数值计算方法

SHU ZHI
JI SHUAN FANG FA

天津科学技术出版社

数值计算方法

主　编　李树钰

副主编　穆勤科

编　者　金　霁　杨子琪

侯乃戌　倪可道

陈松之　周式裁

沈宗宣　于文恺

齐　晋

天津科学技术出版社

津新登字(90)003号

责任编辑:张炳祥

数值计算方法

主　编　李树钰

副主编　穆勤科

编　者　金　霁　杨子琪
侯乃戍　倪可道
陈松之　周式裁
沈宗宣　于文恺
齐　鲁

*

天津科学技术出版社出版
天津市张自忠路189号　邮编300020
天津新华印刷二厂印刷
新华书店天津发行所发行

*

开本850×1168毫米 1/32 印张10.5 字数263 000
1991年10月第1版
1994年9月第2版
1994年9月第2次印刷
印数:4 101—9 600

ISBN 7-5308-1022-7
O·50　定价:7.50元

内 容 简 介

本书详细地叙述了在计算机上常用的数值计算方法，如数字方程求解、插值计算、数值积分与数值微分、线性代数方程组的直接法与迭代法、矩阵的特征值与特征向量的计算、曲线的拟合与函数逼近等。

本书偏重于实际应用，对常用的方法给出了框图与程序，对每章的习题做了详细的解答，同时也给出了选作题的答案，可供科研及工程技术人员学习时参考。

前　言

《数值计算方法》是高等工科院校或理科非计算数学专业的重要课程。本书注重于计算机上常用的数值计算方法的构造和使用，培养学生运用数值计算基本知识的技能，提高从事数值计算的能力。

本书偏重于工程技术和科研方面的实际应用，对计算方法的实例不仅给出框图，而且配有在 IBM-PC 机上通过的具体程序。

全书共九章，包括绪论、数字方程的求解、插值计算、数值积分与数值微分、常微分方程的数值解法、解线性代数方程组的直接法和迭代法、矩阵的特征值与特征向量计算、曲线的拟合和函数逼近等。在教学中根据学时的多少可取舍部分章节：一般地讲，45～50 学时可以讲授到第七章，60～70 学时可讲授全书的内容。其中，带“*”的部分是根据专业的需要讲解，上机实习可订为 16～20 学时。

本书可作为高等院校工科各专业的教材，亦可作为工科院校各专业的研究生教材；对于理科非计算数学专业及经济管理领域的各专业，本书也是一本理想的教材；而对于工程技术人员更是一本必要的参考书。

本书是在九所高校多年来教学实践的基础上编写而成的。在编排上尽量由浅入深，在取材上力求精练、实用，并且配有各种类型例题，书后有每章的详细习题解答和选作题，以供读者学习时参考。

本书由天津大学、河北工学院、内蒙古工学院、唐山工程技术学院、天津理工学院、天津纺织工学院、河北机电学院、天津轻工业学院及天津大学分校等主讲《数值计算方法》的教师共同编写。参加编写的人员分工为：第一章李树钰，第二章陈松之，第三章杨子琪，第四章周式裁，第五章侯乃戌，第六章穆勤科，第七章倪可道，第八章金霁，

第九章沈宗宣；第三章习题解答由齐鲁所做，第九章习题解答由于文恺所做，其余各章的习题解答由每章的作者所做。

本书由李树钰任主编，穆勤科任副主编。

编　者

1993年4月

目　　录

第一章　绪　　论

第一节　引　　言

科学技术领域里的许多部门，象天文学、测量学、系统工程学、弹道学、物理学等学科中所遇到的有关数学问题，人们通常希望经过数的运算后，能得到一个比较准确的数值结果。数值计算方法就是根据实际问题的要求，计算工具的性能，选择良好的算法，比较高的效率，得出有用的结果。

电子计算机问世以后，很快就成为数值计算方法的主要工具；而计算机的不断发展又为数值计算方法的不断完善铺平了道路。由于计算机具有计算速度快、计算准确、逻辑判断能力强、自动化程度高等特点，我们需研究适合于计算机使用的数值计算方法。因此，数值计算方法是研究用计算机解决数学问题的数值计算及其有关理论，它的内容包括数字方程的求解，插值计算，数值积分与数值微分，线性代数方程组的解法，矩阵的特征值与特征向量计算，常微分方程的数值解法，曲线拟合与函数逼近等。

