

工 程 数 学

计 算 方 法

聂铁军 编

国防工业出版社

工 程 数 学

计 算 方 法

聂铁军 编

國防工業出版社

内 容 简 介

本书是西北工业大学、北京航空学院、南京航空学院等三院校数学教研室合编的“工程数学”七个分册之一。本分册介绍数值计算的基本概念和基本方法，着重于工程计算中的常用算法，如方程的近似解法、线性代数计算方法、代数插值、曲线拟合、数值微分与数值积分、常微分方程的数值解法、偏微分方程的差分解法等。书中附有适量习题，书后附习题答案。

本书可作为高等工科院校试用教材，也可供有关科技人员参考。

DL33/23

工 程 数 学 计 算 方 法

聂铁军 编

*

国防工业出版社出版

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

国防工业出版社印刷厂印装

*

787×1092 1/32 印张 67/8 143千字

1982年7月第一版 1982年7月第一次印刷 印数:00,001—27,000册

统一书号:15034·2307 定价:0.73元

前 言

本书是西北工业大学、北京航空学院、南京航空学院等三院校数学教研室合编的一套“工程数学”教材之一。全套教材共分七册出版：矢量分析、复变函数、积分变换、线性代数、计算方法、数学物理方程与特殊函数、概率论与数理统计。

本册介绍数值计算的基本概念和基本方法，着重于工程计算中的常用算法，如方程的近似解法、线性代数计算方法、代数插值、曲线拟合、数值微分与数值积分、常微分方程的数值解法、偏微分方程的差分解法等。

本书各章内容具有一定的相对独立性，可以根据需要予以取舍。各章配有适量习题，书后附有习题答案。阅读本书只需具有一般的高等数学知识或线性代数基本知识。

本书由西北工业大学聂铁军编写，由南京航空学院何柏庆主审。西北工业大学张德珍、傅同奇两同志分别提供了第一、二章和第五章的初稿。参加审稿的还有西北工业大学、南京航空学院、北京航空学院、沈阳航空工业学院和南昌航空工业学院数学教研室的部分同志。我们对在本书编写过程中给予大力支持和提供宝贵意见的所有同志，在此致以

衷心的感谢。

由于我们的水平所限，书中的缺点和错误在所难免，诚望同志们批评指正。

编 者

目 录

第一章 误差知识	240
§ 1.1 绝对误差、有效数字、相对误差	241
§ 1.2 和、差、积、商的误差估计	244
(一)和、差的误差估计 (二)积、商的误差估计	
习 题 一	247
第二章 方程的近似解法	248
§ 2.1 对分法	252
§ 2.2 迭代法	254
§ 2.3 牛顿法	259
习 题 二	263
第三章 线性代数计算方法	264
§ 3.1 解线性方程组的精确法	264
(一)主元素消去法 (二)无回代过程的主元素消去法	
§ 3.2 主元素消去法的应用	275
(一)用主元素消去法解线性方程组系 (二)用主元素消去法求逆矩阵 (三)用主元素消去法求行列式的值	
§ 3.3 解线性方程组的迭代法	279
(一)简单迭代法及其收敛条件 (二)赛德尔迭代法及其收敛条件 (三)化方程组 $AX=B$ 为便于使用迭代法的形式	
§ 3.4 矩阵特征值的计算方法	293
(一)求绝对值最大的特征值的幂法 (二)求解实对称矩阵特征值问题的雅可比方法	
习 题 三	312
第四章 插值法	314
§ 4.1 线性插值与二次插值	316

§ 4.2 均差、均差插值公式	320
(一)均差的概念 均差表 (二)均差插值多项式	
(三)插值多项式的余项	
§ 4.3 等距结点插值公式、差分	329
(一)差分概念与差分表 (二)差分与均差及导数的关系	
(三)等距结点插值公式	
§ 4.4 拉格朗日插值多项式	335
§ 4.5 三次样条插值	341
(一)三次样条函数的定义 (二)系数用节点处的二阶导数	
表示的三次样条函数 (三)系数用节点处的一阶导数表示	
的三次样条函数 (四)解三对角线方程组的追赶法	
习 题 四	353
第五章 曲线拟合与最小二乘法	355
§ 5.1 最小二乘法	355
§ 5.2 多项式拟合	359
习 题 五	365
第六章 数值微分与数值积分	366
§ 6.1 数值微分	366
(一)用插值多项式求数值导数 (二)用三次样条函数求数	
值导数	
§ 6.2 数值积分	369
(一)牛顿-柯特斯公式 (二)复化求积公式 (三)求积公	
式的截断误差 (四)步长的自动选择 (五)线性加速法	
龙贝格求积公式 * (六)高斯求积公式	
习 题 六	396
第七章 常微分方程初值问题的数值解法	397
§ 7.1 欧拉折线法与改进的欧拉方法	397
(一)欧拉折线法 (二)改进的欧拉方法 (三)公式的截断误差	
§ 7.2 龙格-库塔方法	404
§ 7.3 阿当姆斯方法	409
(一)阿当姆斯内插公式 (二)阿当姆斯外插公式 (三)计算	
中估计误差的一种方法 (四)求开头三个点的函数值的方法	

