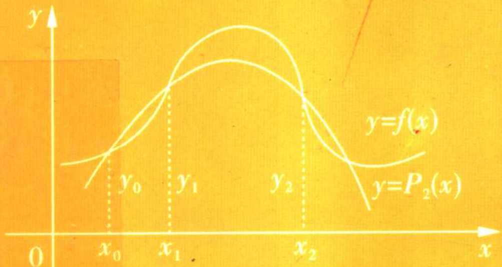
普 通 高 等 院 校 理 工 科 教 材

数值计算方法

SHU ZHI JI SUAN FANG FA

主编 石东洋



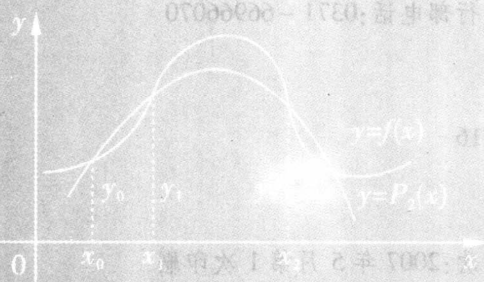
郑州大学出版社

普通高等院校理工科教材

数值计算方法

SHU ZHI JI SUAN FANG FA

主编 石东洋



郑州大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/石东洋主编.—郑州:
郑州大学出版社,2007.5
ISBN 978-7-81106-485-8

Ⅰ.数… Ⅱ.石… Ⅲ.数值计算-计算方法-高等学校-教材
Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 050144 号

郑州大学出版社出版发行
郑州市大学路 40 号　　　　邮政编码:450052
出版人:邓世平　　　　发行部电话:0371-66966070
全国新华书店经销
河南龙华印务有限公司印制
开本:710 mm×1 010 mm　　1/16
印张:18
字数:345 千字
版次:2007 年 5 月第 1 版　　印次:2007 年 5 月第 1 次印刷

书号:ISBN 978-7-81106-485-8　　定价:26.00 元

《数值计算方法》

作者名单

主　编　石东洋

副主编　王彩霞　吴景珠

　　　　　许　超　周家全

编　委　（以姓氏笔画为序）

　　　　　王彩霞　石东洋　许　超

　　　　　吴景珠　周家全

内容提要

本书的主要内容有误差理论、插值法、数据拟合、数值积分与数值微分、线性代数方程组的直接解法和迭代法、一元非线性方程的数值解法、矩阵特征值问题的计算方法和常微分方程数值解法，其中包括了作者多年来的一些教学实践经验的总结。为适应当前教学改革和课程建设的需要，在内容的取舍、组织和阐述上都进行了一些新的有益尝试。

本书既适合理工科相关专业的研究生或本、专科生作为教材使用，也可作为从事科学与工程计算的相关人员自学和进修计算方法的参考书。

前言

随着计算机科学和信息技术的进一步发展,科学计算已成为继理论研究及科学实验后的第三大科学研究工具,正在得到日益深入的应用。许多从事自然科学研究、工程技术应用及从事社会科学研究与应用领域的专业技术人员和相关人员,都把科学计算作为自己领域内的一种重要的研究手段。这就要求人们掌握一定的科学计算理论以及与应用相关的科学数值计算方法。熟练运用计算机进行科学计算已成为各领域研究人员必备的一种重要的基本素质和基本技能。

本书是作者在总结长期的教学与科研经验、参阅众多国内外流行的相关书籍和材料的基础上精心组织与编写而成的。为适应我国当前的教学改革和精品课程建设需要,本书在内容的挑选、结构安排和阐述上进行了一些新的有益的尝试。本书叙述通俗易懂,用便于理解的语言把较为抽象的内容予以说明;结构编排由浅入深,注重归纳总结规律,力求简洁统一、重点突出,使读者不局限在一些具体的细节上,而是重在把握数值计算方法的实质,从全局上把握各种数值算法的精髓。特别是注重了对常用的数值计算方法的构造、应用及其有关性态地介绍、分析和比较,例如,方法的稳定性、收敛性、适用范围与优缺点等,有特色地介绍了在工程与科学计算中常用的数值计算方法,如函数插值、数据拟合、数值积分与数值微分、线性代数方程组的直接解法和迭代法、一元非线性方程数值解法、矩阵特征值问题数值方法和常微分方程数值解法等。书中各章节具有相对的独立性,不同专业和学科的研究人员、自学者及相关人员可根据实际需要有选择地进行学习和阅读(如节序号有 * 标记的内容为选修)。书中精选的例题及典型解法、各章节后精选的习题及所附的参考答案对读者深入的理解和掌握本书内容有很好的辅导作用。书后配备的四套模拟试题可供读者自测使用。

