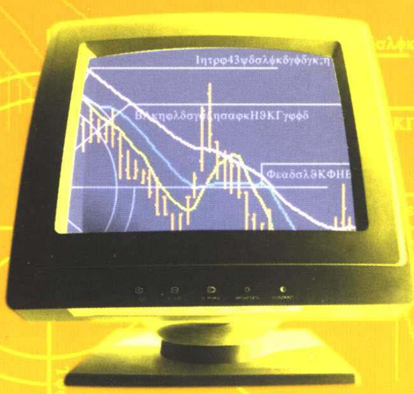
全国高等院校计算数学辅导教材

数值计算方法与上机实习指导

主编 肖筱南 编著 肖筱南 赵来军 党林立



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

全国高等院校计算数学辅导教材

数值计算方法与上机实习指导

主编 肖筱南

编著 肖筱南 赵来军 党林立

北京大学出版社

·北 京·

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法与上机实习指导/肖筱南主编. —北京:北京大学出版社,2004.9

ISBN 7-301-07855-2

Ⅰ.数… Ⅱ.肖… Ⅲ.数值计算-计算方法-高等学校-教学参考资料 Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 092689 号

书　　名: 数值计算方法与上机实习指导

著作责任者: 肖筱南　主编

责 任 编 辑: 曾琬婷

标 准 书 号: ISBN 7-301-07855-2/O・0611

出 版 发 行: 北京大学出版社

地　　址: 北京市海淀区中关村北京大学校内　100871

网　　址: http://cbs.pku.edu.cn 电子信箱: zpup@pup.pku.edu.cn

电　　话: 邮购部 62752015　发行部 62750672　理科编辑部 62752021

印 刷 者: 北京大学印刷厂

经 销 者: 新华书店

850 mm×1168 mm　32 开本　8.625 印张　225 千字

2004 年 9 月第 1 版　2004 年 9 月第 1 次印刷

印　　数: 0001—4000 册

定　　价: 15.00 元

内容简介

本书是根据教育部最新颁布的全国理工科院校“计算方法”课程教学大纲要求，为理工科各专业本科生、研究生学习“数值分析”(计算方法)编写的辅导教材，特别适合与现行教材《现代数值计算方法》(北京大学出版社，2003)配套使用. 全书共八章，每章分为四部分：第一部分“内容与算法提要”归纳简洁而鲜明、重点突出而清晰；第二部分“典型例题选讲”剖析详尽而深刻、方法独特而巧妙；第三部分“数值实习分析”指导深入而具体，程序清晰而精炼；第四部分“同步训练题萃”层次分明而综合，题型精粹而全面. 此外，本书还提供自测试卷多套，并在附录中介绍了数学软件 MATLAB 在现代数值计算中的应用. 书末附有同步训练题萃及自测试卷答案，以供读者参考.

本书是一部提高读者数值分析综合应用能力的学习指导书，读者对象为理工科院校各专业本科生和研究生(含工程硕士)，对于参加同等学力人员申请硕士学位的“数值分析”考试与工程技术人员学习“数值分析”也极具参考价值.

前　言

随着计算机技术的广泛应用和各门学科量化研究的迫切需要，科学计算已成为现代高素质人才必须具备的能力，数值计算也成为了继实验方法、理论方法之后的科学研究的第三种重要方法．近年来，在高等教育中如何培养学生的科学计算能力日益备受关注，数值分析(计算方法)已成为现代高等教育的重要内容，成为大多数理工科院校本科生与硕士研究生的必修课程．为了更好地帮助读者在学习“计算方法”时能深入理解与掌握这门课程的基本理论，开拓数学思维，灵活运用它的思想方法，不断提高综合分析与解决问题的能力，我们根据教育部最新颁布的全国理工科院校“计算方法”课程教学大纲的要求并在总结多年教学经验的基础上，几经易稿，编写了本指导书．

