 近似 $\sin\frac{\pi}{7}$，其误差

$$\left|S_n - \sin\frac{\pi}{7}\right| = \frac{1}{(2n+3)!}\left(\frac{\pi}{7}\right)^{2n+3} - \cdots < \frac{1}{(2n+3)!}\left(\frac{\pi}{7}\right)^{2n+3} \to 0$$

从而这是一个收敛的算法.

(2) 方法的稳定性.算法收敛是重要的，但理论上收敛的算法不一定在实际计算中得到理想的计算结果，这是因为在计算过程中不可避免地有舍入误差.如果此方法在计算中能很好地控制这种误差，则称方法是稳定的，否则是不稳定的.如计算

$$I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n e^x dx \qquad (n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ 7)$$

由于 $I_n = 1 - nI_{n-1}$，为了计算 I_0，I_1，…，I_7，至少有两种算法：

① 先计算出 I_0，然后由递推关系 $I_n = 1 - nI_{n-1}$，再计算 I_1，…，I_7；

② 先计算出 I_7，然后由递推关系 $I_{n-1} = \frac{1}{n} - I_n$，再计算 I_6，I_5，…，I_0.

计算结果如表 1.1 所示(计算机按 8 位浮点数计算，最后取 6 位小数得).

表 1.1

	第一种计算法	第二种计算法	准　确　值
I_0	0.632 121	0.632 121	0.632 121
I_1	0.367 879	0.367 879	0.367 879
I_2	0.264 242	0.264 241	0.264 241
I_3	0.207 274	0.207 277	0.207 277
I_4	0.170 905	0.170 893	0.170 893
I_5	0.145 477	0.145 533	0.145 533
I_6	0.127 139	0.126 802	0.126 802
I_7	0.110 026	0.112 384	0.112 384

由此可以看出第一种算法随迭代次数的增加与准确值间的误差在增大，而第二种算法误差没有增加，故第二种算法是稳定的.如果按第一种算法继续计算可以得到

$$I_8=0.119\,789 \quad I_9=-0.078\,102 \quad I_{11}=-18.591\,2 \quad I_{12}=224.095$$

已经知道此积分列的值不可能是负的，同时 $n=12$ 时的准确值是 $I_{12}=0.071\,773$，误差很大，随着迭代次数的增加，误差不能有效得到控制，因此第一种算法是不稳定的．尽管两种算法从数学上讲都是准确的．

(3) 方法的快捷与存储空间节省．现在计算机的运算速度尽管很快，但如果不注意方法，则有些看似简单的问题，计算所需的时间也是不能容忍的．如求解如下的方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 是 $n\times n$ 矩阵，$\boldsymbol{b}$ 是 n 维列向量，且假定 $\det \boldsymbol{A}\neq 0$，则由 Cramer 法可知

$$x_i=\frac{\det \boldsymbol{A}_i}{\det \boldsymbol{A}} \qquad (i=1,\ \cdots,\ n)$$

其中，$\boldsymbol{A}_i$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 列换成 $\boldsymbol{b}$ 后所成的矩阵．如果在计算矩阵的行列式时，采用行列式的定义算法，即行列式中所有不同行不同列的元素乘积的代数和，要计算出 x_1，$x_2\cdots$，x_n，仅乘除法的总数为

$$N=(n+1)!\ (n-1)+n$$

如果 $n=20$，则 $N\approx 9.7\times 10^{20}$，所以使用每秒做一亿次乘除法的计算机计算，也需约 30 万年才能算出．故用此方法计算显然是不可行的．另外在研究算法时，存储空间的节省也是一个不可忽略的问题．

第二节　误差及相关概念

一、误差的来源

误差的来源主要有模型误差、观测误差、截断误差、舍入误差等．

模型误差：由于针对实际问题建立的数学模型的不精确而引起的误差．由于在建模过程中往往忽略一些次要的因素，从而不可避免地存在一些误差，当然希望这种误差不要太大，否则此模型是不能用的．

