高等学校工程专科教材

数值计算

彭延铭　孟庆才　编

高等教育出版社

高等学校工程专科教材

数值计算

彭延铭　孟庆才　编

高等教育出版社

（京）112号

图书在版编目(CIP)数据

数值计算/彭延铭等编. —北京:高等教育出版社,
1999

ISBN 7-04-006984-9

Ⅰ.数… Ⅱ.彭… Ⅲ.数值计算-高等学校-教材
Ⅳ.0241

中国版本图书馆CIP数据核字(1999)第01054号

书　　名	数值计算		
作　　者	彭延铭　孟庆才　编		
出版发行	高等教育出版社		
社　　址	北京市东城区沙滩后街55号	邮政编码	100009
电　　话	010-64054588	传　　真	010—64014048
网　　址	http://www.hep.edu.cn		
经　　销	新华书店北京发行所		
印　　刷	成都新华印刷厂		
开　　本	850×1168　1/32	版　　次	1999年6月第1版
印　　张	3.25	印　　次	1999年6月第1次印刷
字　　数	75 000	定　　价	4.70元

前　言

在原国家教委1996年颁布的《高等学校工程专科基础课程教学基本要求》(1996年修订版)中明确规定:“数值计算”是一门重要的必修课程.本教材即根据这一基本要求编写.在内容选择、结构体系等方面,努力体现基础课为专业课服务的思想,努力满足加强培养技术应用型人材动手能力的要求.

本教材第一至第五章为高工专数值计算的基本内容,参考学时为18学时(其中包括上机实践6学时).第六至第七章可根据不同专业的需要作为选学内容,参考学时为10学时(其中包括上机实践4学时).本教材也可供职工大学、业余大学、干部训练班、专业培训班等作为选用教材,供已有高等数学基础的同志自学,同时也可作为广大工程技术人员的参考读物.

“数值计算”是一门应用性极强的课程.它针对不易求精确值或者不能求精确值的数学模型,建立近似计算的算法公式(具体算法见各章节).如不应用计算机求解,往往无法实现应用的目的,从而也就大大降低了本课程的开设价值,因而我们建议本课程采用与计算机结合的方法讲授.所有的算法程序均要求学生自编,教师在课堂上只讲解到算法框图为止,但教师应在学生上机时作现场辅导.绝不要给学生提供程序或现成软件.教学实践证明此教学法对于学生掌握概念与算法,从而提高实际应用能力是可行的,也是行之有效的.我们还建议学生采用BASIC语言,这样学校就不必为本课程先行开设语言课程了.

本书由上海冶金高等专科学校彭延铭副教授、河北工程技术高等专科学校孟庆才副教授编写.

本教材由北京机械工业大学朱铉道教授、常州工业技术学院彭玉芳教授和沈京一老师、吉林电气化高等专科学校杜忠复副教授以及南京动力高等专科学校施建兵副教授负责审稿.他们认真审阅了全稿,提出了许多宝贵意见,对此,我们表示衷心的感谢.

编　者

1998.10.

目　录

第一章　误差简介 ………………………………………… 1
　第一节　误差的来源 ……………………………………… 1
　第二节　误差　误差界　有效数字 ……………………… 2
　习题一 …………………………………………………… 5
第二章　非线性方程求根 ………………………………… 7
　第一节　迭代法 …………………………………………… 8
　第二节　牛顿法 …………………………………………… 13
　第三节　弦截法 …………………………………………… 17
　习题二 …………………………………………………… 19
第三章　函数插值 ………………………………………… 21
　第一节　拉格朗日插值公式 ……………………………… 21
　第二节　分段插值法 ……………………………………… 31
　习题三 …………………………………………………… 32
第四章　数值积分 ………………………………………… 34
　第一节　梯形求积公式 …………………………………… 34
　第二节　抛物线求积公式 ………………………………… 35
　第三节　复合求积公式 …………………………………… 36
　第四节　变步长梯形法则 ………………………………… 38
　*第五节　高斯积分法 …………………………………… 41
　习题四 …………………………………………………… 48
第五章　一阶常微分方程的数值解法 …………………… 49
　第一节　欧拉方法 ………………………………………… 50
　第二节　改进的欧拉方法 ………………………………… 51
　第三节　龙格—库塔(Runge-Kutta)方法 ……………… 55
　第四节　误差控制的改进欧拉方法 ……………………… 57

