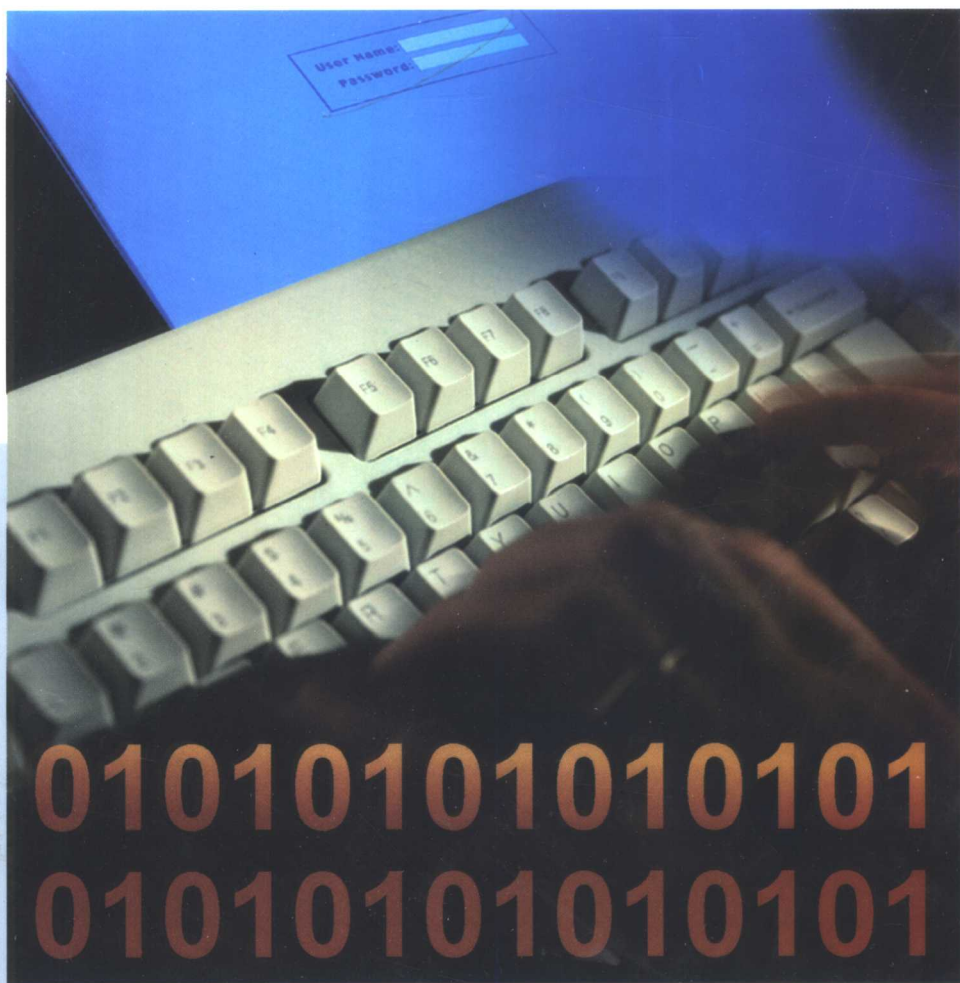


新世纪高等学校计算机系列教材

数值计算方法

(MATLAB语言版)

李 林 金先级 编



高等教育出版社
中山大学出版社

0241
121

策划：湖北省计算机学会·武汉高联教科文中心

新世纪高等学校计算机系列教材

数值计算方法

(MATLAB 语言版)

李 林 金先级 编

高等教育出版社·北京

中山大学出版社·广州

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法(MATLAB语言版)/李林,金先级编. —北京:高等教育出版社. —广州:中山大学出版社, 2006. 2

(新世纪高等学校计算机系列教材/湖北省计算机学会·武汉高联教科文中心策划)

ISBN 7-306-02663-1

I. 数… I. ①李… ②金… III. 数值计算—计算方法—高等学校—教材 N. O241

中国版本图书馆CIP数据核字(2006)第004081号

内 容 简 介

本书从工程和科学应用的角度介绍了常见数学问题数值分析的有关理论与方法。具体内容包
括:非线性方程的求根、插值与曲线拟合方法、数值积分、微分方程的数值解法、线性方程组的
数值解法、MATLAB语言编程基础等内容。此外,在附录中给出了常见数学问题数值解法的
MATLAB语言程序和部分习题的参考答案。本书内容简明、适用,叙述通俗、易懂,适于教学和
自学。