观测误差：由于一般数学问题包含若干参数，它们的值往往通过观测、测量得到，而难免带有的误差．

截断误差：指求问题的解时，往往可能是一个求极限的过程，但这实际上是做不到的．如在求 $\sin\frac{\pi}{7}$时，采用

$$\frac{\pi}{7}-\frac{1}{3!}\left(\frac{\pi}{7}\right)^3+\frac{1}{5!}\left(\frac{\pi}{7}\right)^5-\frac{1}{7!}\left(\frac{\pi}{7}\right)^7$$

来替代而忽略了$\frac{1}{9!}\left(\frac{\pi}{7}\right)^9-\cdots$这一部分而产生的误差．

舍入误差：由于计算时只能对有限位数进行运算，因而往往不可避免地采用四舍五入的方法进行计算而产生的误差．

在本书中主要涉及截断误差和舍入误差．

二、绝对误差与相对误差

设 x 是准确值，x^* 是 x 的近似值，称 $e^*=x-x^*$ 为近似值 x^* 的绝对误差．但在实际问题中准确值 x 往往得不到，从而也求不出 e^*．一般能知道 $|e^*|$ 不超过某个数 ε，即 $|x-x^*|\leqslant\varepsilon$，因此称 ε 为 x^* 的绝对误差限(简称误差限)．一般认为误差限越小，x^* 精确程度越高．例如，测得某人的身高为 1.72 m，绝对误差限为 0.01 m．则可以断定此人的身高在 [1.72－0.01，1.72＋0.01] 之间．但仅有绝对误差限来反映精确程度是不够的，例如，测量一座山的高度为 1 325.69 m，误差限为 0.05 m，然而仅从绝对误差限来看，显然前面的例子要好，这是不合理的．为此引入相对误差的概念．

设 x 为准确值，x^* 是近似值，则称

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

为近似值 x^* 的相对误差，如果已知数 ε_r，使

$$|e_r^*|=\frac{|x-x^*|}{|x|}\leqslant\varepsilon_r$$

则称 ε_r 为 x^* 的相对误差限．在实际问题中，由于准确值 x 得不到，相对误差计算不出来，往往用 $e_r^*=\frac{x-x^*}{x^*}$ 来代替相对误差．

三、有效数字

定义 1.1　设 x^* 是 x 的一个近似值，x^* 总可写成

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

它可以是有限或无限小数的形式，其中 $a_i(i=1,2,\cdots)$ 是 0，1，2，…，9 中的一个数字，$a_1\neq 0$；k 为整数；x 为准确值．如果 $|x^*-x|\leqslant 0.5\times 10^{k-n}$(这里 n 是使此式成立的最大正整数)，则称 x^* 为 x 的具有 n 位有效数字的近似值．

例如，$x=\mathrm{e}$，$x^*=2.718$，由于 $|x^*-x|=0.000\,28\cdots$，且 $|x^*-x|<0.000\,5=0.5\times10^{1-4}$，故用 2.718 近似 e 有 4 位有效数．特别注意：如果用 $x^*=2.718\,5$ 近似 e(=2.718 28…)，有效数字还是 4 位．

显然，近似值的有效数字位数越多，相对误差限越小，反之也成立．下面的定理反映了有效数字与相对误差的关系．

定理 1.1 设 x 的近似值 x^* 有式(1.1)的表示式，

(1) 如果 x^* 有 n 位有效数字，则

$$\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{1}{2a_1}\times10^{1-n}$$

(2) 如果

$$\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{1-n}$$

则 x^* 至少有 n 位有效数字．

证明 (1) 由式(1.1)知：$a_1\times10^{k-1}\leqslant|x^*|\leqslant(a_1+1)\times10^{k-1}$，当 x^* 有 n 位有效数字时，则 $|x-x^*|\leqslant0.5\times10^{k-n}$，从而有

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

(2) 由于

$$\begin{aligned}|x-x^*|&\leqslant|x^*|\cdot\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{1-n}\\&\leqslant(a_1+1)\times10^{k-1}\times\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{1-n}\end{aligned}$$

故

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{k-n}$$

从而 x^* 至少有 n 位有效数字．

注意：定理 1.1 中(1)的逆不成立，例如，$x=0.49$，$x^*=0.484$，则

$$\frac{|x-x^*|}{|x^*|}=0.012\,397<0.012\,5=\frac{1}{2\times4\times10}=\frac{1}{2\times4}\times10^{1-2}$$

