高等学校教材

数值计算方法

第2版

李有法 李晓勤 编

高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

高等学校教材

数值计算方法

第2版

李有法　李晓勤　编

高等教育出版社

内容提要

本书按照工科数学《数值计算方法课程教学基本要求》编写，介绍了计算机上常用的数值计算方法以及有关的基本概念与理论。内容取材适当，主要方法给出程序框图(或算法)与数值例子，每章有小结与适量习题，书末还有上机习题。习题均给出答案。

本书经工科数学课程教学指导委员会评选通过，可作为工科本科各专业的数值计算方法课程的教材，也可供工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/李有法，李晓勤编．—2版．—北京：高等教育出版社，2005.4

ISBN 7-04-016327-6

Ⅰ.数...　Ⅱ.①李...②李...　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(2005)第 023863 号

策划编辑　徐　可　　**责任编辑**　蒋　青　　**封面设计**　王凌波
责任绘图　吴文信　　**版式设计**　胡志萍　　**责任校对**　金　辉
责任印制　杨　明

出版发行	高等教育出版社	**购书热线**	010-58581118
社　　址	北京市西城区德外大街4号	**免费咨询**	800-810-0598
邮政编码	100011	**网　　址**	http://www.hep.edu.cn
电　　话	010-58581000		http://www.hep.com.cn
		网上订购	http://www.landraco.com
			http://www.landraco.com.cn
经　　销	北京蓝色畅想图书发行有限公司		
印　　刷	北京未来科学技术研究所有限责任公司印刷厂		
		版　　次	1996年7月第1版
开　　本	787×960　1/16		2005年4月第2版
印　　张	11	**印　　次**	2005年4月第1次印刷
字　　数	200 000	**定　　价**	13.20元

物料号　16327-00

第 1 版前言

本书是为工科院校本科生学习数值计算方法课程而编写的，着重介绍电子计算机上常用的数值计算方法以及有关的基本概念与理论。

本书于 1994 年 8 月由工科数学课程教学指导委员会本科组评审通过，可作为工科数学数值计算方法课程的教材。

本书内容符合高等学校工科数学课程教学指导委员会制订的工科数学数值计算方法课程教学基本要求，并根据作者多年的教学与科研实践作了一些补充(见带 * 号内容)。为了便于教学与阅读，在编写此书时，力求做到叙述简明准确，内容安排由浅入深、学用一致，对主要方法给出程序框图(或算法)与数值例子，并且每章有小结与适量习题；为了培养读者使用所学方法进行科学计算的能力，在第七章中给出了一定数量的上机实习题供读者选用；各章习题与上机实习题均给出答案供读者参考。因此，本书的适用面较广，不仅可用作工科本科各专业数值计算方法课程的教材，也可作为其他学校需要学习本课程的专业和工程技术人员教学与进修的参考书。

在学习本课程前应先修高等数学、线性代数及算法语言等课程。讲授本书全部内容(带 * 号部分除外)约需 36 学时，上机实习 14 ~ 16 小时。

本书经天津大学陆君良教授和浙江大学应用数学系及蔡燧林教授、陈道琦、宋水孝副教授审阅、推荐与帮助. 在此，谨致以诚挚的谢意。

限于水平，书中缺点和错误一定不少，欢迎批评指出。

编　者

1994 年 10 月

第2版前言

本书出版后，得到了许多院校和任课老师的大力支持，在教学中越来越广泛地使用，并对书中存在的问题提出了不少宝贵意见，谨在此深表谢意。本书修订时，我们在认真考虑各种意见和建议后，在保持原书结构、风格与特点基础上，作了如下修改与补充：

（1）针对将16开本改为32开本之需要，做了必要的修改；

（2）对部分文字与论述(或论证)作了少量修改；

（3）在不影响教学学时与篇幅的前提下，为便于应用，少量补充了一些内容。

本书修改工作，由原作者与浙江大学城市学院现代教育技术中心李晓勤共同完成。

编　者

2004年7月

目　　录

绪　论

在科学研究与工程技术中，经常会遇到数学模型的求解问题. 然而在许多情况下，要获得模型问题的准确解往往是十分困难的，甚至是不可能的. 因此，研究各种数学问题的近似解法非常必要.

