普通高等教育"十一五"立项教材

数值计算方法

◆主 编 王英英 林 玎

吉林大学出版社
JILIN UNIVERSITY PRESS

SHUZHI JISUAN FANGFA

ISBN 978-7-5601-4101-5

9 787560 141015

定价：30.00 元

普通高等教育“十一五”立项教材

数值计算方法

主　编　王英英　林　玎
副主编　魏　萍　康淑梅　杨鸿忠　于铁民

吉林大学出版社

图书在版编目（CIP）数据

数值计算方法／王英英，林玎主编.—长春：吉林大学出版社，2009. 1
ISNB 978-7-5601-4101-5

Ⅰ. 数… Ⅱ. ①王…②林… Ⅲ. 数值计算—计算方法
Ⅳ. 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2009）第 010824 号

书　名：数值计算方法
作　者：王英英　林　玎　主编

责任编辑、责任校对：赵洪波
封面设计：张沭沉
吉林大学出版社出版、发行
长春大学印刷厂　印刷
开本：787×1092　毫米　1/16
2009 年 2 月第 1 版
印张：13. 625　字数：258 千字
2009 年 2 月 第 1 次印刷
ISBN 978-5601-4101-5
定价：30. 00 元

社址：长春市明德路 421 号　邮编：130021
发行部电话：0431-88499826
网址：http://www. jlup. com. cn
E-mail：jlup@ mail. jlu. edu. cn

前　　言

作为土建工程师，经常涉及到建筑工程计算问题，而这些计算往往不是人工手算所能胜任的，单凭经验和查表来解决，又适应不了飞速发展的科学技术的需要，所以只能求助于现代化电子计算机。为此，数值计算方法的掌握和研究就显得十分必要。

本教材不仅包括了数值计算方法的基本内容（代数插值、曲线拟合、数值微分与数值积分、方程求根与方程组求解、特征值和特征向量的数值计算和常微分方程的数值解法），而且还注意到它在供暖通风、建筑结构、建筑工程等方面的应用。它可以作为进一步学习这方面内容的入门。

本课程的教学时数可为36学时左右。其中有些带“*”号的章节可按专业需求进行取舍。学习本门课只需具有一般的高等数学知识和线性代数的基本知识。

数值计算方法是实践性较强的一门课，建议在教学过程中加强上机实习，结合专业需要解决实际课题。

本书第一章、第二章、第八章由吉林建筑工程学院林玎教授编写；第三章及第六章由吉林建筑工程学院杨鸿忠副教授编写；第四章及第十一章由吉林建筑工程学院康淑梅副教授编写；第五章及第十章由吉林建筑工程学院魏萍副教授编写；第七章、第九章及习题答案由吉林建筑工程学院王英英教授编写，本书最后由王英英教授统稿。

本书由吉林建筑工程学院雷艳教授审稿。

由于时间仓促，作者水平有限，教材中一定存在不少问题，诚望读者批评指正。

目 录

第一章 误 差

在实际问题的数值计算中，理想的准确值往往得不到，人们常常用与准确值相近的数值来代替，这样产生的误差大小便是人们所关心的，因此，要对其误差的大小进行必要的估计.

§1.1 误差的来源

用近似计算解决实际问题时，一般都有误差，其来源主要有下列四种：

一、描述误差

在将实际问题归结为数学问题时，通常总要加上许多限制，总要忽略一些次要因素，这样建立的“理想化”的数学模型，虽然具有“精确”的外表，其实只是客观现象的一种近似而粗糙的描述，而这种数学上的近似必然会产生误差，这种误差称为**描述误差**.

二、观测误差

在数学模型的建立时，所用的一些初始数据往往都是通过人们实际观察、测量得来，由于受到所用观测仪器、设备精度等因素的限制，这些测得的数据都只能是近似的、即存在着误差. 这种误差称为**观测误差**.

三、截断误差

计算机只能进行有限次的四则运算，而许多数学问题（如微分、积分、无穷级数求和等）都是通过极限过程来定义的，要上机算题，就必须把这些数学问题转化为有限次的四则运算，这种转化必然产生误差，我们称为**截断误差**.