数值计算方法是内容十分丰富，思想方法深刻，而又有着自身理论体系的数学分支。它所涉及的知识面很广，不仅需要高等数学知识，而且还需要线性代数、常微分方程及算法语言等多方面的知识。

数值计算方法又是一门以电子计算机为先进计算工具的实用性很强的数学课程。我们常常将复杂的数学模型作一些简化，得出近似公式，然后再把这些近似公式编制成计算机所能接受的计算程序。所以，我们为计算机研究的算法，不仅仅是单纯的数学公式，而且是解题方案的准确而完整的描述。

下面举出两个常用算法来说明算法的基本特征。

一、多项式求值问题

假设对给定的 x，求下面多项式的值。

$$P(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_nx^n \tag{1·1·1}$$

一种算法是直接逐项求和。若是多项式的项数少，还能计算；若是多项式的项数较多，显然计算量是很大的，即使加减法运算次数不作统计，只乘法运算次数就需 $2n$ 次。

另一种算法是采用秦九韶法。秦九韶法是将多项式(1·1·1)改写为以下形式：

$P(x)=(\cdots((a_nx+a_{n-1})x+a_{n-2})x+\cdots+a_1)x+a_0$ 来计算。

秦九韶法是通过一次式的反复计算(乘和加)，逐步得到高次多项式。即将一个 n 次多项式的求值问题归结为重复计算 n 个一次多项式 $(a_{i-1}x+a_i)$ 来实现。这种重复在计算机上计算是很简单的。

比较一下这两种算法，以秦九韶法为优。它不但逻辑结构简单，而且计算量也少了一半。

二、线性代数方程组求解问题

我们知道，解线性代数方程组有许多种算法，比如用高斯消去法(参见第六章)、迭代法(参见第七章)等，这些算法都容易编制程序，计算出的结果也比较理想。若采用克莱姆(Cramer)法则求解下面的线性代数方程组：

$$\begin{cases}a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n=b_1\\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n=b_2\\ \cdots\quad\cdots\\ a_{n1}x_1+a_{n2}x_2+\cdots+a_{nn}x_n=b_n\end{cases}$$

$x_k=D_k/D,k=1,2,\cdots n$

其中

$$D=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

而 D_k 是把 D 中第 k 列 $(a_{1k},a_{2k},\cdots a_{nk})^T$ 转换为 $(b_1,b_2,\cdots b_n)^T$ 后的行列式。这需计算 $n+1$ 个行列式和 n 次除法，而每个行列式包含 $n!$ 个乘积，每个乘积需做 $n-1$ 次乘法，因此，总的计算量为 $(n+1)!(n-1)+n$ 次乘除法；当 $n=20$ 时，需做 9.8×10^{20} 次乘除法，就是在每秒钟能做一亿次乘除法的国产银河 I 计算机上，也需 30 多万年。若在国产银河 I 计算机上，每秒能运行 10 亿次也需 3 万年，而美国的计算机，在每秒运行 100 亿次尚需 3 千年，可见克莱姆法则在计算机上并不适用。通过这个例子也说明了选择构造一个好的算法是多么的重要。

第二节　绝对误差　相对误差

数是来源于观察和测量，或是经过一定数据运算的结果。任何的观测都不可能是绝对准确的，而人和计算机也是进行有限位小数的运算，运算的每一步必须将数抹尾凑整，因此，计算也不可能准确；另外，计算的公式等也是近似的。由此可见，我们遇到的数和运算着的数，一般说来都是近似的。近似是正常的，产生误差也是不可避免的。

一、误差的来源

一个物理量的真实值和我们算出的值往往是不相等的，它们之间的差称为误差。引起误差的来源概括为以下四种。

1. 模型误差　用数学模型描述实际问题时，一般只抓住主要因

素，忽略次要因素，因此，数学模型本身就包含着误差，这种误差叫做模型误差。

2. 观测误差　数学问题中包含着若干原始数据，一般是通过实验测定或观测得到的，它们与其真实值之间总有误差，这种误差叫做观测误差。

3. 截断误差　实际计算只能用有限次运算来完成，理论上的准确值往往要求用无限的过程才能求出，而这是根本不可能做到的。所以，必须将无限过程加工成有限过程，由此产生的误差叫做截断误差。