数值计算方法又称计算方法或数值分析，是一门与计算机应用密切结合的实用性很强的数学课程，它专门研究各种数学问题的一类近似解法——数值方法，即从一组原始数据(如模型中的某些参数)出发，按照确定的运算规则进行有限步运算，最终获得数学问题数值形式的满足精度要求的近似解.

数值计算方法提供的算法(包括计算公式与整个计算方案、计算过程)具有下列特点：

1. 面向计算机，根据计算机的特点设计可行的算法. 即在算法中，只能包括计算机能直接处理的加、减、乘、除运算与逻辑运算，调用计算机的内部函数.

2. 有可靠的理论依据(因此,需进行必要的理论分析,例如误差分析、收敛性分析、数值稳定性分析等)以确保所得结果在理论上能任意逼近准确值，在实际计算时能获得达到精度要求的近似值.

3. 高效率. 也就是说，所提供的算法还应具有计算量小(这不仅使计算速度快,而且使误差积累小)，需要存储的原始数据与需要记录的中间结果少(可少占用计算机的存储单元与工作单元)，计算过程简单、规律性强(使程序易编,易在计算机上实现)等优点.

因此，数值计算方法既重视与方法有关的理论，又重视方法的实际应用，内容相当丰富，不能片面地将它理解为各种数值方法的简单罗列或“标准”程序的介绍. 读者在学习中必须注意理解方法的设计原理与处理问题的技巧，重视有关的基本概念与理论，重视误差分析与收敛性、数值稳定性的讨论，认真完成一定数量的理论分析题与计算练习题(包括上机实习题)，注重利用计算机进行科学计算能力的培养.

由于数值计算方法课程涉及面较宽，包括了微积分、线性代数、常微分方程等数学问题的数值方法. 读者只有掌握这几门课程的基本内容，才能学好这一课程.

第1章 误 差

有人认为，用先进的计算工具(例如计算器、计算机等)进行计算，所得结果一定可靠，没有必要对误差进行分析研究．事实如何？请看下列例子．

例 1 $y=\arctan 5\,430-\arctan 5\,429$ 的准确值为 $0.000\,000\,033\,921\,91\cdots$．但是，若用具有舍入功能的八位计算器，则会直接按下面过程计算

$$y=1.570\,612\,2-1.570\,612\,1=0.000\,000\,1$$

所得近似值很不可靠．

例 2 积分

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

的值必定落在区间[0,1]中，而且随着 n 的增大而减小．用分部积分法易得递推关系式

$$I_n=1-nI_{n-1} \qquad (n=1,\ 2,\ \cdots) \tag{1.1}$$

若在尾数八位的浮点计算机上先算出 $I_0=1-\mathrm{e}^{-1}$的近似值，然后利用递推式(1.1)依次算出 I_1，I_2，I_3，…的近似值，所得结果见表 1-1．I_{12}的近似值超过了 I_0 的近似值，显然是错误的．此后，随着 n 的增大，错误越来越严重．

表 1-1

n	I_n 近似值	n	I_n 近似值
0	0.632 120 56	8	0.100 979 20
1	0.367 879 44	9	0.091 187 200
2	0.264 241 12	10	0.088 128 000
3	0.207 276 64	11	0.030 592 000
4	0.170 893 44	12	0.632 896 00
5	0.145 532 80	13	-7.227 648 0
6	0.126 803 20	14	102.187 07
7	0.112 377 60	⋮	⋮

例 3 一元二次方程

$$x^2+(\alpha+\beta)x+10^9=0$$

(其中 $\alpha=-10^9,\beta=-1$)有两个互异实根

$$x_1=10^9,\quad x_2=1$$

但是，若直接引用求根公式 $x_{1,2}=\dfrac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$ 在尾数八位的浮点计算机上进行计算，则得

$$x_1=10^9,\quad x_2=0$$

其中一个根是明显错误的.