习 题 七	416
第八章 偏微分方程的差分解法	417
§ 8.1 椭圆型方程的差分解法介绍	418
(一) 微分方程的差分近似的建立 (二) 边界条件的转换	
(三) 差分方程的解法及解的收敛性讨论	
§ 8.2 用差分法求解热传导方程	431
§ 8.3 波动方程的差分解法介绍	440
习 题 八	445
习题答案	446

计算方法

第一章 误差知识

人们在实践活动中所处理的数，往往是某一物理量在一定“误差范围”内的近似数值。在实际计算中，特别是使用快速电子数字计算机进行计算时，总是用具有有限位数的数值来进行的。如果参与计算的数的位数是无限的，就要用它们的近似值进行计算。

因此，就产生这样的问题：怎样从原始数据的误差估计出结果的误差；原始数据应具有怎样的准确程度，才能保证结果的误差不会超过指定的限度。

用数值计算方法解决科学技术中的具体问题时，误差的来源不外乎以下几种：

1. 数学描述与实际现象之间的误差

各种实际问题的数学描述，都是在一定条件下理想化了的模型，它与实际现象之间总存在误差，这种误差称为“描述误差”。

2. 观测误差

在各种计算公式中，通常包含有一些参量，而这些参量往往是由观测和实验得到的，它们和实际的大小之间有误差，这种误差称为“观测误差”。

3. 截断误差

在计算问题中，常遇到超越运算，它们要求用极限或无穷过程来求得的。但是，在实际上人们只能进行有限的算

术运算, 只能用有限的步骤来求其近似值。例如, 常用收敛无穷级数的前几项来代替无穷级数, 也就是抛弃了无穷级数的后段, 由此产生的误差叫“截断误差”。

4. 舍入误差

对于参与计算的数中, 无穷小数用有限小数代替, 或以位数较少的有限小数代替位数较多的有限小数, 例如用3.14代替 π , 用1.414代替 $\sqrt{2}$ 等等。这样所产生的误差叫“舍入误差”。

误差的来源虽然有以上种种, 且了解这些对于数值计算是有帮助的, 但前两种往往不是计算工作者所能独立完成的, 因此我们下面将着重研究“截断误差”与“舍入误差”。

§ 1.1 绝对误差、有效数字、相对误差

设 x^* 代表准确值 x 的一个近似值。我们定义

$$e^* = x - x^* \quad (1.1.1)$$

为近似值 x^* 的绝对误差。通常无法准确地算出绝对误差的真值, 只能根据具体测量或计算的情况估计它的绝对值的范围, 也就是去估计 $|e^*|$ 的上界。设

$$|e^*| = |x - x^*| \leq \varepsilon^* \quad (1.1.2)$$

那末, ε^* 就叫做近似值 x^* 的绝对误差限。以后也把它简称为绝对误差。

例如, 用有毫米刻度的米尺测量不超过1米的长度 x , 读数法如下: 如果长度接近于毫米刻度 x^* , 就读出那个刻度数 x^* 作为长度的近似值。显然, 这个近似值的绝对误差为半毫米。

有时也用

1110148

$$x = x^* \pm \varepsilon^*$$

表示近似值 x^* 的精确度或准确值所在的范围。

我们表示一个近似数时, 为了同时反映它的准确程度, 常用到“有效数字”的概念。设有一数 x , 经过四舍五入, 得到它的近似值

$$x^* = \pm (x_1 \cdot 10^{-1} + x_2 \cdot 10^{-2} + \cdots + x_n \cdot 10^{-n}) 10^m \quad (1.1.3)$$

其中 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 都是 0, 1, 2, $\cdots$, 9 这十个数字之一, $x_1 \neq 0$; n 是正整数, m 是整数。这里 x^* 的绝对误差是