习题五……………………………………………………………………… 61
*第六章　一元函数极值问题的一维搜索法 ……………………… 63
第一节　搜索区间的确定……………………………………………… 64
第二节　缩小搜索区间　0.618 法 ………………………………… 68
*第七章　数据拟合法 ……………………………………………… 73
第一节　曲线拟合的最小二乘原理………………………………… 73
第二节　多变量的数据拟合………………………………………… 77
第三节　多项式的数据拟合………………………………………… 80
习题七……………………………………………………………………… 82
附录　求解线性方程组 ……………………………………………… 83
答案 …………………………………………………………………… 87
参考文献 ……………………………………………………………… 91

第一章 误差简介

第一节 误差的来源

用数学工具解决实际问题,首先要建立该问题的数学模型,然后为数学模型提供计算方案(算法),最后求出数学模型的解.实际中的数学模型的分析解(精确解)往往不易求,甚至不可求,必须采用近似方法求近似解.求近似解的过程一般称为数值计算.随着计算机的广泛应用,数值计算已成为求解数学问题的一种有效的方法.

科学和工程技术中的实际问题,一般比较复杂,建立其数学模型往往要作许多简化,因此,数学模型本身包含误差,称为"模型误差".在数学模型中,通常总要包含一些观测数据,这种观测结果又往往不会绝对准确,必然产生"观测误差".另外,在模型的求解过程中,所用到的计算公式大多是近似的,这种模型与公式之间的误差,称为"截断误差",也称为方法误差.

例如,工程上常用的常数 $e=2.718\ 281\ 845\ 904\ 5\cdots$,可通过下面公式计算

$$e=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}$$

它的精确值是不可求的,只能根据精度要求,计算其足够精确的近似值.若需要计算其前 $n+1$ 项

$$e\approx\sum_{k=0}^{n}\frac{1}{k!}=1+1+\frac{1}{2!}+\cdots+\frac{1}{n!}$$

则产生的截断误差为

$$\sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{1}{k!} = \frac{1}{(n+1)!} + \frac{1}{(n+2)!} + \cdots$$

此外，在数值计算过程中，受到计算工具的限制，往往要对一些数进行四舍五入(或其它舍入原则)，取满足精度的位数的近似值.这种舍入产生的误差，称为“舍入误差”.本教材只讨论截断误差和舍入误差，通过误差来衡量算法的好坏.

第二节　误差　误差界　有效数字

一、误差与误差界

设 x^* 为准确数 x 的近似值，我们称

$$E^* = x^* - x$$

为近似数 x^* 的绝对误差.由于一般无法得到准确值 x，因此绝对误差 E^* 也无法直接算出.但根据具体的观测或计算的情况，可事先估计其绝对值的范围

$$|E^*| = |x^* - x| \leqslant \varepsilon^*$$

ε^* 叫做近似数 x^* 的绝对误差界，简称为误差界.

例如，若取 $\pi^* = 3.14$ 为 $\pi = 3.141\,592\,653\,589\,793\cdots$ 的近似值，则

$$|E^*| = |\pi^* - \pi| \leqslant 0.002$$

于是 $\varepsilon^* = 0.002$ 可作为用 $\pi^* = 3.14$ 表示 π 的绝对误差界.有了绝对误差界 ε^*，就可知道准确值 x 的范围

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

常采用

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

来表示 x^* 的精确度.

绝对误差界由于带有单位,不能完全表示近似的好坏程度.

例如,在同一单位下

$$x = 10 \pm 1$$
$$y = 1\,000 \pm 5$$

虽然 x 的绝对误差界比 y 的绝对误差界小,但由于在 1 000 之内差 5 比 10 之内差 1 更准确些,所以 $y^* = 1\,000$ 比 $x^* = 10$ 的精确度高.为了清楚地描述这一现象,我们约去量纲引进

$$E_r^* = \frac{E^*}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$$

并称 E_r^* 为近似数 x^* 的相对误差.显然 E_r^* 无法直接算出,若知道

$$|E_r^*| = \left|\frac{E^*}{x^*}\right| \leqslant \frac{\varepsilon^*}{|x^*|} = \varepsilon_r^*$$

则称 ε_r^* 为 x^* 的相对误差界.前面提到的 $x = 10 \pm 1$ 的近似值 $x^* = 10$的相对误差界为 10%,而 $y = 1\,000 \pm 5$ 的近似值 $y^* = 1\,000$的相对误差界为 0.5%.由此可知,相对误差界越小,近似程度越好.

二、有效数字

当 x^* 是由四舍五入的原则确定时,显然其绝对误差界不会超过其末位的半个单位.