由此不能推出 x^* 有 2 位有效数字，这是因为

$$|x-x^*|=0.006>0.005=\frac{1}{2}\times10^{-2}$$

实际上 x^* 对 x 只有 1 位有效数字．

四、误差的传播

在数值计算中，分析误差的传播是一个相当复杂的问题．下面对函数 $y=f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$，由于变量 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的小的波动而引起因变量 y 的变化大小作一估计．这里假定此函数是可微分的．设 $(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 的准确值为 $(x_1^0, x_2^0, \cdots, x_n^0)$，实际计算时采用了近似值 $x^*=(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$ 而产生的误差

$$\Delta y=\left.\frac{\partial f}{\partial x_1}\right|_{x=x^*}(x_1^0-x_1^*)+\left.\frac{\partial f}{\partial x_2}\right|_{x=x^*}(x_2^0-x_2^*)+\cdots+\left.\frac{\partial f}{\partial x_n}\right|_{x=x^*}(x_n^0-x_n^*)$$

$$|\Delta y|\leqslant\left|\left.\frac{\partial f}{\partial x_1}\right|_{x=x^*}(x_1^0-x_1^*)\right|+\left|\left.\frac{\partial f}{\partial x_2}\right|_{x=x^*}(x_2^0-x_2^*)\right|+\cdots+\left|\left.\frac{\partial f}{\partial x_n}\right|_{x=x^*}(x_n^0-x_n^*)\right|$$

从而

$$|\Delta y|\leqslant\left(\sum_{i=1}^n\left|\left.\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|_{x=x^*}\right|\right)\cdot\max_{1\leqslant i\leqslant n}|x_i^0-x_i^*|$$

例 2　已测得某长方形场地长 l 的值为 $l^*=110$ m，宽 d 的值 $d^*=80$ m，若已知 $|l-l^*|\leqslant 0.2$ m，$|d-d^*|\leqslant 0.1$ m，试求其面积的绝对误差与相对误差．

解　$S=ld$，故

$$\Delta S=\left.\frac{\partial S}{\partial l}\right|_{\substack{l=l^*\\d=d^*}}(l-l^*)+\left.\frac{\partial S}{\partial d}\right|_{\substack{l=l^*\\d=d^*}}(d-d^*)$$

$$|\Delta S|\leqslant|d^*||l-l^*|+|l^*||d-d^*|$$

$$|\Delta S|\leqslant 80\times 0.2+110\times 0.1=27\quad(\mathrm{m}^2)$$

相对误差

$$\left|\frac{\Delta S}{S^*}\right|\leqslant\frac{|l-l^*|}{|l^*|}+\frac{|d-d^*|}{|d^*|}\leqslant 0.31\%$$

为提高精度，应尽量保证不丢失有效数字．那么怎么避免有效数字的丢失呢？

(1) 避免相差很大的数相加减是一个有效的手段．

例 3　(用 3 位十进制浮点数字)计算 $x=101+\underbrace{0.1+0.1+\cdots+0.1}_{10}$.

解　如果由自左到右的计算顺序，得 $x=101$. 如果先计算 10 个 0.1 的和，然后与 101 相加则得 $x=102$.

(2) 避免相差很小的数相减．

例 4　求方程 $ax^2+2bx+c=0$ 的两个根．

解　由于 $x_1=\dfrac{-b+\sqrt{b^2-ac}}{a}$，$x_2=\dfrac{-b-\sqrt{b^2-ac}}{a}$. 如果 $b^2\gg|ac|$ 时，$\sqrt{b^2-ac}\approx|b|$，用上面公式的某一个必将损失有效数字.

例如，求解方程 $x^2-16x+1=0$ 的根，$x_1=8+\sqrt{63}$，$x_2=8-\sqrt{63}$. 若取 3 位有效数字计算，则 $x_1=15.9$，$x_2\approx8.00-7.94=0.06$，x_2 只有 1 位有效数字. 若改用 $x_2=\dfrac{1}{8+\sqrt{63}}$计算，则 $x_2=0.062\,9$，与 x_2 准确值 $0.062\,746\cdots$ 相比有 2 位有效数字.