本书适合普通高等学校计算机、应用数学类有关专业作为教材使用,亦可供有关工程技术
人员自学参考。

注:凡需要本书或其电子原稿备课者,可与执行编委唐元瑜老师联系(027-87554561,13907198295)。

版权所有 盗印必究

数值计算方法(MATLAB语言版)

© 李 林 金先级 编

责任编辑:里 引 唐 源

封面设计:袁 作

责任校对:高 联

责任技编:潘 隆

出版发行:高等教育出版社

(地址:北京市西城区德外大街4号 邮编:100011)

中山大学出版社

(地址:广州市新港西路135号 邮编:510275)

经 销:广东新华发行集团

武汉高联科教信息有限公司(电话:027-87554561 87550331(带传真))

邮编:430074)

印 刷:安陆市鼎鑫印务有限公司

开 本:787mm×1092mm

1/16

印 张:12.75

字 数:320千字

版 次:2006年2月第1版

印 次:2006年2月第1次印刷

本次印数:4 000册

定价:20.00元

《新世纪高等学校计算机系列教材》 编审指导委员会

主任:卢正鼎(华中科技大学教授、博士生导师)

副主任:何炎祥(武汉大学教授、博士生导师,武汉大学东湖分校教授)

编委:(以姓氏笔画排序)

王虹(湖北经济学院教授)

王元珍(华中科技大学教授、博士生导师)

毛法尧(华中科技大学教授,华中科技大学文华学院教授)

尹朝庆(武汉理工大学教授,武汉科技大学城市学院教授)

叶俊氏(华中师范大学副教授、博士)

李刚(江汉大学教授,江汉大学文理学院教授)

李鸣山(武汉大学教授)

陈珉(武汉大学教授、博士)

陈传波(华中科技大学教授、博士生导师)

陈建勳(武汉科技大学教授、博士)

陆际光(中南民族大学教授)

周双娥(湖北大学副教授、博士)

汪厚祥(海军工程大学教授、博士)

张彦铎(武汉工程大学教授、博士后)

金先级(华中科技大学教授,华中科技大学武昌分校教授)

胡金柱(华中师范大学教授、博士生导师,华中师范大学汉口分校教授)

袁蒲佳(华中科技大学教授,中南民族大学工商学院教授)

黄求根(武汉科技学院教授)

程元斌(江汉大学副教授)

程学先(湖北工业大学教授)

楚惟善(湖北工业大学教授,湖北工业大学工程技术学院教授)

谭连生(华中师范大学教授、博士)

熊家军(空军雷达学院教授、博士)

戴光明(中国地质大学教授、博士)

执行编委:唐元瑜(华中科技大学副编审)

《新世纪高等学校计算机系列教材》

总 序

21世纪人类已跨入了信息时代,以计算机为核心的信息技术正在迅猛发展,并不断改变着人类社会的工作方式、生产方式、生活方式和学习方式。当今,各行各业的现代化都离不开计算机,各行各业的人们都在学习和使用计算机,而计算机科学技术及其教育本身也在日新月异地发展变化。为了顺应时代的潮流,满足新世纪高等学校计算机教育事业发展、教学改革和人才培养对高质量特色教材的需求,湖北省计算机学会及其教育与培训专业委员会和武汉高联教科文中心等共同策划、组织并约请华中科技大学、武汉大学、华中师范大学、中国地质大学、中南民族大学、武汉科技大学、海军工程大学、空军雷达学院、湖北大学、湖北工业大学、武汉工程大学、武汉科技学院、江汉大学等高校长期奋斗在教学科研第一线,且具有丰富教学实践经验的部分优秀骨干教师共同编写了这套计算机系列教材。

这套系列教材共40余种,主要是根据中国计算机学会教育委员会、全国高等学校计算机教育研究会等联合推出的《中国计算机科学与技术学科教程2002》(简称“CCC2002教程”)中的课程体系与课程大纲的要求,进行规划和组织编写的,并主要供高等学校计算机及其相关专业本科或研究生教学使用。此外,本系列教材中也还包含了一部分适用于各类普通高校培养应用型计算机专业人员和适用于计算机基础教育的教材。