定义 (有效数字) 若近似值 x^* 的绝对误差界是某一位上的半个单位,且该位到 x^* 的左起第一位非零数字共有 n 位,则称 x^* 有 n 位有效数字,或者说 x^* 精确到该位.

例如,π 精确到小数点后第二位的近似值 $\pi^* = 3.14$,

$$|\pi^* - \pi| \leqslant 0.002 \leqslant \frac{0.01}{2} = 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

π 精确到小数点后第四位的近似值 $\pi^* = 3.141\,6$，

$$|\pi^* - \pi| \leqslant \frac{0.000\,1}{2} = 0.000\,05 = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

显然，$\pi^* = 3.14$ 有 3 位有效数字，$\pi^* = 3.141\,6$ 有 5 位有效数字.为了更清楚地看到误差界和有效数字的联系，可把近似数写成标准格式：

$\pi^* = 3.14 = 0.314 \times 10^1$ 有 3 位有效数字，其误差界是：

$$|\pi^* - \pi| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \frac{1}{2} \times 10^{1-3}$$

$\pi^* = 3.141\,6 = 0.314\,16 \times 10^1$ 有 5 位有效数字，其误差界是：

$$|\pi^* - \pi| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-4} = \frac{1}{2} \times 10^{1-5}$$

一般地，近似数

$$x^* = 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^p$$

若误差界

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{p-n}$$

其中 p 为整数，数字 a_1 是 1～9 中某一数字，而 $a_2, \cdots, a_n$ 可分别取 0～9 中某一数字，则说 x^* 有 n 位有效数字.

例 1　$x^* = 0.001\,234\,1$ 是 x 的具有 5 位有效数字的近似值，则其误差界是 $|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2-5} = \frac{1}{2} \times 10^{-7}$.

例 2　求 $x = 3\,421.440\,3$ 的误差界为 $\frac{1}{2} \times 10^{-2}$ 的近似值，并指出它有几位有效数字.

解　$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \frac{1}{2} \times 10^{4-6}$，$x^*$ 有 6 位有效数字，所以 $x^* = 3\,421.44$.

例 3　用近似公式

$$\mathrm{e}^x \approx 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{24}x^4 + \frac{1}{120}x^5$$

求 e^x 在 $x = -0.2$ 的值.

解 $\mathrm{e}^{0.2^*} = 1 - 0.2 + \dfrac{0.04}{2} - \dfrac{0.008}{6} + \dfrac{0.001\,6}{24} - \dfrac{0.000\,32}{120}$

若结果保留 6 位有效数字,则

$$\mathrm{e}^{-0.2^*} \approx 0.818\,731$$

其误差界

$$|\mathrm{e}^{0.2^*} - \mathrm{e}^{-0.2}| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-6} = 0.000\,000\,5$$

若结果保留 8 位有效数字,则 $\mathrm{e}^{-0.2^*} \approx 0.818\,730\,67$, $\varepsilon^* = \dfrac{1}{2} \times 10^{-8}$.

由有效数字的定义,近似数 x^* 的最后一个有效数位,确实可反映绝对误差的大小,而且可以证明,有效数字越多,相对误差界越小.由舍入原则,涉及到有效数字四则运算时,中间数字应保持有效数字,小数参与运算至少要扩充两位小数.

习 题 一

1. 若 $\dfrac{1}{4}$ 用 0.25 来表示,问有多少位有效数字?

2. 下列各数是按四舍五入的原则得到的近似数,它们各有几位有效数字?并求出它们的绝对误差界.

21.301, 0.001 23, 1.414 21, 0.120 0.

3. 根据四舍五入的原则,写出 $x = 0.033\,3\cdots$ 的绝对误差界不超过 0.000 5 的近似值,并求其有 2 位有效数字的相对误差界.

4. 设 $a = 20.346\,68$, $b = 0.002\,004$,写出 a, b 的精确到小数点后四位的近似值和绝对误差界,并说明近似值的有效数字.

5. 在近似计算中经常使用术语:精度、误差界、有效数字.思

考这三者之间的联系，体会其所含的意义．给出 $x=66.586\,858\,809$，写出其精度为 $\epsilon=10^{-7}$的近似值，并写出该近似值的误差界和有效数字．

第二章 非线性方程求根

在许多实际问题中常常会遇到求解非线性方程的问题.例如求 n 次代数方程

$$a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n = 0$$

的根,或求超越方程

$$xe^{-x} - \sin x = 0$$

的根,这些都可表示为求方程 $f(x)=0$ 的根,或称为求函数 $f(x)$ 的零点.