本书按北京大学出版社 2003 年 7 月出版的《现代数值计算方法》教材的章节顺序编写，并与现行同类教材基本一致．本书内容包括数值计算中的误差分析，线性方程组的数值解法，非线性方程的数值解法，矩阵的特征值及特征向量的计算，插值法，最小二乘法与曲线拟合，数值微积分，常微分方程的数值解法．全书共分八章，每章由内容与算法提要、典型例题选讲、数值实习分析以及同步训练题萃四部分组成．此外，书末还提供九套数值计算自测试卷与一套数值计算上机实习自测试卷，以及数学软件 MATLAB 语言编程基础与数值计算应用实例；对同步训练与自测试卷均给出答案，以供读者参考．本书结构严谨、内容丰富、重点突出、分析深刻、条理清晰，且富有启发性，是一部将理论与实践相结合、知识与应用相结合、系统性与针对性相结合的具有较强指导性、可读性、实用性的“数值分析”辅导教材．本书不仅对理工科院校各专业本

科生、研究生和在职申请硕士学位研究生学习“数值分析”很有帮助，而且对工程技术人员学习“数值分析”也极具参考价值.

本书由肖筱南教授主编，编著者为肖筱南教授、赵来军博士和党林立博士. 在本书的编写过程中，得到了北京大学出版社的大力支持与帮助，刘勇副编审和责任编辑曾琬婷同志为本书的出版付出了辛勤劳动，在此一并表示诚挚的谢意.

限于编者水平，书中难免有错误和不妥之处，恳请读者批评指正.

编　者

2004年5月

目　　录

第一章　数值计算中的误差分析

一、内容与算法提要

本章主要讨论误差的概念与传播以及设计计算法时应注意的一些问题.误差是用来衡量数值计算方法好与坏的重要标志,为此在研究算法的同时,必须注重数值计算中的误差分析与误差的传播,并对计算结果给出合理的误差估计,从而使建立起来的算法科学有效.

1.1　数值计算方法的对象与特点

1. 研究对象

"数值计算方法"是一门与计算机应用密切结合的实用性很强的计算数学课程,它是研究各种数学问题(包括方法的构造和求解过程的理论分析)的数值解法.从利用计算机解决科学计算问题的全过程:实际问题→构造数学模型→选择数值计算方法→程序设计→上机计算求出结果,可见学习数值计算方法的重要性.而这门课程的任务就是提供在计算机上实际可行的各种高效、可靠的数值计算方法,当然这也是数值计算方法的研究对象.

2. 主要特点

数值计算方法是与计算机紧密结合、与其他学科有着密切关系的实用性很强的学科,它有着自身的研究方法与理论系统,是近代数学的一个分支学科.它既具有数学的高度抽象性与严密科学性,又具有应用的广泛性与数值试验的高度技术性.首先,它是建立在严格数学理论基础上的一门实用性很强的计算数学课程;其次,它要面向计算机,根据计算机的特点提供实际可行的且计算复

杂性好的有效算法;此外,它还应具有可靠的理论分析与数值试验,以保证计算结果达到所要求的精确度,而且还要有以下几个基本特点:采用“构造性”方法、“离散化”方法、“递推化”方法、“近似替代”方法,等等.

1.2 误差

1. 误差的来源

误差的来源是多方面的,主要来源有模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差.在数值计算中仅研究截断误差(方法误差)和舍入误差对计算结果的影响.

2. 绝对误差、相对误差和有效数字

(1) 绝对误差与绝对误差限

设某一量的精确值为 x,其近似值为 x^*,则称

$$E(x^*) = x - x^*$$

为近似值 x^* 的**绝对误差**,简称**误差**.

如果 $|E(x^*)| = |x - x^*| \leqslant \eta$,则称 η 为近似值 x^* 的**绝对误差限**.

(2) 相对误差与相对误差限

称 $E_r(x^*) = \dfrac{E(x^*)}{x} = \dfrac{x - x^*}{x}$ 为近似值 x^* 的**相对误差**.在实际中,由于精确值 x 一般无法知道,故通常取 $E_r(x^*) = \dfrac{x - x^*}{x^*}$.

如果 $|E_r(x^*)| \leqslant \delta$,则称 δ 为近似值 x^* 的**相对误差限**.

