数值计算方法

陈 忠 朱建伟 编著

石油工业出版社

数值计算方法

陈 忠 朱建伟 编著

石油工业出版社

内容简介

本书包括解线性代数方程组的直接法与迭代法、函数的插值与逼近、求解非线性方程的迭代法、数值积分与数值微分、矩阵特征值与特征向量的计算、常微分方程数值解等内容．并附有大量的例题和习题．全书讲授约需 60～72 学时，对于学时较少的专业可不讲矩阵特征值与特征向量的计算、函数的最佳一致逼近等内容．

图书在版编目（CIP）数据

数值计算方法/陈忠、朱建伟编著．

北京：石油工业出版社，2001.8

ISBN 7－5021－3499－9

Ⅰ．数…

Ⅱ．①陈…②朱…

Ⅲ．数值计算－计算方法

Ⅳ．0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2001）第 059759 号

石油工业出版社出版发行

（100011　北京安定门外安华里二区一号楼）

地矿部河北地勘局测绘院印刷厂排版印刷

*

850×1168 毫米 32 开本 10.75 印张 250 千字 印 1—1000

2001 年 8 月北京第 1 版 2001 年 8 月河北第 1 次印刷

ISBN 7－5021－3499－9/G·339

定价：20.00 元

前　言

本书是根据教育部关于“数值计算方法”课程的基本要求为理工科院校信息与计算科学、应用数学、力学、物理、计算机软件等专业的大学生及其他专业的研究生学习“数值计算方法”（或“数值分析”）课程而编写的．

本书包括解线性代数方程组的直接法与迭代法、函数的插值与逼近、求解非线性方程的迭代法、数值积分与数值微分、矩阵特征值与特征向量的计算、常微分方程数值解等内容．并附有大量的例题和习题．全书讲授约需 60～72 学时，对于学时较少的专业可不讲矩阵特征值与特征向量的计算、函数的最佳一致逼近等内容．

本书的第一章、第七章、第八章、第九章由朱建伟编写，其余内容由陈忠编写．

本书由武汉大学数学与统计学院博士生导师费浦生教授主审，他以认真负责的态度对本书提出了许多宝贵意见，在此表示衷心地感谢．

本书在编写过程中曾得到校、系领导的大力支持，在此深表谢意；编写过程中曾参阅了有关书籍和文献，采用了有关的内容，这里也向有关的作者表示衷心地感谢．

由于编写时间较短，加之编者水平有限，选材不当及错漏之处在所难免．热忱欢迎广大读者和有关专家与学者不吝提出宝贵建议和批评指正．

编者

2001 年 8 月

目　录

第一章　绪　论

本章主要介绍两个方面的内容：一是论述数值计算方法研究的对象以及它的特点；二是介绍数值计算方法所用到的误差概念及基本性质．着重讨论舍入误差、截断误差及误差的传播．

§1　数值计算方法研究的对象与特点

数值计算方法，概括地说是“研究用于求数学问题近似解的方法和过程”．它研究的内容是科学和工程中所遇到的各类典型数学问题在计算机上的数值解法及其有关理论，涉及的问题十分广泛．数值计算方法研究的主要对象不是将一个实际问题转化成一个数学模型，而是根据已建立的数学模型提出求解的数值计算方法直到编出程序上机算出结果，数值计算方法是数学的一个分支，只是它不像纯数学那样只研究数学本身，而是着重研究求解的数值方法及与此相关的理论，包括方法的收敛性，稳定性及误差分析．同时还要根据计算机的特点研究计算时间最省的计算方法，因此数值分析既有纯数学的抽象性和严密性的特点，又有应用的广泛性的特点，是一门与计算机密切联系的实用性很强的数学课程．

根据数值分析的特点，学习时我们首先要注意掌握基本原理及基本思想，要重视误差分析，收敛性及稳定性的基本理论；其次，要通过本书的例题和练习，学习使用各种数值方法，解决实际计算问题；最后，通过上机实习，加深对各种数值方法的了解．

§ 2 误差的基本概念及误差分析

2.1 误差的来源

用数值计算方法解决科学技术中的问题时，误差的来源不外乎以下几种：

1. 模型误差

解决实际问题必须首先建立数学模型，它是对被描述的实际问题进行抽象、简化而得到的，故只能近似地描述所给的实际问题．我们把数学模型与实际问题之间出现的这种误差称为**模型误差**．

2. 观测误差

在数学模型中，常常包含了若干观测得到的参量，而观测的结果不可能绝对准确，因而就产生误差．这种误差通常称为**观测误差**．

3. 截断误差

当实际问题的数学模型很复杂，因而不能获得其精确解时，就必须建立有效的近似方法即数值方法，模型的准确解与数值方法的准确解（即模型的近似解）之间的误差称为**截断误差**或**方法误差**．

4. 舍入误差

由于计算机位数有限，因此，计算机在做数值计算时是按有限位数进行的，对超过位数的数字就要进行舍入，由此产生的误差称为**舍入误差**．

误差的来源虽然有以上几种，且了解这些对于数值计算是有帮助的，但前两种误差不是计算工作者所能独立完成的，因此，我们主要考虑算法的截断误差和舍入误差．

2.2 误差的基本概念

定义 1.1 设 x 为准确值，x^* 为 x 的一个近似解，称 ε

$(x^*)=x^*-x$ 为近似值 x^* 的**绝对误差**，简称**误差**，且可简记为 ε.