例如：求 e^x 时，有表达式

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots \tag{1.1}$$

取部分和

$$S_3(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} \tag{1.2}$$

作为 e^x 的近似值，就有截断误差

$$e^x - S_3(x) = \frac{e^{\theta x}}{24}x^4 \qquad (0 < \theta < 1) \tag{1.3}$$

四、舍入误差

计算机的数系是有限集，不仅无理数 e、π 等不属于计算机数系，一些有理数，如$\frac{1}{3}$，$\frac{1}{33}$等也不属于计算机数系，常常用计算机数系中和它们比较接近的数来表示它们，由此产生的误差称为舍入误差.

综上所述，在数值计算中存在难以回避的描述误差、观测误差、截断误差和舍入误差. 数学模型一旦建立，进入具体计算时所要考虑和分析的就是截断误差和舍入误差了. 在计算机上经过千百万次运算后所积累起来的总误差不容忽视，有时可能会大得惊人，甚至到达“淹没”所欲求解的真值的地步，而使计算结果失去根本的意义. 因此，本书在以后各章讲解各种算法时，将对其截断误差的估算和舍入误差的控制作适当的介绍.

§1.2 绝对误差和绝对误差限

定义 1 假设某一量的准确值为 x，其近似值为 x^*，则 x 与 x^* 的差

$$\varepsilon(x)=x-x^* \tag{1.4}$$

称为**近似值 x^* 的绝对误差，简称误差**.

$\varepsilon(x)$ 的大小标志着 x^* 的精确度. 一般来说，在同一量的不同近似值中，$\varepsilon(x)$ 越小，x^* 的精确度越高.

准确值 x 一般是未知的，因而 $\varepsilon(x)$ 也是未知的，但往往可以估计出误差的“上界”，即可求出一正数 η，使

$$|\varepsilon(x)|=|x-x^*|\leqslant\eta \tag{1.5}$$

满足上式的 η 称为 x^* 的绝对误差限. 由(1.5)式显然有

$$x^*-\eta\leqslant x\leqslant x^*+\eta \tag{1.6}$$

有时也用 $x=x^*\pm\eta$ 表示近似值 x^* 的精确度或准确值 x 所在范围.

例如 $x=0.3016\pm0.0014$，指的是准确值在 0.3016 左右，但不超过 0.0014 的误差限或准确值 x 的取值范围为

$$0.3092\leqslant x\leqslant 0.3120$$

再如，用有毫米刻度的尺测量不超过 1m 的长度. 读数方法如下：如果长度 l 接近于毫米刻度 l^*，就读出那个刻度数 l^* 作为长度的近似值. 显然，这个近似值的绝对误差限就是 0.5mm，

则有 $|\varepsilon(l)|=|l-l^*|\leqslant 0.5\text{mm}$.

如果读出的长度是 513mm，则有

$$|l-513|\leqslant 0.5\text{mm}$$

这样，我们虽仍不知准确长度 l 是多少，但由式(1.6)可得到不等式

$$512.5\text{mm}\leqslant l\leqslant 513.5\text{mm}$$

这说明 l 必在[512.5mm，513.5mm]区间内.

§1.3 相对误差和相对误差限

上节引入的误差的概念,还不能完全反映近似值的好坏程度.

例如工人甲平均生产一百块砖中有一块次品,而工人乙平均生产五百块砖中有一块次品,他们的次品都只有一块,但是显然乙的技术水平高于甲.这就启发我们除了要看次品的多少外,还要注意到产品的合格率,甲的次品率是1%,而乙的次品率是0.2%.

再如,测量10m的长度时产生的误差与测量1cm的长度时产生的1cm的误差是大有区别的.虽然两者的绝对误差相同,都是1cm,但是由于所测量的长度要差10倍,显然前一种测量比后一种要精确得多.为了说明准确程度,我们引入相对误差的概念.

定义2 假设某一量的准确值为 x,其近似值为 x^*,近似值的绝对误差与准确值的比值

$$\varepsilon_r(x)=\frac{\varepsilon(x)}{x}=\frac{x-x^*}{x} \qquad (x\neq 0) \tag{1.7}$$

称为 x^* 的相对误差.