当今,计算机科学技术突飞猛进地向前发展,计算机新技术和新产品不断涌现,高等教育事业和教学改革不断深化,国内教育逐步与国际教育接轨,社会对计算机专业人才的要求越来越高,等等。面对这些新形势,这套系列教材以培养学生具有较扎实的专业基础理论知识、实践能力、创新能力和较高的综合素质能力为目的,既注重知识的更新与合理的结构,又注意学习和汲取国内外优秀教材的优点与精华,并尽力反映国内外最新的教学科研成果及作者们宝贵的实践经验。

我相信,通过作者们的共同努力,定能将这套系列教材打造成为一套既具有时代特色,又非常适用的、高质量的系列教材,为我国高等教育事业的发展和高素质专业人才的培养作出应有的贡献。

湖北省计算机学会理事长
《新世纪高等学校计算机系列教材》
编审指导委员会主任

卢正鼎

2003年7月

前 言

刚刚跨入21世纪,我国的高等教育事业就得到了迅猛发展,一批按照新机制和新模式运行的新型大学应运而生。为实现新型大学培养具有一定理论基础和具有较强实践能力的应用型人才的培养目标,应该努力进行教学改革,尤其是应该大力进行课程体系的改革,加强和加快教材的建设,使教材能够紧跟现代教育的发展。为此,我们在多年教学实践的基础上,编写了计算机学科专业的重要课程——《数值计算方法(MATLAB语言)》一书。

数值计算方法是一门理论性、技术性和实践性都很强的课程。为了搞好教学,培养学生的科学思维能力和解决实际问题的能力,在本教材的编写过程中体现了如下思路:系统介绍常见数学问题的各种数值解法及其内在的逻辑联系,重点突出数值方法的有效性、实用性和应用性,等等。在运用计算机程序语言实现具体计算方法的问题上,我们选用了MATLAB语言,这主要是因为MATLAB语言是当今最好和最流行的科学计算语言。MATLAB语言以矩阵运算见长,程序代码简洁,编程和调试容易、效率高,易于学习和使用。MATLAB功能十分强大,尤其是其出色的图形处理功能,能够非常容易实现计算结果的可视化,极大地帮助我们理解数值计算方法的有关概念和理论问题,同时还能够更好地实现计算过程面向计算机。把MATLAB语言融合到计算方法中是本书的一大特色。

本书共分7章,包括数值计算方法概论、方程求根、插值方法和曲线拟合法、数值积分、微分方程的数值解法、线性方程组的数值解法、MATLAB语言编程基础等内容,主要介绍常见数学问题数值分析的有关理论和方法。书中还有两个附录,其中,附录A集中给出了部分常见数学问题数值解法的MATLAB语言程序,附录B给出了部分习题参考答案。

使用本书作为教材,建议总教学时数不少于50学时,其中MATLAB语言编程基础部分和上机练习至少为12学时,而对于部分较深较难的内容可以选讲或不讲。第7章可以在学完概论后进行教学,也可以在课程一开始就安排教学。在完成每一章的教学内容后,可安排一次上机练习,以提高学生应用MATLAB语言解决实际问题的能力。

本书由李林和金先级教授共同编写。在本书的编写过程中,得到了湖北省计算机学会及其教育与培训专业委员会、华中科技大学、华中科技大学武昌分校以及《新世纪高等学校计算机系列教材》编审指导委员会等有关领导与专家的大力支持与帮助,在此一并致谢。