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \quad (1.1.4)$$

这时我们说: x^* 作为 x 的近似值, 具有 n 位“有效数字”。其中 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 都是 x^* 的有效数字。 x^* 称为具有 n 位有效数字的“有效数”, 也可以说它准确到第 n 位。

通常我们书写数字时, 要求从其最左边第一位不是 0 的数字起, 到它最右边的一位数字止, 都是有效数字。例如 0.00203 的有效数字为 2、0、3。3.14 的有效数字为 3、1、4。需要注意的是有效数 0.0023 与 0.002300 是不同的, 因为前者具有两位有效数字, 其绝对误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-4}$, 后者具有四位有效数字, 其绝对误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-6}$ 。

下面我们再讨论相对误差的概念。

绝对误差的大小不能完全反映近似值的准确程度, 例如设

$$x = 10 \pm 1$$

$$y = 1000 \pm 5$$

近似数 $y^* = 1000$ 的绝对误差比 $x^* = 10$ 的绝对误差大四倍,

不过若考虑到数本身的大小, 在 1000 内差 5 比在 10 内差 1, 显然前者更精确些。这说明绝对误差的大小不能完全地表明一个近似数的准确程度。为了表明一个近似数的准确程度, 有必要引入相对误差的概念。

我们定义 x 的近似值 x^* 的相对误差为

$$e_r^* = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*} \quad (1.1.5)$$

相对误差说明了 x^* 的绝对误差与 x^* 本身比较起来所占的比例, 它可以反映一个近似数的准确程度。

但是和绝对误差一样, 我们不能定出 e_r^* 的准确值, 只能估计它的范围。如果

$$|e_r^*| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \varepsilon_r^* \quad (1.1.6)$$

我们就把这个上界 ε_r^* 称做 x^* 的相对误差限。以后也把它简称为相对误差。

一个具有 n 位有效数字的近似值 x^* 的相对误差可如下估计, 由式 (1.1.3) 知

$$x_1 \cdot 10^{m-1} \leq |x^*| \leq (x_1 + 1) \cdot 10^{m-1} \quad (1.1.7)$$

所以

$$|e_r^*| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{x_1 \cdot 10^{m-1}} = \frac{1}{2x_1} \cdot 10^{-(n-1)} \quad (1.1.8)$$

但反过来, 我们不能从不等式 (1.1.8) 推出 x^* 一定具有 n 位有效数字。例如: $A = \sin 29^\circ 20' = 0.4900$, 设其近似值 $\alpha = 0.484$, 其相对误差为

$$\frac{0.4900-0.484}{0.434}=0.012397<0.0125=\frac{1}{2 \times 4 \times 10}$$

我们不能由此推出 a 有两位有效数字, 这是因为

$$A-a=0.4900-0.484=0.0060>0.005$$

由此可知近似值 a 并不具备两位有效数字。

§ 1.2 和、差、积、商的误差估计

(一) 和、差的误差估计

设 x 、 y 的近似值为 x^* 、 y^* , 则有

$$(x \pm y) - (x^* \pm y^*) = (x - x^*) \pm (y - y^*) \quad (1.2.1)$$

$$|(x \pm y) - (x^* \pm y^*)| \leq |x - x^*| + |y - y^*| \quad (1.2.2)$$

即和或差的绝对误差限不超过各项绝对误差限之和。这个结论对于任意多个数之和也是正确的。

至于相对误差, 对和与差要分别讨论如下, 这里再设 x^* 、 $y^* > 0$, 则和的相对误差有如下估计:

$$\begin{aligned} & \frac{(x+y)-(x^*+y^*)}{x^*+y^*} \\ &= \frac{x-x^*}{x^*} \cdot \frac{x^*}{x^*+y^*} + \frac{y-y^*}{y^*} \cdot \frac{y^*}{x^*+y^*} \quad (1.2.3) \end{aligned}$$

不妨设 x^* 为相加两项中具有最大相对误差的一项, 则有

$$\begin{aligned} & \left| \frac{(x+y)-(x^*+y^*)}{x^*+y^*} \right| \leq \left| \frac{x-x^*}{x^*} \right| \\ & \times \left(\frac{x^*}{x^*+y^*} + \frac{y^*}{x^*+y^*} \right) = \left| \frac{x-x^*}{x^*} \right| \quad (1.2.4) \end{aligned}$$