但是和误差一样,我们不能定出 $\varepsilon_r(x)$ 的准确值,只能估计它的范围.如果

$$|\varepsilon_r(x)|\leqslant\sigma \tag{1.8}$$

我们就把 σ 称做 x^* 的**相对误差限**.

相对误差不仅能表示出绝对误差来,而且还说明了 x^* 的绝对误差与 x 比较起来所占的比例,它可以反映一个近似值的准确值程度,它比绝对误差更能反映出误差的特性.因此,在误差分析中,相对误差比绝对误差更为重要.

相对误差是个无名数,它没有量纲.例如,称100kg重的东西,若有1kg重的误差和量100m长的东西若有1m长的误差,则这两种测量的相对误差都是1/100.与此相反,由于绝对误差是名数,有量纲,上例中两种测量的绝对误差1kg和1m的量纲不同,两者就无法进行比较.

§1.4 有效数字

在表示一个近似值时,为了同时反映其准确程度,常常用到"有效数字"的概念.例如,对无穷小数或循环小数,可用四舍五入的办法来取其近似值.$\pi=3.14159265\cdots$.若按四舍五入取四位小数,则得 π 的近似值为3.1416;若取五位小数,则得其近似值为3.14159.这种近似值取法的特点是误差限为其末位的半个单位,即

$$|\pi-3.1416|<\frac{1}{2}\times 10^{-4}$$

$$|\pi-3.14159|<\frac{1}{2}\times 10^{-4}$$

下面引进有效数字的概念.

定义3 假设某一量的准确值为 x,其近似值为 x^*,如果 $|\varepsilon(x)|=|x-x^*|\leqslant$

$\frac{1}{2}\times10^{-n}$,则称 x^* 近似表示 x 的准确到小数点后第 n 位,并从这第 n 位起到第一位非零数字之间的一切数字都称为**有效数字**,并把有效数字的位数称为**有效数位**.

例如　设 $\pi=3.141\ 592\ 6\cdots$,那么

$x_1=3,\varepsilon_1=0.151\ 5\cdots\leqslant0.5\times10^0$,

x_1 的有效数字为 1 位,或说 x_1 精确到个位;

$x_2=3.14,\varepsilon_2=0.00159\cdots\leqslant0.5\times10^{-2}$,

x_2 的有效数字为 3 位,或说 x_2 精确到 0.01;

$x_3=3.141\ 6,\varepsilon_3=0.000\ 007\ 4\cdots\leqslant0.5\times10^{-4}$,

x_3 的有效数字为 5 位,或 x_3 说精确到 0.000 1;

$x_4=3.141\ 5,\varepsilon_4=0.000\ 092\ 6\cdots\leqslant0.5\times10^{-3}$,

x_4 的有效数字为 4 位,或说 x_4 精确到 0.001.

用四舍五入方法取准确值 x 的前 n 位作为近似值 x^*,则 x^* 有 n 位有效数字. 上面例子中的 $x_2=3.14$ 是以三位有效数字来表示 π;$x_3=3.1416$ 是以 5 位有效数字来表示 π.

另一种情况,例如 $x=0.1524,x^*=0.154$. 这时 x^* 的误差 $\varepsilon(x)=-0.0016$,其绝对值超过了 0.0005(第三位小数的半个单位),但却没有超过 0.005(第二位小数的半个单位),即 $0.0005\leqslant|x-x^*|\leqslant0.005$,显然,$x^*$ 虽有三位小数但却只精确到第二位小数,因此,它只具有二位有效数字. 其中 $a_1=1,a_2=5$ 都是准确数字,而第三位数字 $a_3=4$ 就不再是准确数字了,我们就称它为**存疑数字**.

还应注意,具有 n 位有效数字的有效数 x^* 数虽是真值 x 的准确到第 n 位的近似值,但这第 n 位数字有可能与真值 x 中的同一位数字不相同. 如不相同时,两者相差 1. 例如,3.1416 是 $\pi=3.1415926\cdots$的准确到小数点后第四位的近似值,但它的末位数字是 6,与 π 真值中的小数点后第四位数字 5 不同,两者相差 1.