由于编者水平有限,书中缺点与错误在所难免,敬请有关专家和读者批评指正。

编 者

2005年10月

目 录

第 1 章 概 论	(1)
1.1 数值计算方法	(1)
1.1.1 什么是数值计算方法	(1)
1.1.2 数值计算方法的特点	(2)
1.1.3 数值计算方法的常用算法	(3)
1.1.4 数值计算方法的主要内容	(5)
1.2 误差和有效数字	(5)
1.2.1 误差和误差限	(5)
1.2.2 有效数字	(6)
1.2.3 相对误差和有效数位之间的关系	(7)
1.2.4 近似数算术运算的误差和有效数位	(8)
1.3 计算方法的稳定性	(9)
1.3.1 误差的来源	(9)
1.3.2 计算方法的稳定性	(11)
1.4 数值计算的基本原则	(13)
本章小结	(14)
习题一	(15)
第 2 章 方程求根	(16)
2.1 引 言	(16)
2.2 方程根的分布区间	(16)
2.2.1 根的分布区间	(16)
2.2.2 确定方程根的分布区间的方法	(17)
2.3 二分搜索法	(19)
2.4 一般迭代法	(22)
2.4.1 基本原理和迭代公式	(22)
2.4.2 迭代法的收敛性	(24)
2.4.3 迭代法的收敛速度	(27)
2.4.4 收敛过程的加速	(28)
2.5 Newton(牛顿)法	(29)
2.5.1 基本思想与迭代公式	(29)
2.5.2 Newton 法的收敛性与收敛速度	(31)
2.6 Newton 迭代法的改进	(34)
2.6.1 Newton 下山法	(34)
2.6.2 简化 Newton 法	(34)
2.6.3 弦截法	(35)
本章小结	(36)
习题二	(37)

第 3 章 插值方法与曲线拟合方法	(38)
3.1 引 言	(38)
3.1.1 插值方法	(38)
3.1.2 曲线拟合方法	(38)
3.2 Lagrange(拉格朗日)插值法	(39)
3.2.1 线性插值(两点插值或一次插值)	(39)
3.2.2 抛物插值(三点插值或二次插值)	(40)
3.2.3 Lagrange 插值	(41)
3.2.4 插值余项	(43)
3.2.5 高次插值的 Runge(龙格)现象	(45)
3.3 逐次插值法与分段插值法	(47)
3.3.1 Aitken(埃特金)逐次线性插值法	(47)
3.3.2 分段插值法	(49)
3.4 Newton(牛顿)插值法	(50)
3.5 Hermite(埃尔米特)插值法	(55)
3.5.1 Hermite 插值多项式	(55)
3.5.2 Hermite 插值余项	(57)
3.6 曲线拟合方法	(58)
3.6.1 直线拟合法	(58)
3.6.2 多项式曲线拟合法	(59)
3.6.3 指数曲线拟合法	(61)
本章小结	(62)
习题三	(63)
4	
第 4 章 数值积分	(64)
4.1 引 言	(64)
4.2 数值积分方法	(64)
4.2.1 数值积分的基本思想	(64)
4.2.2 一般求积公式	(65)
4.2.3 求积公式的代数精度	(66)
4.2.4 求积公式的构造方法	(68)
4.3 Newton-Cotes(牛顿-柯特斯)求积公式	(71)
4.3.1 Newton-Cotes 公式的一般形式	(71)
4.3.2 Newton-Cotes 公式的稳定性	(73)
4.3.3 截断误差与代数精度	(73)
4.3.4 低阶的 Newton-Cotes 公式	(74)
4.4 复化求积方法	(76)
4.4.1 复化梯形公式	(76)
4.4.2 复化 Simpson 公式	(77)
4.4.3 复化 Cotes 公式	(78)
4.5 Romberg(龙贝格)积分法	(79)