在以上各例中，虽然都使用了先进的计算工具及正确无误的公式进行计算，却都得到了错误的结果. 要找出发生这种情况的原因，采取相应措施确保计算结果的可靠性，就必须对误差进行分析研究.

§1　误差的来源

考察用计算机解决科学计算问题时所经历的几个环节(如图 1－1 所示)，就不难发现，其中每一步都可能产生误差.

首先，数学模型是通过对实际问题进行抽象与简化得到的，它与实际问题之间有误差. 数学模型与实际问题之间出现的这种误差称为**模型误差**. 同时，数学模型中往往还含有一些由观测得到的参量，例如温度、时间、电压等等，显然也有误差，这种由观测产生的误差称为**观测误差**或**参量误差**.

实际问题 → 建立数学模型 → 确定数值计算方法 → 编制程序上机算出结果

图 1－1

其次，根据实际问题建立的数学模型，在许多情况下很难得到准确解，这就需要选用适当的数值计算方法求其近似解. 由数值计算方法所得到的近似解与实际问题准确解之间出现的这种误差，称为**截断误差**或**方法误差**. 例如，若将 $\sin x$ 展开成 x 的幂级数

$$\sin x=x-\frac{1}{3!}x^3+\frac{1}{5!}x^5-\frac{1}{7!}x^7+\cdots$$

并用级数的前三项计算 $\sin x$ 的近似值，即取

$$\sin x\approx x-\frac{1}{3!}x^3+\frac{1}{5!}x^5\overset{(记)}{=\!=}S_5(x)$$

则截断误差是

$$R(x)=\sin x-S_5(x)=-\frac{1}{7!}x^7+\frac{1}{9!}x^9-\cdots$$

最后，由于计算机字长有限，只能用有限位进行运算或取值. 因此，原始数据在计算机上表示时会产生误差，而且在计算过程中又可能产生新的误差.

这种因计算机字长有限而产生的误差称为**舍入误差**．例如，在尾数四位的浮点计算机上用 0.333 3 表示$\frac{1}{3}$，产生的误差

$$R=\frac{1}{3}-0.3333=0.000033\cdots$$

就是舍入误差．

在本书中，除了研究一些常见数学问题的数值解法外，还要研究计算结果是否满足精度要求，这就涉及所谓误差估计问题．在所有讨论过程中，我们都认为由实际问题所建立的数学模型是合理的，参量也是足够精确的，因此在误差估计中，主要讨论数值计算方法的截断误差，有时也涉及舍入误差的分析．

§2 绝对误差、相对误差与有效数字

人们常用绝对误差、相对误差或有效数字位数来描述一个近似值的准确程序．由于这些概念早为读者所熟悉，本书只作简要叙述．

2.1 绝对误差与绝对误差限

若 x^* 为准确值 x 的一个近似值，则称 $x-x^*$ 为近似值 x^* 的**绝对误差**，简称**误差**，并用 $e^*(x)$表示，即

$$e^*(x)=x-x^* \tag{1.2}$$

绝对误差虽然能清楚地表明近似值 x^* 与准确值 x 之间的差异，但是在实际问题中，往往无法知道准确值 x 是多少，从而无法计算出绝对误差的大小，只能根据具体情况估计其绝对值的上限，即求一个正数 ε^*，使得