用计算机进行的数值计算,由于受到计算机字长的限制,要求输入的数有一定的位数,计算的结果也只保留一定的位数,且所保留下来的不一定都是有效数字,同时也不是所有的有效数字都可保留下来.

§1.5　算法的数值稳定性

我们知道同一问题当选用不同的算法时,它们所得到的结果有时会相差很大,这是因为运算中的舍入误差在运算过程中的传播常随算法而异. 凡一种算法的计算结果受舍入误差的影响小者称它为数值稳定的算法. 下面通过一些例子来进一步说明算法稳定性的概念.

【例 1】　解方程

$$x^2+(10^9+1)x+10^9=0 \tag{①}$$

解:　由根与系数的关系可知,此方程的精确解为

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

如果利用求根公式

$$x_{1,2}=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ab}}{2a} \qquad ②$$

来编制计算机程序，在字长为 8，基底为 10 的计算机上进行运算，则由于计算机实际上采用的是规格化浮点数的运算，这时

$$-b=10^9+1=0.1\times10^{10}+0.00000000\boxed{01}\times10^{10}$$

的第二项中最后两位数"01"，由于计算机字长的限制，在机器上表示不出来，故在计算机中对其进行舍入运算（用$\underline{\Delta}$ 标记）时

$$-b\underline{\Delta}0.1\times10^{10}+0.00000000\times10^{10}=0.1\times10^{10}=10^9$$

$$\sqrt{b^2-4ab}=\sqrt{[-(10^9+1)]^2-4\times10^9}\underline{\Delta}10^9$$

所以 $x_1=\dfrac{-b+\sqrt{b^2-4ab}}{2a}\underline{\Delta}\dfrac{10^9+10^9}{2}=10^9$

$$x_2=\frac{-b-\sqrt{b^2-4ab}}{2a}\underline{\Delta}\frac{10^9-10^9}{2}=0$$

这样算出的根 $x_2(=0)$ 显然是严重失真的（因为精确解 $x_2=1$），这说明直接利用式②求解方程式①是不稳定的. 其原因是在于当计算机进行加、减运算时要对其进行舍入计算，实际上是受到机器字长的限制，在计算 $-b$ 时，绝对值小的数（1）被绝对值大的数（10^9）"淹没"了，在计算 $\sqrt{b^2-4ab}$时，4×10^9 被$[-(10^9+1)]^2$"淹没"了；这些相对小的数被"淹没"后就无法发挥其应有的影响，由此带来了误差，造成计算结果的严重失真.

这时，如要提高计算的数值稳定性，必须改进算法. 在此例中，由于算出的根 $x_1(=10^9)$是可靠的，故可利用根与系数的关系式

$$x_1\cdot x_2=\frac{c}{a}$$

来计算 x_2，有 $x_2=\dfrac{c}{a}\cdot\dfrac{1}{x}\underline{\Delta}\dfrac{10^9}{1\times10^9}=1$

所得结果很好. 这说明第二种算法有较好的数值稳定性（注意在利用根与系数关系式求第二根时，必须先算出绝对值较大的一个根，然后再求另一个根，才能得到精度较高的结果）. 同样道理，当多个数在计算机中相加时，最好从其中绝对值最小的数到绝对值最大的数依次相加，可减小和的误差.

【例 2】 试计算积分 $E_n=\int_0^1 x^n e^{x-1}dx\ (n=1,2,\cdots)$.

解： 由分部积分法可得

$$E_n=x^n e^{x-1}\big|_0^1-n\int_0^1 x^{n-1}e^{x-1}dx$$

因此有递推公式 $E_n=1-nE_{n-1}\ (n=2,3,\cdots)$

$$E_1=\frac{1}{e}$$

用上面的递推公式，在字长为 6，基底为 10 的计算机上，从 E_1 出发计算前几个积分值，其结果如表 1-1 所示.

表 1-1

k	E_K
1	0.367879
2	0.264242
3	0.207274
4	0.170904
5	0.145480
6	0.127120
7	0.110160
8	0.118720
9	-0.068480

被积函数 $x^n e^{x-1}$ 在积分限(0,1)区间内都是正值,积分值 E_9 为三位有效数字时的精确结果为0.0916,但表1-1中的 $E_9=-0.068480$ 确是负值,与0.0916相差很大.怎么会出现这种现象呢?可分析如下.