(3) 有效数字

设准确值 x 的近似值 x^* 可表示为

$$x^* = \pm (\alpha_1 \times 10^{-1} + \alpha_2 \times 10^{-2} + \cdots + \alpha_n \times 10^{-n}) \times 10^m,$$

其中 m 为整数,α_1 是 1 到 9 中的一个数字,$\alpha_2, \alpha_3, \cdots, \alpha_n$ 是 0 到 9 中的数字,如果 $|x - x^*| \leqslant \dfrac{1}{2} \times 10^{m-n}$,则称近似值 x^* 具有 n 位**有效数字**.

(4) 有效数字与相对误差的关系

定理 1 若近似数

$$x^* = \pm (\alpha_1 \times 10^{-1} + \alpha_2 \times 10^{-2} + \cdots + \alpha_n \times 10^{-n}) \times 10^m$$

具有 n 位有效数字，则其相对误差满足

$$|E_r(x^*)| \leqslant \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{-(n-1)}.$$

定理 2 若近似数

$$x^* = \pm (\alpha_1 \times 10^{-1} + \alpha_2 \times 10^{-2} + \cdots + \alpha_n \times 10^{-n}) \times 10^m$$

的相对误差满足

$$|E_r(x^*)| \leqslant \frac{1}{2(\alpha_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)},$$

则 x^* 具有 n 位有效数字.

1.3 浮点数系统

对于 $s+t+2$ 位的浮点数系(s 表示二进制阶码数值的二进制位数，t 表示尾数的二进制位数，其余两位表示阶码和尾数的符号)，机器数绝对值的范围是 $2^{-2^s} \sim 2^{2^s-1}$，实数表示的相对舍入误差限是 2^{-t}. 当数据的绝对值大于 2^{2^s-1} 时，计算机非正常停机，称为**上溢**；当非零数据的绝对值小于 2^{-2^s} 时，用机器零表示，精度损失，称为**下溢**.

1.4 数值计算的误差估计

设可微函数 $y=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 中的自变量 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 相互独立，又 $x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*$ 依次是 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的近似值，y 的近似值 $y^*=f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$，则函数值 y 的近似值 y^* 的绝对误差 $E(y^*)$ 为

$$\begin{aligned} E(y^*) &= y - y^* = f(x_1,x_2,\cdots,x_n) - f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*) \\ &\approx \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}{\partial x_i^*}(x_i - x_i^*) \end{aligned}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i^*} \cdot E(x_i^*),$$

而 y^* 的相对误差 $E_r(y^*)$ 为

$$E_r(y^*) = \frac{E(y^*)}{y^*}$$

$$\approx \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i^*}{y^*} \cdot \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i^*} \cdot E_r(x_i^*).$$

由以上两式还可得两近似数 x_1^* 与 x_2^* 的和、差、积、商的误差估计：

$$E(x_1^* \pm x_2^*) \approx E(x_1^*) \pm E(x_2^*),$$

$$E(x_1^* \cdot x_2^*) \approx x_2^* E(x_1^*) + x_1^* E(x_2^*),$$

$$E(x_1^*/x_2^*) \approx \frac{E(x_1^*)}{x_2^*} - \frac{x_1^*}{(x_2^*)^2} E(x_2^*) \quad (x_2^* \neq 0)$$

及

$$E_r(x_1^* + x_2^*) \approx \frac{x_1^*}{x_1^* + x_2^*} E_r(x_1^*) + \frac{x_2^*}{x_1^* + x_2^*} E_r(x_2^*),$$

$$E_r(x_1^* - x_2^*) \approx \frac{x_1^*}{x_1^* - x_2^*} E_r(x_1^*) - \frac{x_2^*}{x_1^* - x_2^*} E_r(x_2^*),$$

$$E_r(x_1^* \cdot x_2^*) \approx E_r(x_1^*) + E_r(x_2^*),$$

$$E_r(x_1^*/x_2^*) \approx E_r(x_1^*) - E_r(x_2^*) \quad (x_2^* \neq 0).$$

1.5 设计算法时应遵循的原则

(1) 要使用数值稳定的算法.

一般而言，在计算过程中，初始数据的误差和计算中产生的舍入误差总是存在的，在求数值解的过程中，前一步数值解的误差必然要影响到后一步数值解. 我们将运算过程中舍入误差不增长的算法称为数值**稳定的**，否则是数值不稳定的. 只有选用数值稳定的算法，才能控制舍入误差的传播.