$$|e^*(x)|=|x-x^*|\leqslant\varepsilon^* \tag{1.3}$$

满足不等式(1.3)的正数 ε^* 称为近似值 x^* 的**绝对误差限**，简称**误差限**．

在工程技术中，常将不等式(1.3)表示成

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

例如，$V=(100\pm2)$ V 表示 $V^*=100$ V 是电压 V 的一个近似值，而 2 V 则是近似值 V^* 的一个绝对误差限，即

$$|V-V^*|\leqslant 2\ \mathrm{V}$$

2.2 相对误差与相对误差限

在许多情况下，绝对误差的大小还不能刻画近似值的准确程度．例如，若有两个数

$$x_1=100\pm2,\quad x_2=10\pm1$$

则近似值 $x_1^* = 100$ 的绝对误差限 $\varepsilon^*(x_1) = 2$ 是近似值 $x_2^* = 10$ 的绝对误差限 $\varepsilon^*(x_2) = 1$ 的两倍，但是不能就此断定 x_1^* 的准确程度比 x_2^* 差，因为在 100 内差 2 显然比 10 内差 1 更准确些．这说明一个近似值的准确程度，不仅与绝对误差的大小有关，还与准确值本身的大小有关．为此，需要引入相对误差概念．

若 x 的近似值 x^* 的绝对误差为 $e^*(x)$，则称比值 $\frac{e^*(x)}{x}$ 为近似值 x^* 的**相对误差**，并用 $e_r(x)$ 表示，即

$$e_r(x) = \frac{e^*(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x} \tag{1.4}$$

由于当 $\left|\frac{e^*(x)}{x^*}\right|$ 较小时

$$\frac{e^*(x)}{x} - \frac{e^*(x)}{x^*} = \frac{e^*(x)(x^* - x)}{xx^*}$$

$$= \frac{-[e^*(x)]^2}{[x^* + e^*(x)]x^*} = \frac{-\left[\frac{e^*(x)}{x^*}\right]^2}{1 + \frac{e^*(x)}{x^*}}$$

是 $\frac{e^*(x)}{x^*}$ 的平方级，可忽略不计，而且在实际计算中准确值 x 往往是不知道的，故常将

$$e_r^*(x) = \frac{e^*(x)}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*} \tag{1.5}$$

作为近似值 x^* 的相对误差．

和绝对误差类似，要计算相对误差的真值也常常难以办到，只能对其绝对值的上限作出估计，即求正数 ε_r^*，使

$$|e_r^*(x)| = \left|\frac{e^*(x)}{x^*}\right| = \left|\frac{x - x^*}{x^*}\right| \leqslant \varepsilon_r^* \tag{1.6}$$

满足不等式(1.6)的正数 ε_r^* 称为近似值 x^* 的**相对误差限**．

相对误差与相对误差限都是无量纲数，常用百分数表示．

例如 $x_1 = 100 \pm 2$ 的近似值 $x_1^* = 100$ 的相对误差

$$|e_r^*(x_1)| = \left|\frac{e^*(x_1)}{x_1^*}\right| \leqslant \frac{2}{100} = 2\%$$

而 $x_2 = 10 \pm 1$ 的近似值 $x_2^* = 10$ 的相对误差

$$|e_r^*(x_2)| = \left|\frac{e^*(x_2)}{x_2^*}\right| \leqslant \frac{1}{10} = 10\%$$

因此，从相对误差看，近似值 x_1^* 比 x_2^* 的准确程度好得多．

2.3 有效数字与有效数字位数

在将一个近似值 x^* 写成如图 1-2 所示形式时，为了同时反映其准确程度，常常用到“有效数字”的概念.

若近似值 x^* 某位数的半个单位是它的误差限，而且从该位数字到 x^* 最左边的那个非零数字共有 n 位(见图 1-2)，那么我们把这 n 位数字都称为**有效数字**，并且说近似值 x^* 具有 n 位有效数字.