这就是说, 和的相对误差限不超过相加各项中最不准确的一项的相对误差限。这个结论对于任意多个数之和也是正确的。

差的相对误差为

$$\frac{(x-y)-(x^*-y^*)}{x^*-y^*} = \frac{x-x^*}{x^*} \cdot \frac{x^*}{x^*-y^*} - \frac{y-y^*}{y^*} \cdot \frac{y^*}{x^*-y^*} \quad (1.2.5)$$

由此可见，当 $x^* \gg y^*$ 时， $\frac{y^*}{x^*-y^*}$ 很小，上式右边第二项可以忽略不计，此时有

$$\left| \frac{(x-y)-(x^*-y^*)}{x^*-y^*} \right| \approx \left| \frac{x-x^*}{x^*} \right| \quad (1.2.6)$$

即被减数和减数相差很大时，其中大数的相对误差起决定性的作用。当 x^* 与 y^* 相差不多时，由 (1.2.5) 式可知 x^*-y^* 的相对误差可能很大，有效数字的位数就可能大大减少。例如 $13.5846-13.5839=0.0007$ ，因为减数和被减数的相对误差不大于 0.5×10^{-5} ，而它们的差的相对误差可能不小于 0.5×10^{-5} ，这样在这个小的差数中，可能连一个有效数字都没有。因此在计算中应尽量设法避免两个相差很小的数相减。如果遇到这种情况，或变换计算公式以防止这类情况出现，或对 x^* 和 y^* 多保留几位有效数字进行运算。例如计算 $y = 2 - \sqrt{4-x}$ ，当 x 很小时，计算式可改写成如下形式：

$$y = \frac{x}{2 + \sqrt{4-x}}$$

后面这个计算公式虽然比较复杂一些，不过当 x 很小时，用原式计算要损失几位有效数字，必须多保留几位有效数字才能保证计算结果的准确程度，用后面公式计算就不会发生这种问题。

(二) 积、商的误差估计

我们不妨设 x^* 、 y^* 均为正数，任何一数 x^* 的绝对误差可记为 $x - x^* = dx^*$ ，相对误差可记为 $\frac{x - x^*}{x^*} = \frac{dx^*}{x^*} = d \ln x^*$ 。则得到乘积和商的绝对误差分别为

$$d(x^* y^*) = x^* dy^* + y^* dx^* \quad (1.2.7)$$

及
$$d\left(\frac{x^*}{y^*}\right) = \frac{y^* dx^* - x^* dy^*}{y^{*2}} \quad (1.2.8)$$

乘积和商的相对误差分别为

$$d \ln(x^* y^*) = d(\ln x^* + \ln y^*) = \frac{dx^*}{x^*} + \frac{dy^*}{y^*} \quad (1.2.9)$$

及
$$\begin{aligned} d \ln \frac{x^*}{y^*} &= d(\ln x^* - \ln y^*) \\ &= \frac{dx^*}{x^*} - \frac{dy^*}{y^*} \end{aligned} \quad (1.2.10)$$

由式 (1.2.9) 与 (1.2.10) 我们可以得出结论：积（或商）的相对误差限不超过参与运算的两数的相对误差限之和。

另外需要注意的是，由式 (1.2.8) 可以看出，当 y^* 很小时，商的绝对误差就会很大，在计算时应注意避免这种情况出现。

应当指出，上述关于和、差、积、商运算误差限的估计法则，是按最坏的可能情况推出的，因而是十分保守的估计。一个计算方案的完成，往往需要做大量的四则运算，如果我们对计算的每一步都按上述法则进行估计，势必需要过多地保留数据的位数，这不仅费时费力，也是不必要的。事实上出现这种最坏的情况可能性很小，因此在实际计算时，为了保证结果的精确度，只需视计算量的大小，多取一至二位有效

数字进行运算即可。对于这方面的问题，在有关计算误差的概率估计的文献中已有很多论述，由于这已超出本书所讨论的要求，这里就不介绍了。

习 题 一

1. 证明如果近似数的相对误差限小于 $\frac{1}{2(x_1 + 1)} \cdot \frac{1}{10^{n-1}}$ ，那末，这个数便准确到 n 位有效数字，其中 x_1 是第一位有效数字。
2. 下列各数准确到末位数字，试求其和，并估出和的绝对误差。
136.421, 28.3, 231, 68.243, 17.482。
3. 计算 $t = \sqrt{10} - \pi$ 的值准确到五位有效数字。