本书编写的过程中，得到了国内外许多同行的关心和帮助以及郑州大学数学系、郑州大学出版社的大力支持，信阳师范学院数学系的秦玉华教授对本书提出了许多宝贵的意见和建议，在此一并表示衷心的感谢。

由于编者水平有限，书中难免有疏漏和不妥之处，恳请广大读者和有关专家批评指正。

石东洋

2007 年 4 月

目　录
Contents

第一章　误差

第二章　插值法

第三章　数据拟合

第四章　数值积分与数值微分

第五章 线性代数方程组的直接解法

第六章 解线性代数方程组的迭代法

第七章 一元非线性方程的数值解法

第八章 矩阵特征值问题的计算方法

第九章 常微分方程数值解法

第一章　误　差

数值计算方法主要包括一些求解科学研究和工程技术领域中常见的各种数学问题基本的、常用的计算方法. 这些计算方法所给出的答案一般是所求问题真解的某些近似值,所以必须了解并估计近似值与真解之间的差异,即误差. 由于进行科学计算的主要工具是计算机,因此,还应当了解在电子计算机上如何实施数值计算,以及它与严格的数学计算的区别. 为此,本章简要介绍误差的基本理论以及算法的数值稳定性概念,为以后各章的学习做准备.

1.1　误差及有关概念

1.1.1　误差的来源

科学计算的主要过程是:对给定的实际问题建立数学模型,通过已获得的有关基本数据,建立近似数值方法,设计算法编制程序,最后上机进行数值计算得到数值结果. 其大致过程见图 1.1,由此可知误差的来源与分类主要有以下四种情况.

(一)模型误差

将实际问题转化为数学模型时,需要分析各种因素,为了使数学模型尽量简单,以便于分析或计算,往往要忽略一些次要的因素,进行合理的简化与假设. 因此,即使可求得数学模型的准确解,它与实际问题的解仍存在误差,这种误差称为**模型误差**. 简言之,模型误差是由实际问题抽象、简化描述成数学模型时引起的误差.

例如,在计算地球的体积时,最简单的方法就是将地球看作一个球体(这

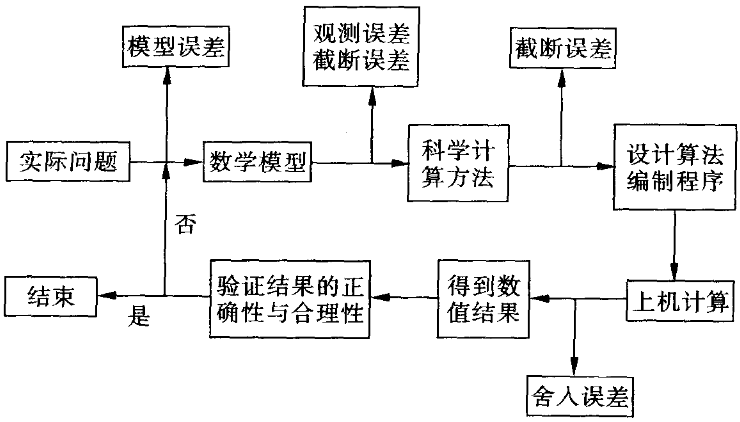


图 1.1

是一个最简单的理想模型)，可得体积为 $V=\frac{4}{3}\pi R^3$，其中，R 为地球半径，但地球是一个椭球体，在我们把它看作球体的过程中就会产生模型误差.

由于这类误差往往难于用数量表示，并且是建立数学模型过程中产生的，因此在本课程中不作深入的讨论.

(二)观测误差

在数学模型中，一般都会包含一些参变量，如温度、时间、长度、电流、电压等，这些参数需要利用相应的测量仪器观测得到，但由于仪器本身的精密度有限或某些偶然的客观因素的影响，观测(或实验)得到的数据，会存在一定的误差，这类误差叫做**观测误差**.

例如，在测量一个物体的长度时，由于任何测量工具的刻度都存在一定的局限性，世界上没有绝对精确的测量工具，所以观测到的结果只能是物体长度的一个近似值，即存在一定的误差——观测误差.