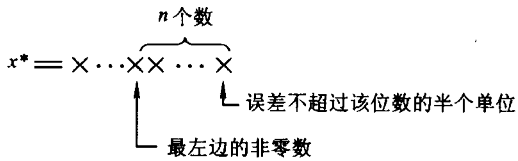

图 1-2

例如，对于 $x=\pi=3.141\ 59\cdots$，若取近似值 $x^*=3.14$，则绝对误差 $|e^*(x)|=0.001\ 59\cdots\leqslant\frac{1}{2}\times0.01$，即百分位数字 4 的半个单位$\left(指\frac{1}{2}\times0.01\right)$是 x^* 的绝对误差限，故从 x^* 最左边的非零数“3”开始到百分位数字“4”的三个数都是有效数字，近似值 x^* 具有三位有效数字.

对同一个数的近似值来说，有效数字位数越多，其绝对误差与相对误差都越小；反之，绝对误差或相对误差越小，有效数字的位数有可能越多.

§3 数值运算中误差传播规律简析

在数值运算中，参加运算的数若有误差，必然会影响到计算结果的准确性. 今以二元函数为例，通过泰勒(Taylor)展开来分析误差的传播规律.

设 x_1^*，x_2^* 分别是 x_1，x_2 的近似值. 在实际计算时，常用$y^*=f(x_1^*,x_2^*)$ 作为函数值 $y=f(x_1,x_2)$的近似值. 利用函数 $f(x_1,x_2)$在点(x_1^*,x_2^*)处的泰勒展开式，可方便地估计近似值 y^* 的绝对误差与相对误差. 例如，当 x_1^* 与 x_2^* 的误差都较小时，y^* 的绝对误差

$$\begin{aligned} y-y^* &= f(x_1,x_2)-f(x_1^*,x_2^*) \\ &\approx \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^*(x_1-x_1^*)+\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^*(x_2-x_2^*) \end{aligned}$$

即

$$e^*(y)\approx\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^*e^*(x_1)+\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^*e^*(x_2) \tag{1.7}$$

其中$\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^*$，$\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^*$分别表示偏导数$\frac{\partial f}{\partial x_1}$，$\frac{\partial f}{\partial x_2}$在点$(x_1^*, x_2^*)$处的值.

在近似等式(1.7)两边除以 y^*，即得近似值 y^* 的相对误差

$$e_r^*(y) \approx \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^* \frac{x_1^*}{y^*} e_r^*(x_1) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^* \frac{x_2^*}{y^*} e_r^*(x_2) \tag{1.8}$$

近似等式(1.7)，(1.8)分别给出了二元函数绝对误差与相对误差的传播规律. 用类似方法，可分析一般函数的误差传播规律，并得到类似的估计式.

例 4 测得圆环(图 1－3)外径 $D_1 = (10 \pm 0.05)$ cm，内径 $D_2 = (5 \pm 0.1)$ cm，则其面积 $S = \frac{\pi}{4}(D_1^2 - D_2^2)$的近似值为

$$S^* = \frac{\pi}{4}[(D_1^*)^2 - (D_2^*)^2]$$
$$= \frac{\pi}{4}(10^2 - 5^2) = \frac{75}{4}\pi \approx 58.905\ (\text{cm}^2)$$

由近似等式(1.7)知，S^* 的绝对误差

$$e^*(S) \approx \frac{\pi}{2} D_1^* e^*(D_1) - \frac{\pi}{2} D_2^* e^*(D_2)$$

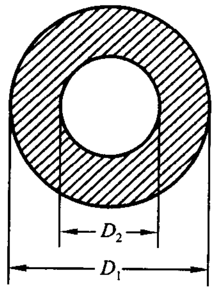

图 1－3

现已知 $D_1^* = 10$ cm，$D_2^* = 5$ cm，$|e^*(D_1)| \leqslant 0.05$ cm，$|e^*(D_2)| \leqslant 0.1$ cm，故

$$\begin{aligned} |e^*(S)| &\approx \left|\frac{\pi}{2} D_1^* e^*(D_1) - \frac{\pi}{2} D_2^* e^*(D_2)\right| \\ &\leqslant \frac{\pi}{2} D_1^* |e^*(D_1)| + \frac{\pi}{2} D_2^* |e^*(D_2)| \\ &\leqslant \frac{\pi}{2} \times 10 \times 0.05 + \frac{\pi}{2} \times 5 \times 0.1 \\ &= 0.5\pi \approx 1.570\,8\ (\text{cm}^2) \end{aligned}$$