4.5.1	变步长积分法	(79)
4.5.2	Romberg 积分法	(81)
4.6	Guass-Legendre(高斯 - 勒让德)求积方法	(84)
4.6.1	Guass 型求积公式	(84)
4.6.2	Legendre 多项式	(85)
4.6.3	Guass-Legendre 求积公式	(85)
	本章小结	(86)
	习题四	(87)
第 5 章	常微分方程的数值解法	(89)
5.1	引 言	(89)
5.2	Euler(欧拉)方法	(90)
5.2.1	显式 Euler 格式	(90)
5.2.2	隐式 Euler 格式	(93)
5.2.3	两步 Euler 格式	(93)
5.2.4	改进的 Euler 格式	(94)
5.3	Runge-Kutta(龙格 - 库塔)方法	(96)
5.3.1	Runge-Kutta 方法的基本思想	(96)
5.3.2	二阶 Runge-Kutta 格式	(96)
5.3.3	四阶 Runge-Kutta 格式	(97)
5.3.4	变步长 Runge-Kutta 方法	(101)
5.4	单步法的收敛性与稳定性	(102)
5.4.1	单步法的收敛性	(102)
5.4.2	单步法的稳定性	(103)
5.5	微分方程组与高阶方程的数值解法	(104)
5.5.1	一阶常微分方程组的数值解法	(104)
5.5.2	高阶微分方程的解法	(105)
	本章小结	(109)
	习题五	(109)
第 6 章	线性方程组的数值解法	(110)
6.1	引 言	(110)
6.2	解线性方程组的直接法	(110)
6.2.1	Guass(高斯)消去法	(111)
6.2.2	列主元消去法	(113)
6.2.3	矩阵三角分解法	(116)
6.2.4	解三对角方程组的追赶法	(127)
6.3	范数和误差分析	(129)
6.3.1	向量范数和矩阵范数	(129)
6.3.2	矩阵的条件数和误差分析	(131)
6.4	解线性方程组的迭代法	(132)

6.4.1	Jacobi(雅可比)迭代法	(132)
6.4.2	Guass-Seidel(高斯 - 赛德尔)迭代法	(134)
6.4.3	超松弛迭代法	(135)
6.4.4	迭代法的收敛性	(137)
6.5	非线性方程组的数值解法	(138)
	本章小结	(140)
	习题六	(140)
第7章	MATLAB 编程基础	(143)
7.1	MATLAB 的特点	(143)
7.2	MATLAB 的基本操作	(144)
7.3	MATLAB 的变量与表达式	(147)
7.4	MATLAB 矩阵及运算	(150)
7.4.1	矩阵的创建	(150)
7.4.2	矩阵的修改	(151)
7.4.3	MATLAB 的矩阵运算	(153)
7.4.4	MATLAB 的阵列运算	(157)
7.5	MATLAB 字符串	(159)
7.6	MATLAB 语句	(161)
7.6.1	控制语句	(161)
7.6.2	输入语句	(163)
7.6.3	输出语句	(163)
7.6.4	辅助语句	(164)
7.6.5	回显语句	(164)
7.6.6	绘图语句	(164)
7.7	M 文件与 M 函数	(164)
7.7.1	M 文件	(164)
7.7.2	M 函数	(165)
7.8	数学图形的绘制	(165)
7.8.1	二维数学图形绘制	(165)
7.8.2	数学图形属性修改	(166)
7.8.3	绘制矩阵的图形	(167)
7.8.4	三维数学图形绘制	(168)
附录	(171)
附录 A	常用 MATLAB 程序	(171)
附录 B	部分习题参考答案	(188)
参考文献	(193)



1.1 数值计算方法

1.1.1 什么是数值计算方法

数值计算方法是在解决科学研究和工程实践中遇到的复杂问题的长期过程中形成的一门学科。

一般而言,在科学研究和工程实践中遇到的各种复杂的实际问题,通常可以用物理模型和数学模型来描述。通过对数学模型(物理模型一般转化成数学模型来研究)进行理论分析和求解,最终得到问题的解。然而,并不是所有的数学模型即数学问题都能够采用数学分析的方法来进行求解。

例如:若已知两个变量 x 和 y 之间的一组离散数据 $(x_i, y_i) (i=0, 1, \dots, n)$, 要通过这组数据找到变量 x 和 y 之间的函数关系, 即数学表达式 $y=f(x)$, 则该问题直接用数学分析方法来解决就比较困难。

对于常微分方程的初值问题, 例如, 一阶常微分方程的初值问题

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y), x \in [a, b] \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

用解析法一般只能求得某些类型微分方程的解 $y=y(x)$ 而不能得到所有微分方程的解。

对于定积分问题, 若函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上连续且其原函数为 $F(x)$, 则有:

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$$

但是, 如果当被积函数 $f(x)$ 不能找到用初等函数有限形式表示的原函数时, 例如:

$$f(x) = \frac{\sin x}{x}, \sin x^2, \cos x^2, \frac{1}{\ln x}, e^{-x^2}, \sqrt{1+x^3}, \dots$$