一般来说，解二次方程 $ax^2+2bx+c=0$ 用公式

$$x_1=\frac{-b-(\operatorname{sgn} b)\sqrt{b^2-ac}}{a},\qquad x_2=\frac{c}{ax_1}$$

有较好的精度.

(3) 尽量减少运算次数，简化计算步骤.

这是因在繁杂的大量运算中，每一步计算的舍入误差都有可能增加总的误差.

习　题　一

1. 求下列各数的具有 4 位有效数字的近似值，并指出其绝对误差限和相对误差限.

$$x_1=\sqrt{101},\qquad x_2=\frac{1}{101},\qquad x_3=\ln 0.1$$

2. 为了使 $\sqrt{11}$ 的近似值的相对误差 $\leqslant0.1\%$，问至少应取几位有效数字？

3. 正方形的边长约为 100 cm，问测量时误差最多只能到多少才能保证面积的误差不超过 1 cm^2.

4. 设计一个算法，使求方程 $x^2-56x+1=0$ 的两个根，至少具有 4 位有效数字.

5. 设近似值 $T_0=S_0=35.70$ 具有 4 位有效数字，计算中无舍入误差，试分析分别用递推式

$$T_{i+1}=5T_i-142.8\quad 和\quad S_{i+1}=\frac{1}{5}S_i-142.8$$

计算 T_{20} 和 S_{20} 所得的结果是否可靠？

第二章　非线性方程根的求解

第一节　引　言

本章将介绍单变量非线性方程

$$f(x)=0 \tag{2.1}$$

求解的几种常用方法．通常把方程(2.1)的解称为根或函数 $f(x)$的零点．

在本章介绍的方法中，一般要求：通过对所涉及函数 $f(x)$的分析，尽量找出一个区间 $[a, b]$，使方程(2.1)在此区间内有根，称这样的区间为根的隔离区间．一般情况下根的隔离区间长度越小越好，这样可以保证后面所用方法有较好的收敛效果．而根的隔离区间的取得，一般可通过应用零点存在定理来确定．

定理 2.1(零点存在定理)　如果 $f(x)$在$[a, b]$上连续，使 $f(a)\cdot f(b)<0$，则必存在 $\alpha\in(a, b)$，使 $f(\alpha)=0$.

例 1　求方程 $x^3-2x-5=0$ 实根的隔离区间．

解　设 $f(x)=x^3-2x-5$，则 $f'(x)=3x^2-2$，由此可知在 $\left(-\infty, -\sqrt{\frac{2}{3}}\right)$内 $f(x)$单调增，在 $\left(-\sqrt{\frac{2}{3}}, \sqrt{\frac{2}{3}}\right)$内 $f(x)$单调减，$\left(\sqrt{\frac{2}{3}}, +\infty\right)$内 $f(x)$单调增．但 $f\left(-\sqrt{\frac{2}{3}}\right)<0$，$f\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\right)<0$，所以 $f(x)$最多有一个实根．又因 $f(2)=-1<0$，$f(3)=16>0$，所以$[2, 3]$是一个根的隔离区间．

为了以后叙述的方便，再给出以下定义．

定义 2.1　如果函数 $f(x)$可以因式分解为

$$f(x)=(x-\alpha)^m g(x)$$

且 $g(\alpha)\neq0$，则称 α 是 $f(x)$的 m 重零点，也称为方程 $f(x)=0$ 的 m 重根．如果 $m=1$，则称 α 为 $f(x)$的单重零点或 $f(x)=0$ 的一重根．如果 $m>1$，则称 α 为 $f(x)$的 m 重零点或 $f(x)=0$ 的 m 重根．

性质 2.1　如果函数 $f(x)$是充分可微函数，则 α 是 $f(x)$的 m 重零点的充

要条件是

$$f(\alpha)=f'(\alpha)=\cdots=f^{(m-1)}(\alpha)=0,\ 但\quad f^{(m)}(\alpha)\neq 0$$