由于在计算 E_1 时有舍入误差,约为

$$\varepsilon=4.412\times10^{-7}$$

且考虑以后的计算都不再另有舍入误差.此 ε 对后面各项计算的影响为

$$E_2=1-2(E_1+\varepsilon)=1-2E_1-2\varepsilon=1-2E_1-2!\ \varepsilon$$

$$E_3=1-3(1-2E_1-2!\ \varepsilon)=1-3(1-2E_1)+3!\ \varepsilon$$

$$E_4=1-4[1-3(1-2E_1)-3!\ \varepsilon]=1-4[1-3(1-2E_1)]-4!\ \varepsilon$$

$$\vdots$$

$$E_9=1-9[1-8(\cdots)]+9!\ \varepsilon$$

这样,算到 E_9 时产生的误差为

$$9!\ \varepsilon=9!\ \times4.412\times10^{-7}\approx0.6101$$

就是一个不小的数值了.

可以改进算法来提高此例的数值稳定性,即将递推公式改写为 $E_{n-1}=\dfrac{1-E_n}{n}$

从后向前递推计算时,E_n 的误差下降为原来的$\dfrac{1}{n}$,因此只要 n 取得足够大,误差逐次下降,其影响就会越来越小.

由于

$$E_n=\int_0^1 x^n e^{x-1}dx\leqq\int_0^1 x^n dx=\frac{1}{n+1}$$

可知当 $n\to\infty$ 时 $E_n\to0$ 因此,可取 $E_{20}=0$ 作为初始值进行递推计算.

由于 $E_{20}\approx\dfrac{1}{21}$,故 $E_{20}=0$ 的误差约为$\dfrac{1}{21}$.在计算 E_{19}时误差下降到

$$\frac{1}{21}\times\frac{1}{20}\approx0.0024$$

到计算 E_{15}时,误差已下降到 $>4\times10^{-8}$

结果如表1-2所示.

表 1-2

k	E_n
20	0.0000000
19	0.0500000
18	0.0500000
17	0.0527778
16	0.0557190
15	0.0590176
14	0.0627322
13	0.0669477
12	0.0717733
11	0.0773523
10	0.0838771
9	0.0916123

这样得到的 $E_9=0.0916123$ 已很精确了. 可见,经过改进后的新算法具有很好的稳定性.

【例 3】 对于接近于 0 的 x 值,计算 e^x-1.

解: 如果用 e^x-1 直接进行计算,其稳定性是很差的,因为两个相近数相减会严重丢失有效数字,产生很大误差. 因此,得采用合适的算法来保证计算的数值稳定性. 可以把 e^x 在 $x=0$ 点附近展开成幂级数:

$$e^x=1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}+\cdots$$

则可得

$$e^x-1=x\left(1+\frac{x}{2!}+\frac{x^2}{3!}+\cdots\right)$$

按上式计算就有很好的数值稳定性.

通过以上这些例子就可以知道算法的数值稳定性对于数值计算的重要性了. 如无足够的稳定性,将会导致计算的最终失败. 为了防止误差传播和积累带来的危害,提高计算的稳定性,将前面分析所得的各种结果归纳起来,得到数值计算中应注意之点如下:

(1)应选用数值稳定的计算方法,避开不稳定的算式.

(2)注意简化计算步骤及公式,设法减少运算次数;选用运算次数少的算式,尤其是乘方幂次要低,乘法和加法的次数要少,以减少舍入误差的积累,同时也可节约计算机的机时.

(3)应合理安排运算顺序,防止参与运算的数在数量级相差悬殊时,大数"淹没"小数的现象发生. 多个数相加时,最好从其中绝对值最小的数到绝对值最大的数依次相加;多个数相乘时,最好从其中有效位数最多的数到有效位数最少的数依次相乘.

(4)应避免两相近数相减,可用变换公式的方法来解决.

(5)绝对值太小的数不宜作为除数,否则产生的误差过大,甚至会在计算机中造成"溢出"错误.