或者当 $y=f(x)$ 之间的函数关系是以离散的数据 $(x_i, y_i) (i=0, 1, \dots, n)$ 来表示时, 则定积分的计算是比较困难的。

还有许多实际问题在求解其数学问题的解时, 虽然能够证明解的存在性与惟一性, 但要给出解析解则是很困难的。可见, 数学分析方法存在着一定的局限性。

怎样解决这类问题呢? 下面仅以一阶常微分方程的初值问题为例, 说明如何用数值计算方法来解决这类问题。

由一阶常微分方程可得到 x_n 点处的导数 $y'(x_n)$, 即:

$$y'(x_n) = f(x_n, y_n)$$

再利用导数和差商的近似关系

$$y'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \approx \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{x_{n+1} - x_n}$$

得到差分方程为:

$$\frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{x_{n+1} - x_n} = \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} = f(x_n, y_n)$$

从而得到一阶常微分方程解 $y = y(x)$ 的离散值的递推计算公式为:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))$$

由该递推公式,可以计算出一阶常微分方程在任意给定点 $x_k (k=1, 2, \dots)$ 的数值解 $y(x_k)$ 。

由此可见,一个连续的数学问题最终可以转化为一个离散的数学问题来解决,即连续的数学问题最终可按照一定的规则进行一系列的算术运算和逻辑运算而得到计算结果。这就是所谓的数值计算或科学计算。因此,数值计算方法就是研究如何把数学问题归结为数值计算的问题(即如何构造数值计算问题的算法),且当实际问题的精确解无法得到时,如何才能得到足够准确的数值解,以及解的特性和各种计算方法的优缺点及其适用范围。或者说,数值计算方法就是研究各种数学问题数值解法的理论和方法,包括计算方法的构造与求解过程的理论分析和算法结构。因此相对于数学分析而言,数值计算方法又被称为数值分析。数值计算方法是寻求数学问题近似解的方法、过程及其理论的一个重要数学分支。

应该注意,在本书中数值计算方法和计算方法在概念上是有所区别的。数值计算方法是指研究各种数学问题数值解法理论和方法的总称,是一门学科;而计算方法则是指具体解决某一数学问题的数值计算的方法和算法,两者不应混淆。

数值计算方法在科学研究和生产实践中得到了广泛应用。最近半个世纪以来,科学研究的实践使人们越来越清楚地认识到,当代科学研究方法论应该由理论、实验和科学计算三大环节所组成,科学计算已成为科学研究方法的重要组成部分。

例如,在科学计算中遇到的复杂问题可能是:

- (1) 采用数学分析方法太难的设计计算;
- (2) 需要反复多次的计算;
- (3) 采用人工计算太繁的设计计算;
- (4) 大量的数据处理。

这些计算问题仅仅依靠人工计算的方法是不现实的,甚至是不可能的,必须采用计算机来进行计算。由于计算机只能依据给定的指令(对一定数位的数)完成加、减、乘、除四则算术运算和一些逻辑运算,因此计算机特别适合于数值计算。随着计算机性能的不不断提高,计算机运算速度越来越快,存储数据的容量越来越大,人们往往更喜欢使用计算机来帮助解决实际问题。一个实际问题采用计算机来求解的具体步骤如图 1.1 所示。

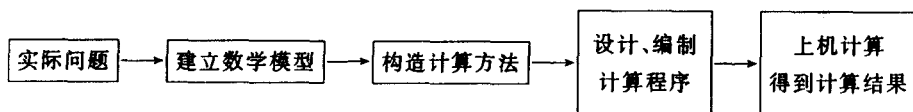


图 1.1 应用计算机解决实际问题的过程

因此,学好数值计算方法这门课程十分重要。

1.1.2 数值计算方法的特点

数值计算方法具有以下几个特点:

1) 具有理论和技术的二重性

数值分析是相对于数学分析(或理论分析)的一种数学方法,它不同于纯数学那样只研究数学本身的问题,而是着重研究数学问题的数值解法及其相关理论(数值解的收敛性、稳定性和误差分析等),但它仍然是以一定的数学理论为基础进行的。有些计算方法虽然在理论上并不完善,但通过实际计算、对比分析等手段,被证明是行之有效的经常会采用;而有些计算方法虽然在理论上较为完善,但通过实际计算是不可行的却常常要放弃。因此,数值计算方法既具有数学分析的理论性、抽象性与严谨性,又具有实际应用的技术性和可行性的特点。