(2) 要尽量简化计算步骤,减少运算次数.

(3) 要避免两个相近的数相减.

(4) 绝对值太小的数不宜做除数.

(5) 要合理安排运算顺序,防止大数"吃掉"小数.

一般认为,一个好的算法应是:计算量小、精度高;算法稳定;在计算过程中占用计算机的存贮单元和工作单元少.然而,在实际中上述各点有时往往不能同时兼备,而是相互制约的.因此,在实际计算时,我们应根据给定的精度要求及计算机的速度、容量等条件,选用相对较好的数值计算方法,以便得到精确可靠的结果.

二、典型例题选讲

例 1 将 3.141, 3.14, 3.15, 22/7 分别作为 π 的近似值,试确定它们各有几位有效数字,并确定其相对误差限.

分析 要确定有效数字,依有效数字的概念即可直接得出,而相应误差限可由绝对误差限除以近似值求得,也可由定理 1 的结论

$$|E_r(x^*)| \leqslant \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{1-n} \quad (\alpha_1 \text{ 为首位非零数})$$

求得,后者计算较简单.

解 记

$$x = \pi = 3.14159265\cdots,$$

$$x_1^* = 3.141, \quad x_2^* = 3.14, \quad x_3^* = 3.15, \quad x_4^* = 22/7.$$

(1) 由 $|x - x_1^*| = |\pi - 3.141| = 0.0005\cdots \leqslant 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{1-3}$,所以 x_1^* 有 3 位有效数字,进而

$$|E_r(x_1^*)| \leqslant \frac{1}{2 \times 3} \times 10^{1-3} \approx 0.0017,$$

故近似值 3.141 的相对误差限 $\delta_1 \approx 0.0017$.

(2) 由 $|x-x_2^*|=|\pi-3.14|=0.001\cdots\leqslant 0.005=\frac{1}{2}\times 10^{1-3}$，所以 x_2^* 有 3 位有效数字，进而

$$|E_r(x_2^*)|\leqslant\frac{1}{2\times 3}\times 10^{1-3}\approx 0.0017,$$

故近似值 3.14 的相对误差限 $\delta_2\approx 0.0017$.

(3) 由 $|x-x_3^*|=|\pi-3.15|=0.008\cdots\leqslant 0.05=\frac{1}{2}\times 10^{1-2}$，所以 x_3^* 有 2 位有效数字，进而

$$|E_r(x_3^*)|\leqslant\frac{1}{2\times 3}\times 10^{1-2}\approx 0.017,$$

故近似值 3.15 的相对误差限 $\delta_3\approx 0.017$.

(4) 由 $|x-x_4^*|=|\pi-22/7|=0.001\cdots\leqslant 0.005=\frac{1}{2}\times 10^{1-3}$，所以 x_4^* 有 3 位有效数字，进而

$$|E_r(x_4^*)|\leqslant\frac{1}{2\times 3}\times 10^{1-3}\approx 0.0017,$$

故近似值 22/7 的相对误差限 $\delta_4\approx 0.0017$.

注 用绝对误差限除以近似值也可求得相对误差限：

$$|E_r(x_1^*)|=|\pi-x_1^*|/|x_1^*|\approx^{①}0.00019.$$

同理可得

$$|E_r(x_2^*)|\approx 0.0005,\quad |E_r(x_3^*)|\approx 0.003,$$

$$|E_r(x_4^*)|\approx 0.0004.$$

不难看出，这些结果比用定理 1 得到的误差限均偏小.

例 2 计算 sin1.2，问要取几位有效数字才能保证相对误差限不大于 0.01%？

解 设取 n 位有效数字，由 $\sin 1.2=0.93\cdots$，故 $\alpha_1=9$. 又由

$$|E_r(x^*)|=\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{1}{2\alpha_1}\times 10^{-n+1}\leqslant 0.01\%=10^{-4},$$

① 此处“≈”意义是指：数 0.00019 作为 $|E_r(x_1^*)|$ 的一个上限.

解不等式

$$\frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{-n+1} \leqslant 10^{-4}$$

知，取 $n=4$ 即可满足要求.