小　结

本章介绍了误差的来源、分类及一些基本概念,如绝对误差(限)、相对误差(限)、有效数字,研究了算法的数值稳定性.

本章应该掌握的基本内容:误差(限)、相对误差(限)、有效数字的定义;

数值计算的误差的求法;算法稳定性的含义.

在数值计算中应注意:选用稳定性好的计算公式;简化计算步骤和公式,设法减少计算次数;合理安排运算顺序,避免大数"淹没"小数;多个数相加时,其绝对值小者先加;多个数相乘时,其有效数字多者先乘;避免两相近数相减;避免绝对值太小的数作为除数.

习题一

1. 测量一木条长为542cm,若其绝对误差不超过0.5cm,问测量的相对误差是多少?

2. 已知 $e=2.71828\cdots$,试问其近似值 $x_1=2.7$,$x_2=2.71$,$x_3=2.718$ 各有几位有效数字?并给出他们的相对误差限.

3. 设 $x_1=-2.72$,$x_2=2.718$,$x_3=0.1718$ 均为经过四舍五入得出的近似值,试指明它们的绝对误差与相对误差.

4. 已知近似值 $x_1=1.42$,$x_2=-0.018$,$x_3=184\times10^{-4}$ 的绝对误差限均为 0.5×10^{-2},问它们各有几位有效数字?

5. 用 $\frac{22}{7}$ 和 $\frac{355}{113}$ 作为 $\pi=3.14159265\cdots$ 的近似值,问它们各有几位有效数字?

第二章　插值法与数值微分

插值法在工程及建筑设计中应用十分广泛．例如，已知一天 24 小时的逐时室外气温、综合温度、冷热负荷等值，需要知道其它任意时刻的值，即可应用插值计算求得；又如，我国工业企业采暖通风和空气调节设计规范中，仅给出了有限个地区相应有限个方位的夏季太阳辐射热总强度值，以及透过窗户玻璃的太阳总辐射强度值，至于其它任意方位（0～3590）的中间值，也要用插值法求得. 因此，插值法的研究很有必要.

在高等数学中，我们所讨论的函数 $y=f(x)$ 一般都给出解析表达式，但在实际问题中，函数 $y=f(x)$ 往往通过实验观测得到的一组数据来给出的，即在某个区间 $[a,b]$ 上给出一系列点的函数值

$$y_i=f(x_i),\quad i=0,1,2,\cdots,n \tag{2.1}$$

或者给出一张数据表见表 2-1：

表 2-1

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
y	y_0	y_1	y_2	$\cdots$	y_n

如何通过这些对应关系去找出函数 $f(x)$ 的一近似表达式呢？可以利用插值. 简单地说，插值就是根据给定的数据表，寻找一个解析形式的函数 $p(x)$ 近似代替 $f(x)$.

函数 $p(x)$ 的类型可以有各种不同的选择，但最常用的类型是代数多项式，这是因为代数多项式具有一些很好的特性，如它具有各阶导数，计算多项式的值比较方便，等等.

用代数多项式近似代替 $f(x)$ 这一方法，被称为**代数插值法**.

对于**代数插值**，其数学提法如下：

设已知 $y=f(x)$ 在 $n+1$ 个点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 上的函数值分别为 $y_0,\ y_1,\cdots,y_n$，求一个 n 次多项式 $p_n(x)$，使之满足如下条件

$$p_n(x_i)=y_i\qquad i=0,1,\cdots,n \tag{2.2}$$

$p_n(x)$ 称为插值多项式；$x_0,x_1,\cdots,x_n$ 称为插值节点；$[\min(x_0,x_1,\cdots,x_n),\max(x_0,x_1,\cdots,x_n)]$ 称为插值区间.

下面我们从最简单的情形着手，介绍如何构造这种插值多项式 $p_n(x)$，并在一定条件下，讨论插值得到的多项式与被插函数的误差.

§2.1　线性插值和抛物插值

已知函数 $y=f(x)$ 在节点 x_0,x_1 上的函数值 y_0,y_1，要求一个一次多项式 $p_1(x)$，使之