2) 计算过程是面向计算机的

计算过程是面向计算机还是面向人工计算,存在着较大区别。随着计算机的迅速发展,数值计算方法应该面向计算机,应该根据数字计算机的特点(计算机只能进行加、减、乘、除四则算术运算和一些逻辑运算),提出实际可行的、有效的和计算复杂性(计算精度、时间复杂性和空间复杂性等)适当的计算方法。

3) 计算方法可以用数值实验证实

某些计算方法的优劣程度、可行性和有效性等完全可以通过数值实验得到证明和验证。数值实验和数学理论分析一样,都是数值计算方法的重要研究手段。

1.1.3 数值计算方法的常用算法

使用计算机进行数值计算,把对数学问题的求解运算转化为有限数位数的有限四则运算和逻辑运算,并对运算顺序有完整而准确的描述和规定,就是数值计算方法的算法。通常有离散化算法、递推算法、逼近算法和构造性算法等。

1. 离散化方法

离散化方法就是通过极限方法、逼近方法等基本思想和方法,把连续性的数学问题转化成离散的数学问题来处理。

例 1.1 定积分的数值计算方法:

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

解 由于计算机无法计算这个连续性的数学问题,故可将此问题转化为离散的数学问题来处理,即:

(1) 将区间 $[a, b]$ 分成 n 等分,即:

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b, \text{ 其中 } x_i = x_0 + ih (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$h = \frac{b-a}{n}$$

(2) 将每个小区间 $[x_{i-1}, x_i]$ ($i = 1, 2, \dots, n$) 所对应的小曲边形的面积 S_i 用小梯形面积近似代替(如图 1.2 所示),即:

$$S_i \approx \frac{h}{2} [f(x_{i-1}) + f(x_i)]$$

(3) 求和:

$$S = \sum_{i=1}^n S_i \approx \frac{h}{2} \sum_{i=1}^n [f(x_{i-1}) + f(x_i)] = \frac{h}{2} [f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)]$$

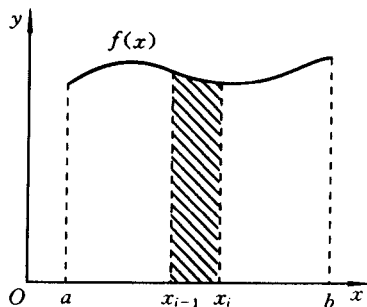


图 1.2 定积分近似计算

最后得到定积分的数值计算公式为:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b) \right]$$

2. 递推方法

递推方法就是构造关于离散变量之间的计算公式,并可以由某个已知的离散变量值(即初始值)逐步推导出所有的离散变量值。

例1.2 求多项式 $p_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$ 在给定点 x 处的值(当各项系数和 n 已知时)。

解 取中间变量 t 和 u , 设 $t_0 = 1, u_0 = a_0$, 则有:

$$\begin{aligned} t_1 &= xt_0 = x^1 & u_1 &= u_0 + a_1t_1 = a_0 + a_1x \\ t_2 &= xt_1 = x^2 & u_2 &= u_1 + a_2t_2 = a_0 + a_1x + a_2x^2 \\ t_3 &= xt_2 = x^3 & u_3 &= u_2 + a_3t_3 = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 \end{aligned}$$

最后可以得到:

$$\begin{cases} u_k = u_{k-1} + a_k t_k \\ t_k = x t_{k-1} \end{cases}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, n$$

其中, $t_0 = 1, u_0 = a_0$ 。显然,通过上述递推公式,可由 u_{k-1} 求得 u_k , 并且有 $p_n(x) = u_n$ 。

假设在递推化方法中, x_{n+1} 由 x_n 递推计算出来。如果当 n 趋向 ∞ 时, x_{n+1} 趋向某个常数 C , 则称之为迭代法。例如, 设有 $x_n = \frac{1}{2} \left(x_{n-1} + \frac{a}{x_{n-1}} \right)$ ($a > 0; x_0 > 0; n = 1, 2, 3, \dots$), 当 $n \rightarrow \infty$ 时, $x_n \rightarrow \sqrt{a}$, x_n 的递推计算公式即为迭代公式, 它可以用来计算 \sqrt{a} 的近似值。