例如，对一切实数 x，都有

$$e^x=1+x+\frac{x^2}{2\,!}+\cdots+\frac{1}{n\,!}x^n+\cdots$$

用计算机求值时，我们不能求出无穷多项的和，只能求出有限项的和。

$$S_n(x)=1+x+\frac{x^2}{2\,!}+\cdots+\frac{x^n}{n\,!}$$

那么，$S_n(x)$作为 e^x 的值自然有误差，其截断误差为

$$e^x-S_n(x)=\frac{x^{n+1}}{(n+1)\,!}e^{\theta x},0<\theta<1$$

4. 舍入误差　计算机的字长位数是一定的，在计算时只能对有限位数进行运算，对有些位数很多，甚至是无穷小数，必然要抹尾凑整，而由此产生的误差叫做舍入误差。

例如，1.732 代替 $\sqrt{3}$，0.142857142 舍入成 0.14286 代替$\frac{1}{7}$。

我们了解误差的来源是对数值计算有帮助的，但是在数值计算方法中主要讨论的是截断误差和舍入误差。

二、绝对误差与误差限

假设某一数的准确值为 x，x^* 为 x 的一个近似值，我们定义

$$e^*=x^*-x$$

为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。

误差 e^* 可正可负，当误差为正时，近似值偏大，叫做“强近值”；当误差为负时，近似值偏小，叫做“弱近似值”。

通常准确值 x 是不知道的，所以，误差 e^* 的准确值也求不出来，但根据具体测量或计算的情况估计误差的绝对值不能超过某个正数 ε^*，使不等式

$$|x^*-x|\leqslant\varepsilon^*$$

成立的尽可能小的 ε^*。我们定义 ε^* 叫做近似值 x^* 的绝对误差限，简称误差限。

例如，真空中光速 c 的最好近似值是

$$c^*=2.997925\times10^{10}\text{厘米/秒}$$

其误差限为

$$\varepsilon^*=0.000001\times10^{10}\text{厘米/秒}$$

通常记为

$$c=(2.997925\pm0.000001)\times10^{10}\text{厘米/秒}$$

绝对误差限的概念比绝对误差的概念来得确切，因此，进行误差分析时，常常使用误差限的概念，能决定出近似数的误差限是很重要的。

三、相对误差与相对误差限

绝对误差不足以刻划近似数的精度程度。例如，一根轴的设计要求长度是 120 毫米，而加工后量得为 120.03 毫米，其绝对误差为

$$e^*=120.03-120=0.03(\text{毫米})$$

又如一个键销的设计要求长度是 12 毫米，而加工后量得为 12.03 毫米，其绝对误差为

$$e^*=12.03-12=0.03(\text{毫米})$$

从轴和键销的误差来看都是 0.03 毫米，显然，轴长的精度要比键销的精度准确得多。可见，要决定测量的准确度，除了要看绝对误差的

大小之外，还应注意到被测量物本身的大小，这就引出相对误差的概念。

我们定义近似值的误差 e^* 与准确值 x 的比，即

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

为近似值 x^* 的相对误差。由于 x 的真值是未知的，通常取 $e_r^* = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$，作为 x^* 的相对误差。

和绝对误差的道理一样，我们不能算出 e_r^* 的准确值，只能估计出相对误差的上界，如果存在 $\varepsilon_r^* > 0$，使不等式

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

成立的尽可能小的 ε_r^*，我们称这个上界 ε_r^* 为 x^* 的相对误差限。

应当指出，相对误差是一个不名数(或者说无量纲的量)。例如，量一百斤重的东西，发生一斤的误差，和量一百尺长的东西，发生一尺长的误差，二者的相对误差是一样的，但它们的绝对误差却是不同的。一个是一斤，一个是一尺，可见绝对误差是一个名数，相对误差是一个不名数。