对于非线性方程,若求其所有的根,一般来说是非常困难的,而工程上往往需要的是某个根.除了一些简单的方程外,方程的一个根的精确值也不易求得,只能求足够精确的近似根.

本章介绍的方法,对代数方程和超越方程都有效,但是,都要求根据问题的实际背景或其它方法,确定根的存在范围 $[a,b]$.

具体求根,一般分两步:

第一步:确定根的某个初始近似根(较粗糙的近似值).

第二步:将初始近似根逐步加工成满足精度要求的结果.

下面介绍寻求初始近似根的"逐步搜索法".

方程 $f(x)=0$ 的根的分布情况可能十分复杂.假设 $f(x)$ 在某个区间 $[a,b]$ 上连续,且 $f(a)\cdot f(b)<0$,则方程 $f(x)=0$ 在 (a,b) 内至少有一个实根.于是从区间的左端点 $x=a$ 出发,按某个预定的步长 h,一步一步向右跨,每跨一步,进行一次根的搜索,即检查每一步的起点 x_0 和终点 x_0+h 的函数值是否同号,如果发现它们异号,即

$$f(x_0)\cdot f(x_0+h)<0$$

那么在区间(x_0,x_0+h)内必有方程的实根.这时可以取

$$\frac{1}{2}[x_0+(x_0+h)]$$

作为初始近似根.

图2-1所示的框图描述了寻求初始近似根的逐步搜索法.

例如,考察方程 $f(x)=x^3-x-1=0$,观察到 $f(0)<0,f(2)>0$,可见方程至少有一个根在区间$(0,2)$内.

从 $x=0$ 出发,取 $h=0.5$ 为步长向右进行搜索.我们发现 $f(1)<0,f(1.5)>0$,因此在区间$(1,1.5)$内必有实根.可取 $x_0=\frac{1}{2}(1+1.5)=1.25$ 作为初始近似根.

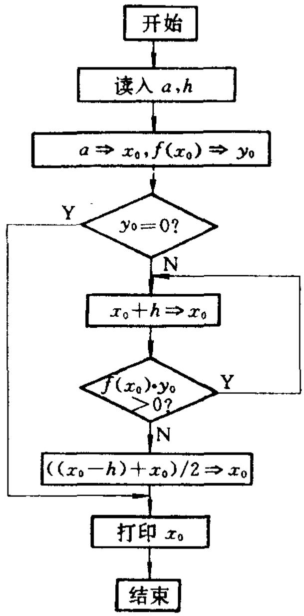

图2-1

显然,只有当 h 取得足够小时,才能得到所要求精度的近似根,但当 h 很小时,步数便相应增多,从而使计算量很大,因而逐步搜索法一般只用来求方程的初始近似根,然后再用迭代法或牛顿法或弦截法对初始近似根逐步精确化.下面我们分别予以介绍.

第一节 迭 代 法

简单迭代法(以下简称迭代法) 是一种重要的逐步逼近方

法.这种方法使用某个固定公式,反复校正根的近似值,使之逐步精确化,最后得到满足精度要求的结果.下面我们通过例题说明迭代法的求解过程.

例1 求方程 $x^3-x-1=0$ 在 $x=1.25$ 附近的一个根.

解 将方程改写成下列的迭代形式

$$x=\sqrt[3]{x+1} \tag{1}$$

把初始近似根 $x_0=1.25$ 代入(1)式的右端,得

$$x_1=\sqrt[3]{x_0+1}\approx 1.310\,37$$

计算结果表明,$x_1 \neq x_0$,说明 x_0 并不满足方程(1).再用 x_1 作为初始近似根代入(1)式右端,又得

$$x_2=\sqrt[3]{x_1+1}\approx 1.321\,99$$

由于 $x_2 \neq x_1$,再取 x_2 作为初始近似根,并重复上述过程.如此继续下去,直至 x_{k+1} 与 x_k 在精度要求内完全相同,则 x_{k+1} 就是所求方程的近似根.这种逐步校正的过程称为迭代过程,而本题中迭代所使用的公式

$$x_{k+1}=\sqrt[3]{x_k+1} \qquad (k=0,1,2,\cdots)$$

称为迭代公式.

表 2-1

k	x_k	k	x_k	k	x_k
0	1.25	3	1.324 20	6	1.324 71
1	1.310 37	4	1.324 62	7	1.324 72
2	1.321 99	5	1.324 70	8	1.324 72

表 2-1 记录了各步迭代的结果.其结果取 6 位有效数字,可见 $x_8=x_7$,这时可以认为所求方程的近似根就是 x_8,记为