例 3 设 $x=10\pm5\%$，试求函数 $f(x)=\sqrt[n]{x}$ 的相对误差限.

解 这是一个标准的一元函数误差传播问题. 由 $x=10\pm5\%$ 知近似值 $x^*=10$，绝对误差 $|E(x^*)|\leqslant5\%$. 利用

$$f'(x^*) = \frac{1}{n}(x^*)^{\frac{1}{n}-1} = \sqrt[n]{x^*} \cdot \frac{1}{nx^*},$$

得到

$$E_r(f^*) = \frac{E(f^*)}{f(x^*)} \approx \frac{f'(x^*)E(x^*)}{f(x^*)} = \frac{E(x^*)}{nx^*},$$

进而

$$|E_r(\sqrt[n]{x^*})| \approx \left|\frac{E(x^*)}{nx^*}\right| \leqslant \frac{|E(x^*)|}{nx^*} \leqslant \frac{0.005}{n},$$

即相对误差限 $\delta\approx0.005/n$.

注 从本题的求解过程可见，对于函数 $\sqrt[n]{x}$，函数值的相对误差限约是自变量相对误差限的 $\frac{1}{n}$ 倍.

例 4 取 $\sqrt{2}\approx1.4$，并采用下列算式计算 $a=(\sqrt{2}-1)^6$，问哪个算式计算的结果最好？

(1) $\frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6}$； (2) $99-70\sqrt{2}$；

(3) $(3-2\sqrt{2})^3$； (4) $\frac{1}{(3+2\sqrt{2})^3}$.

分析 由

$$a=(\sqrt{2}-1)^6=\frac{(\sqrt{2}-1)^6(\sqrt{2}+1)^6}{(\sqrt{2}+1)^6}=\frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6},$$

$$(\sqrt{2}-1)^6=[(\sqrt{2}-1)^2]^3=(3-2\sqrt{2})^3=99-70\sqrt{2},$$

$$(\sqrt{2}-1)^6=\frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6}=\frac{1}{[(\sqrt{2}+1)^2]^3}=\frac{1}{(3+2\sqrt{2})^3},$$

知(1)≡(2)≡(3)≡(4),即4个算式是恒等的.

但当取$\sqrt{2}\approx1.4$计算时,由于(2)式与(3)式都涉及两个相近数相减,会损失有效数字,而(1)式分母算式上的乘幂要比(4)式的大,所以算式(4)最好.

解 把$\sqrt{2}\approx1.4$直接代入各算式计算可得:

(1) $\dfrac{1}{(\sqrt{2}+1)^6}\approx5.2\times10^{-3}$;

(2) $99-70\sqrt{2}\approx1.0$;

(3) $(3-2\sqrt{2})^3\approx8.0\times10^{-3}$;

(4) $\dfrac{1}{(3+2\sqrt{2})^3}\approx5.1\times10^{-3}$.

而取$\sqrt{2}\approx1.4$,计算得

$$a=(\sqrt{2}-1)^6\approx4.1\times10^{-3}.$$

比较可知,用(4)式算得的结果更接近于a.

事实上,当取$\sqrt{2}\approx1.4$时,有$|\Delta x|<0.015$,再由$f(x)$的误差$|f(x+\Delta x)-f(x)|\approx|f'(1.4)||\Delta x|$也可直接估计出每个算式的误差.此处显然等式(4)的误差最小.

例5 真空中自由落体运动距离s和时间t的关系是$s=\frac{1}{2}gt^2$,并设重力加速度g是准确的,而对t的测量有±0.1秒的误差,试证:当t增加时,距离s的绝对误差增加,而相对误差却减少.

证明 由$s=\frac{1}{2}gt^2$得$\mathrm{d}s=gt\mathrm{d}t$,因而

$$E(s)\approx gtE(t),\quad E_r(s)=\frac{E(s)}{s}\approx\frac{gtE(t)}{\frac{1}{2}gt^2}=\frac{2}{t}E(t),$$

于是 $$|E(s)|\approx gt|E(t)|,\quad |E_r(s)|\approx\frac{2}{t}|E(t)|.$$

可见,当$|E(t)|$固定时,$|E(s)|$随着t的增加而增加,而$|E_r(s)|$却随着t的增加而减少.