对于观测误差，通常根据测量工具或仪器本身的精度，可以确定这类误差绝对值的上限，因此在本课程中也不需要作过多的研究.

(三)截断误差(方法误差)

一般情况下，许多数学问题是难以求出精确解的，往往要通过某种近似替代简化为比较容易求解的问题，然后再求得近似解，其近似解与精确解之间的误差称为**截断误差或方法误差**. 比如，在数值计算中，常用收敛级数的前若干项来代替无穷级数的和进行计算，即放弃了级数后面的无穷多项，这样就产生了截断误差.

【例 1.1】 设函数$f(x)$在 0 的某个邻域内有任意阶导数，当$|x|$很小时，用泰勒(Taylor)多项式

$$P_n(x)=f(0)+f'(0)x+\frac{f''(0)}{2!}x^2+\frac{f'''(0)}{3!}x^3+\cdots+\frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n$$

对$f(x)$作近似计算，则相应的截断误差为

$$R_n(x)=f(x)-P_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{(n+1)},\quad \text{其中 } \xi \text{ 介于 } 0 \text{ 与 } x \text{ 之间}.$$

截断误差的大小直接影响数值计算的精度，是数值计算中必须十分重视的一类误差.

(四)舍入误差

用计算机进行数值计算时，由于计算机字长有限，原始数据的输入及计算过程中都可能产生误差，这样产生的误差叫做**舍入误差**. 事实上，无论是利用计算机、计算器计算还是笔算，都只能用有限位小数来代替无穷小数或用位数较少的小数来代替位数较多的有限小数.

【例 1.2】 用 1.732 近似代替$\sqrt{3}$，产生的误差

$$R=\sqrt{3}-1.732=0.000\,050\,807\cdots$$

就是舍入误差.

用 3.141 59 近似代替 π，舍入误差 $R=\pi-3.141\,59=0.000\,002\,65\cdots$.

用 2.718 28 近似代替 e，舍入误差 $R=e-2.718\,28=0.000\,001\,828\cdots$.

一般情况下，每一步运算的舍入误差是微不足道的，但是经过包含有成千上万次运算的计算过程的传播和积累，舍入误差可能会对计算结果产生很大的影响. 甚至在某些情况下，一次运算产生的舍入误差就可能大大改变计算结果. 所以，在进行数值计算时，对舍入误差应予以足够的重视.

1.1.2 绝对误差和绝对误差限

定义 1.1 假设某一量的准确值为 x，近似值为 x^*，则 x 与 x^* 之差叫做近似值 x^* 的**绝对误差**(**简称误差**)，记为 $\varepsilon(x)$，即

$$\varepsilon(x)=x-x^* \tag{1.1.1}$$

$|\varepsilon(x)|$的大小在一定程度上标志着 x^* 的精确度. 一般地，在同一量的不同近似值中，$|\varepsilon(x)|$越小，x^* 的精确度越高. 当$|\varepsilon(x)|$较小时，由微分和增量的关系知 x^* 的绝对误差 $\varepsilon(x)\approx \mathrm{d}\,x$，因此可以利用微分估计误差.

由于准确值 x 一般不能得到，则误差 $\varepsilon(x)$ 的准确值也无法求得，但在实际测量或计算时，可根据具体情况事先估计出它的大小范围. 由此，我们给出

绝对误差限的概念.

定义 1.2 假设某一量的准确值 x 的近似值为 x^*，若存在一个适当小的正数 ε^*，使

$$|\varepsilon(x)| = |x - x^*| \leqslant \varepsilon^* \tag{1.1.2}$$

称 ε^* 为近似值 x^* 的**绝对误差限**，即为误差绝对值的"上界"，简称为近似值为 x^* 的**误差限**. 显然可有

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

有时也用

$$x = x^* \pm \varepsilon^* \tag{1.1.3}$$

表示近似值的精度或准确值所的在范围.

【**例** 1.3】 设 $x = \dfrac{7}{9} = 0.777\,7\cdots$，取 $x^* = 0.778$，则

$$|\varepsilon(x)| = |x - x^*| = 0.000\,222\cdots < 0.000\,5$$

可以估计 x^* 的绝对误差限为 0.000 5.