这样定义的误差 ε 可正可负，因此绝对误差与误差的绝对值不是同一概念．

一般说来，由于准确值 x 不能得到，因此误差 $\varepsilon(x^*)$ 的准确值也无法求得，但在实际测量或计算时，可根据情况事先估计出误差的绝对值不超过某个上界 η，即

$$|\varepsilon(x^*)|\leqslant\eta$$

数 η 称为 x^* 的**绝对误差限**，简称为**误差限**．有了误差限 η 后，就可知道准确值 x 的范围：

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

这个不等式有时也可以表示成：

$$x=x^*\pm\eta$$

例如，用毫米刻度尺测量一长度 x（即 x 为准确值），读出的长度为 x^*，即为近似值，显然，其绝对误差我们是不知道的，但我们可以知道其误差不会超过 0.5 毫米，即其绝对误差限为 0.5 毫米．值得注意的是绝对误差限不唯一．

下面我们讨论相对误差的概念，绝对误差的大小不能完全反映近似值的准确程度，例如设

$$x=10\pm1$$
$$y=1000\pm5$$

近似数 $y^*=1000$ 的绝对误差比 $x^*=10$ 的绝对误差大四倍，不过若考虑到数本身的大小，在 1000 内差 5 比在 10 内差 1，显然前者更精确些．这就启发我们除了要看绝对误差大小外，还必须顾及量本身的大小．为此，我们引进相对误差的概念．

定义 1.2 近似值 x^* 的误差与准确值之比

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

称为近似值 x^* 的**相对误差**，可简记为 ε_r.

相对误差也可正可负，其绝对值的上界 δ 称为**相对误差限**，即

$$|\varepsilon_r(x^*)|\leqslant\delta$$

在实际计算中，由于准确值 x 往往不知道，通常取

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

$$\delta=\frac{\eta}{|x^*|}$$

这是由于当 $\left|\dfrac{\varepsilon}{x^*}\right|$ 较小时

$$\frac{\varepsilon}{x}-\frac{\varepsilon}{x^*}=\frac{\left(\dfrac{\varepsilon}{x^*}\right)^2}{1-\dfrac{\varepsilon}{x^*}}$$

是 ε_r 的平方项，故可忽略不计．

当准确值 x 有很多位数时，常常按四舍五入的原则得到 x 的前几位近似值 x^*，例如 $\pi=3.14159265\cdots$，按舍入原则若取四位小数得 $\pi^*=3.1416$，取五位小数有 $\pi^*=3.14159$，它的绝对误差不超过末位数的半个单位，即

$$|\pi-3.1416|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4},\quad|\pi-3.14159|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-5}$$

四以下舍，五以上入这都无问题，若刚好是五，则作如下规定：若前面是偶数，则将五舍去，若前面是奇数，则将五进一．实践证明，当进行大量运算时，按上述原则进行舍入，整个运算的误差积累较小．

定义 1.3 记数 x 的近似数为 x^*，并且将 x^* 写成

$$x^*=\pm10^m(a_1+a_2\times10^{-1}+a_3\times10^{-2}+\cdots+a_n\times10^{-(n-1)})\tag{1.1}$$

若其绝对误差限满足

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1} \tag{1.2}$$

则称近似数 x^* **有 n 位有效数字**，这里 m 是一个整数，a_1，a_2，…，a_n 是0到9中的一个数字，且 $a_1 \neq 0$.

例1 重力常数 g，如果以米/秒^2 为单位，$g \approx 9.80$ 米/秒^2；若以千米/秒^2 为单位，$g \approx 0.00980$ 千米/秒^2. 它们都具有3位有效数字．因为，按第一种写法

$$|g - 9.80| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

据（1.1），这里 $m=0$，$n=3$；按第二种写法

$$|g - 0.00980| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-5}$$

这里 $m=-3$，$n=3$.