在实际应用中，由于相对误差是个小数，它起码是百分之几，因此，常用百分号%$(1\% = \frac{1}{100})$来记相对误差；有时甚至用‰$(1‰ = \frac{1}{1000})$来记它。

例如，真空中光速 c 的相对误差限为

$$\varepsilon_r^* = \frac{0.000001}{2.997925} \approx 0.0000003 = 0.0003‰$$

第三节 有效数字

当准确值 x 有很多位数字时，常常按照“四舍五入”的原则取前

几位数字作为 x 的近似值 x^*。例如，$x=\sqrt{3}=1.732050808\cdots$，取前六位数字得

$$x^*=1.73205$$

其误差为 $0.000000808\cdots$，误差限为 $0.000005=\frac{1}{2}\times10^{-5}$，此时，我们称 x^* 准确到小数后第五位，并称由此算起的前六位数字为 x^* 的有效数字。

如果近似值 x^* 的误差限是它的某一位的半个单位，我们就说它"准确"到这一位，并且从这一位起直到前面第一个非零数字为止的所有数字都称为 x^* 的有效数字。x^* 有 n 位有效数字，其标准形式为

$$x^*=\pm10^m\times(a_1+a_2\times10^{-1}+\cdots+a_n\times10^{-(n-1)})\qquad(1\cdot3\cdot1)$$

其中，a_1 是 1 到 9 中的一个数字，$a_2,\cdots,a_n$ 是 0 到 9 中的一个数，m 为整数，且有

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n+1}\qquad(1\cdot3\cdot2)$$

有效数字与相对误差限之间有着基本的联系。这由下面的两条定理看出。

定理 1 对形如(1・3・1)的近似数 x^*，若 x^* 具有 n 位有效数字，则其相对误差限为

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

证明 由(1・3・1)知

$$a_1\times10^m\leqslant|x^*|\leqslant(a_1+1)\times10^m$$

当 x^* 有 n 位有效数字时，

$$\varepsilon_r^*=\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{0.5\times10^{m-n+1}}{a_1\times10^m}$$

$$=\frac{1}{2a_1}\times10^{-n+1}$$

定理证完。

定理 2 对形如(1・3・1)的近似数 x^*，若 x^* 的相对误差限

$\varepsilon_r^* \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$，则 x^* 至少具有 n 位有效数字。

证明 由 $|x-x^*| = |x^*| \cdot \varepsilon_r^* \leqslant (a_1+1) \times 10^m \times \frac{1}{2(a_1+1)}$ $\times 10^{-n+1} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$

这就是说 x^* 具有 n 位有效数字。

【例 1】 按四舍五入原则取 $\frac{1}{19} = 0.052631578\cdots$ 的具有四位有效数字的近似数，并且表示为式(1·3·1)的形式。

解 按四舍五入原则得到

$$\frac{1}{19} = 0.052631578\cdots \approx 0.05263$$

所以，$\frac{1}{19}$ 具有四位有效数字的近似数为 0.05263。

表示(1·3·1)的形式为：

$0.05263 = 5.263 \times 10^{-2} = 10^{-2}(5 + 2 \times 10^{-1} + 6 \times 10^{-2} + 3 \times 10^{-3})$ 这里，从左边第一个非零数字 5 到末位数字 3 共有 $n=4$ 位数字，$m=-2$，且绝对误差满足

$$\left| \frac{1}{19} - 0.05263 \right| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-5} = \frac{1}{2} \times 10^{-2-4+1}$$

即满足式(1·3·2)，所以，0.05263 具有四位有效数字。

【例 2】 求例 1 中近似数的相对误差限。

解 0.05263 的第一位有效数字为 $a_1 = 5$，有效数字位数 $n=4$，于是由定理 1 知，0.05263 的相对误差限为

$$\begin{aligned} \varepsilon_r^* &= \frac{1}{2 \times 5} \times 10^{-(4-1)} = \frac{1}{10} \times 10^{-3} = 0.0001 \\ &= 0.01\% \end{aligned}$$

【例 3】 要使 $\frac{1}{19}$ 的近似值的相对误差限不超过 0.01%，问要取几位有效数字。

解 由定理 1 知，只需求出满足