在实际测量或计算中，绝对误差限一般是有量纲的，可根据具体情况估计出 ε^* 的大小范围. 例如，用毫米刻度尺测量一物体的长度 x 时，由四舍五入法可测出该长度的近似值 x^*，显然 $|x - x^*| \leqslant 0.5$ mm，即绝对误差限 ε^* 为 0.5 mm；如果测得的长度为 25 mm，则有 $|x - 25| \leqslant 0.5$ mm. 从这个不等式并不能确定准确长度 x 是多少，但是可以确定 24.5 mm $\leqslant x \leqslant$ 25.5 mm，即 x 位于区间[24.5,25.5]上.

误差限具有可确定性和不唯一性，因此在估计计算结果的误差限 ε^* 时，应尽量地将 ε^* 估计的小一些，对于同一量的近似值中，误差限 ε^* 越小相应的近似值就越精确.

对不同大小的量，有时单凭近似值的绝对误差的大小还不能判定其近似程度的好坏.

【**例** 1.4】 设 $x = 100 \pm 1$，则 $x^* = 99$，$|\varepsilon(x)| = 1$；

$y = 10\,000 \pm 10$，则 $y^* = 9\,990$，$|\varepsilon(y)| = 10$.

显然，后者的绝对误差是前者的 10 倍. 但是，前者平均每 1 个单位产生了 0.01 的误差，而后者每 1 个单位只产生了 0.001 的误差，可以看出，y^* 对 y 的近似程度要远高于 x^* 对 x 的近似. 由此可知，决定一个量近似值的精确度除了要看绝对误差的大小之外，还要考虑到该量本身的大小. 为此，我们引入相对误差的概念.

定义 1.3 绝对误差与准确值之比

$$\varepsilon_r(x) = \frac{\varepsilon(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x},\ x \neq 0 \tag{1.1.4}$$

称为 x^* 的**相对误差**.

在实际计算中，由于准确值 x 往往是不知道的，因此在 $|\varepsilon_r(x)|$ 较小时，通常取

$$\varepsilon_r(x)=\frac{\varepsilon(x)}{x^*}=\frac{x-x^*}{x^*} \tag{1.1.5}$$

作为 x^* 的相对误差.

相对误差有正也有负，由于 $\varepsilon(x)$ 与 x 都不能准确地求得，因此相对误差 $\varepsilon_r(x)$ 也不可能准确地得到，在实际测量或计算时，可根据具体情况估计出它的大小范围——相对误差限.

定义 1.4 假设某一量的准确值 x 的误差为 $\varepsilon(x)$，若存在一个适当小的正数 ε_r^*，使得

$$|\varepsilon_r(x)|=\frac{|\varepsilon(x)|}{|x|}\leqslant\varepsilon_r^* \tag{1.1.6}$$

则称 ε_r^* 为近似值 x^* 的**相对误差限**，即相对误差绝对值的"上界". 当 $|\varepsilon_r(x)|$ 较小时，可以用下式来计算 ε_r^*：

$$\varepsilon_r^*=\frac{\varepsilon^*}{|x^*|} \tag{1.1.7}$$

例 1.4 中 x^* 的相对误差 $\varepsilon_r(y)=\frac{1}{100}=1\%$，$y^*$ 的相对误差 $\varepsilon_r(y)=\frac{10}{10\ 000}=0.1\%$，由于 $|\varepsilon_r(x)|>|\varepsilon_r(y)|$，所以 y^* 近似 y 的程度比 x^* 近似 x 的程度要高.

一般地，在同一量或不同量的几个近似值中，相对误差限 ε_r^* 越小，x 精确度高. 相对误差和相对误差限都是无量纲的量.

1.1.3 浮点数与有效数字

(一)浮点数

在实际计算时，由于计算机的字长的限制，在计算机中数的表示和运算与理论分析时存在着较大的差异. 为了讨论数和误差在计算机中的运算过程中的变化，先给出在计算机上数的一般表示形式.

假定提供给计算机的数 x 只是有限位小数，这样，数 x 可以表示成

$$x=\pm 0.d_1d_2\cdots d_t\times 10^n=\pm 10^n\sum_{k=1}^{t}d_k10^{-k}. \tag{1.1.8}$$

其中 n 为一整数，t 为一正整数，$d_1,d_2,\cdots,d_t$ 为 0 到 9 中任一数字.

若记

$$a=\sum_{k=1}^{t}d_k10^{-k}$$