至于绝对误差限，由于单位不同结果也不同，$\varepsilon_1 = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$ 米/秒^2，$\varepsilon_2 = \frac{1}{2} \times 10^{-5}$千米/秒^2，而相对误差限却是相同的．

$$\varepsilon_r = 0.005/9.80 = 0.000005/0.00980$$

例1还说明有效位数与小数点后有多少位数无关，还要提醒一下，在公式运算中，首先要区分哪些量是准确的，哪些是近似的，例如三角形面积，$S = \frac{1}{2} \times$底$\times$高，这个公式的$\frac{1}{2} = 0.5$是准确值，它有无穷多位有效数字，而不能讲它只有一位有效数字，至于底与高，由于它是测量得到的，所以它是近似的，根据测量仪器的精密度可确定它有多少位有效数字．

定理1.1 给定某近似值有 n 位有效数字，则其绝对误差限为

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$$

在 m 相同的情况下，n 越大则绝对误差限越小．故有效位数越多，绝对误差限越小．

至于有效数字与相对误差限的关系，见定理 1.2.

定理 1.2 用（1.1）表示的近似数 x^*，若具有 n 位有效数字，则其相对误差限为

$$\varepsilon_r \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

反之，若 x^* 的相对误差限满足

$$\varepsilon_r \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证 由（1.1）可得

$$a_1 \times 10^m \leqslant |x^*| \leqslant (a_1+1) \times 10^m$$

当 x^* 有 n 位有效数字时

$$\varepsilon_r = \frac{|x-x^*|}{|x^*|} \leqslant \frac{0.5 \times 10^{m-n+1}}{a_1 \times 10^m} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$$

反之，由

$$\begin{aligned} |x-x^*| &= |x^*|\varepsilon_r \\ &\leqslant (a_1+1) \times 10^m \times \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} \\ &\leqslant 0.5 \times 10^{m-n+1} \end{aligned}$$

故 x^* 有 n 位有效数字. ▌

定理 1.2 说明，有效位数越多，相对误差限越小.

例 2 已知 $\pi = 3.1415926\cdots$，为了使 π 的近似数的相对误差小于 0.1%，问要取几位有效数字?

解 从定理 1.2 有 $\varepsilon_r \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$，这里 $a_1 = 3$，故取 $n = 4$ 即可满足.

即 $\pi^* = 3.142$.

2.3 误差分析

数值运算的误差估计情况较为复杂，通常利 Taylor 展开的

方法来估计误差，若要计算

$$A=f\ (x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n)$$

的值，设 x_1^*，x_2^*，$\cdots$，x_n^* 分别是 x_1，x_2，$\cdots$，x_n 的近似值，则 $A^*=f\ (x_1^*,\ x_2^*,\ \cdots,\ x_n^*)$ 为 A 的近似值，于是 A^* 的误差可利用 Taylor 展开来估计．

$$\begin{aligned}\varepsilon(A^*)=A^*-A&=f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)-f(x_1,x_2,\cdots,x_n)\\&\approx\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}{\partial x_k}\right)(x_k^*-x_k)\\&=\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*\varepsilon(x_k^*)\end{aligned}\tag{1.3}$$

$$\varepsilon_r(A^*)=\frac{\varepsilon(A^*)}{A^*}\approx\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*\frac{x_k^*\varepsilon_r(x_k^*)}{A^*}\tag{1.4}$$

由此可以得到两数进行四则运算的误差估计．

$$\varepsilon\ (x_1\pm x_2)\ =\varepsilon\ (x_1)\ \pm\varepsilon\ (x_2)$$

$$\varepsilon_r\ (x_1+x_2)\ =\frac{x_1}{x_1+x_2}\varepsilon_r\ (x_1)\ +\frac{x_2}{x_1+x_2}\varepsilon_r\ (x_2)$$

$$\varepsilon\ (x_1x_2)\ =x_2\varepsilon\ (x_1)\ +x_1\varepsilon\ (x_2)$$

$$\varepsilon\ (x_1/x_2)\ =\frac{x_2\varepsilon\ (x_1)\ -x_1\varepsilon\ (x_2)}{x_2^2}$$

$$\varepsilon_r\ (x_1x_2)\ =\varepsilon_r\ (x_1)\ +\varepsilon_r\ (x_2)$$

$$\varepsilon_r\ (x_1/x_2)\ =\varepsilon_r\ (x_1)\ -\varepsilon_r\ (x_2)$$

由以上四则运算的误差分析我们可以看到，在 x_1，x_2 为异号，且 x_1+x_2 很小的情况下，$\varepsilon_r\ (x_1+x_2)$ 可能会很大，同样在进行除法运算时，如果 x_2 很小的话，其误差也会很大．

例 3　若 $x=2.3452$，$y=0.067$ 是经过四舍五入得到的近似值，问 $A=x\cdot y$ 有几位有效数字？

解　先估计 A 的绝对误差限与相对误差限，由乘法运算的误差估计有

$$\varepsilon\ (A)\ =y\varepsilon\ (x)\ +x\varepsilon\ (y)$$