于是 S^* 的相对误差 $e_r^*(S)$满足

$$|e_r^*(S)| = \left|\frac{e^*(S)}{S^*}\right| \leqslant \frac{1.570\,8}{58.905} < 0.027 = 2.7\%$$

故若取 $S^* = 58.905\ \text{cm}^2$ 作为圆环面积的近似值，则其绝对误差不超过 $1.570\,8\ \text{cm}^2$，相对误差小于 2.7%.

§4 数值运算中应注意的几个原则

在数值运算中，每步都可能产生误差，我们不可能(也不必要)步步进行分析. 下面仅从误差的某些传播规律和计算机字长有限的特点出发，指出在数值

运算中必须注意的几个原则，以提高计算结果的可靠性.

1. 选用数值稳定性好的算法

计算机虽然具有极高的运算速度，但它只能根据人们设定的指令，完成加、减、乘、除等基本运算. 因此，要使用计算机求解各种数学问题，必须把求解过程归结为按一定规则进行的一系列基本运算. 由基本运算及规定的运算顺序所构成的完整的解题方案，称为**数值算法**，简称**算法**.

对同一数学问题，为了求得其解，往往可以设计出多种不同的算法. 而不同的算法，在执行过程中引入的舍入误差以及舍入误差的积累情况，也往往是不相同的.

我们把运算过程中舍入误差对结果影响不大的算法称为稳定的算法，影响严重的算法称为不稳定的算法.

在研究算法的稳定性时，要考虑每一步舍入误差的影响及其相互的作用是非常繁琐的. 一种简便的方法是：假定初始值有误差 ε_0，中间不再产生新误差，考察由 ε_0 引起的误差积累是否增长. 如不增长就认为是稳定的，如严重增长就认为不稳定. 如在例 2 中利用递推关系式(1.1)求积分值 I_n ($n=1,2,\cdots$)的算法，是一种不稳定的算法. 因为若 I_0 的近似值 I_0^* 有误差 ε_0，由此引起 I_n 的近似值 I_n^* 的误差为

$$I_n - I_n^* = (-1)^n n!\varepsilon_0$$

它将随着 n 增大而迅速增大，导致当 n 较大时计算结果严重失真. 若将递推式(1.1)改写成

$$I_{n-1} = \frac{1}{n}(1 - I_n) \qquad (n = N, N-1, \cdots, 1, 0) \tag{1.9}$$

就可获得一个稳定的算法. 事实上，若 I_n 的近似值 I_n^* 有误差 ε_n，则由此引起 I_{n-1} 的近似值 I_{n-1}^* 的误差为

$$I_{n-1} - I_{n-1}^* = \frac{1}{n}(1 - I_n) - \frac{1}{n}(1 - I_n^*) = \frac{1}{n}(I_n^* - I_n) = -\frac{1}{n}\varepsilon_n$$

这表明近似值 I_{n-1}^* 的误差比 I_n^* 的误差缩小了. 因此，只要在选定 N 后，对 I_N 提供一个较粗糙的近似值 I_N^*，利用递推关系式(1.9)，可得越来越精确的近似值 I_{N-1}^*，I_{N-2}^*，$\cdots$，I_0^*.

2. 相近两数避免相减

由二元函数的误差传播规律式(1.8)，可得两近似值之差 $y^* = x_1^* - x_2^*$ 的相对误差估计式

$$e_r^*(y) \approx \frac{x_1^*}{y^*} e_r^*(x_1) - \frac{x_2^*}{y^*} e_r^*(x_2)$$