下面分别介绍求方程(2.1)实根的方法。

第二节　二分法

二分法的思想相当简单，其数学基础为零点存在定理．具体做法如下：假设函数 $f(x)$在$[a, b]$上连续，且 $f(a)\cdot f(b)<0$，令 $x_0=\frac{a+b}{2}$，计算 $f(x_0)$．如果 $f(x_0)$与 $f(a)$同号，则令 $a_1=x_0$，$b_1=b$；否则，令 $a_1=a$，$b_1=x_0$，由此可知 $f(x)$必在$[a_1, b_1]$中有零点；再对分，令 $x_2=\frac{a_1+b_1}{2}$，计算 $f(x_2)$，…，如此反复，可得到有根的区间套

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

对分 k 次后，区间长度为 $b_k-a_k=\frac{b-a}{2^k}$，如此下去，$\{a_k\}$、$\{b_k\}$必收敛于一点 x^*，此点即为 $f(x)=0$ 的一个根．如果以中点 $x_k=\frac{a_k+b_k}{2}$作为 x^* 的近似，则误差为

$$|x_k-x^*|\leqslant|x_k-x_{k-1}|=\frac{b-a}{2^{k+1}} \tag{2.2}$$

注意：① 如果 $f(x)=0$ 在$[a, b]$内有多个根，二分法尽管能求根，但求出的根是其中的哪一个带有偶然性．最后得到其中的那一个根的近似值，一般与区间$[a, b]$的端点有关．

② 如果 $f(x)=0$ 在$[a, b]$内有唯一的根，则对分法得到的序列$\{x_k\}$，必收敛到方程的唯一根 x^*，误差表达式(2.2)仍成立．

例 2　求方程 $x^3-2x-5=0$ 在$[2, 3]$内的根的近似值，并指出其误差．

解　设 $f(x)=x^3-2x-5$，则有如下的结果．

	有根区间
$f(2)=-1<0$ $f(3)=16>0$	(2, 3)
$f(2.5)>0$	(2, 2.5)
$f(2.25)>0$	(2, 2.25)

$f(2.125)>0$	$(2,\ 2.125)$
$f(2.0625)<0$	$(2.0625,\ 2.125)$
$f(2.09375)<0$	$(2.09375,\ 2.125)$
$f(2.109375)>0$	$(2.09375,\ 2.109375)$

取 $x^*=\frac{2.09375+2.109375}{2}=2.1015625$，则 x^* 与根的绝对误差限为 $\frac{1}{2^7}=0.0078125$，即以 x^* 作为(2，3)间根的近似值，至少保证有 2 位有效数字．

二分法的优点是方法简单，只要函数 $f(x)$ 连续，一定能求出根的近似值，并且可以预报迭代的大致次数．缺点是速度太慢，且无法知道是否是重根．图 2.1 是二分法的计算框图，ε 是误差限．

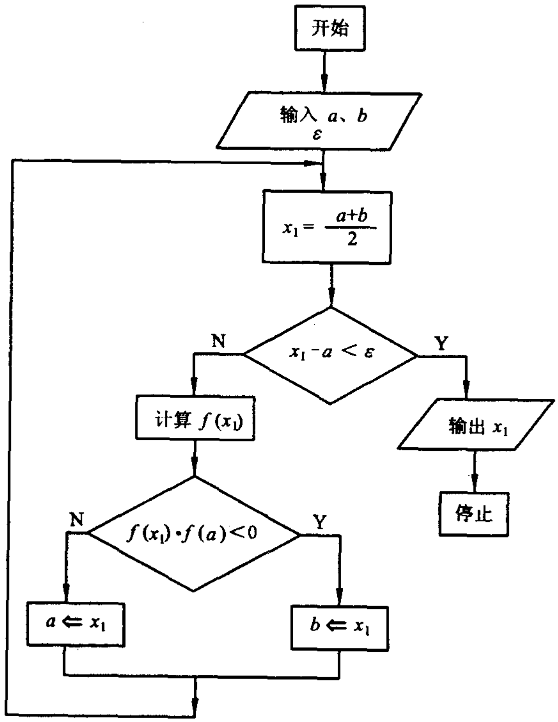

图 2.1

第三节 迭代法

迭代法可分为单点迭代法和多点迭代法．单点迭代法的一般形式为