3. 逼近方法

逼近是指用简单函数 $p(x)$ 的值近似代替函数 $f(x)$ 的值, $f(x)$ 称为被逼近函数, $p(x)$ 称为逼近函数, 两者的差 $e(x) = f(x) - p(x)$ 称为逼近误差或余项。

所谓简单函数是指可以用四则运算进行计算的函数, 如多项式、有理函数等。插值和拟合是常见的逼近方法。

例1.3 计算无理数 e 的近似值。

解 对于函数 $f(x) = e^x$, 在 $x=0$ 处用 Taylor 公式展开, 得

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots$$

取 $x=1$, 得

$$e = 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \dots + \frac{1}{n!} + \dots$$

这是一个无限求和过程, 无法进行实际计算。根据逼近方法, 可得到无理数 e 的计算公式

$$e \approx 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \dots + \frac{1}{n!}$$

再利用 Taylor 公式的余项进行误差估计, 即:

$$R_n(x) = e^x - \left(1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!} \right) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} x^{n+1}, \quad \xi \in (0, 1)$$

所以, 无理数 e 计算公式的误差为:

$$|R_n(1)| \leq \frac{e}{(n+1)!} < \frac{3}{(n+1)!}$$

它与 n 有关。使用逼近法时,一定要进行误差分析。本例中的逼近法常常称为截断法。

4. 构造方法

某些计算方法在证明一个数学问题的解的存在性时,可使用所谓构造式的方法。构造方法不仅能够证明解的存在,而且可以同时给出解的具体表达式(或近似计算公式)。

例 1.4 证明一元二次方程 $ax^2+bx+c=0, a \neq 0$, 当 $b^2-4ac > 0$ 时有两相异实根。

$$\text{证 } ax^2+bx+c = a\left(x+\frac{b}{2a}\right)^2 + \frac{4ac-b^2}{4a} = 0, \quad a\left(x+\frac{b}{2a}\right)^2 = \frac{b^2-4ac}{4a}$$

所以,当 $b^2-4ac > 0$ 时有两相异实根:

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2-4ac}}{2a}, \quad x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

应当注意,在实际解决一个具体问题时,往往会同时用到数值计算方法的几种算法。

1.1.4 数值计算方法的主要内容

能够用数值计算方法来解决的数学问题十分广泛。本书主要讨论以下主要内容:非线性方程的求根、插值与曲线拟合、数值积分、常微分方程的数值解法、线性方程组的数值解法等。

学习数值计算方法这门课程,应该针对要解决数学问题的类型,掌握其计算方法的基本原理、基本思想和方法技巧。在具体应用数值计算方法解决实际问题时,还要重视数值精度、收敛性和稳定性、计算量等问题,因为它是评价一个计算方法优劣的重要指标。最后通过例题学习和大量练习,学会灵活使用各种数值方法来解决实际的计算问题。

MATLAB 程序语言是科学计算的计算机高级编程语言,本书第 7 章系统而简明地介绍了 MATLAB 语言编程的基本内容,并且全国使用 MATLAB 语言编制有关数值计算方法的具体算法程序,附录 A 给出了部分数值计算方法的程序。

1.2 误差和有效数字

1.2.1 误差和误差限

在数值计算中使用的数通常有两种类型:一种是能够准确反映客观事物数量关系的精确数,如一个班级有 30 名学生,其中 $1/2$ 为男生, $1/2$ 为女生,男生拥有的电脑数为女生的 3 倍,等等,这些数和实际值之间没有任何差异;另一种是近似反映客观事物数量关系的近似数,如一本书重 0.15kg,一个物体长 20cm 等,如果改变观测方法、提高测量精度,这些数据虽然会更准确些,但仍然会和实际值之间存在着一定差异,这种差异就是误差。在数值计算中用到的数据大部分情形都是近似数,因此控制计算误差、提高计算精度是十分重要的问题。下面将讨论有关误差的问题。

1. 绝对误差和绝对误差限

设数 x^* 为精确数(精确值或真值),数 x 为其近似数(近似值),则

$$e(x) = x^* - x \quad (1.1)$$

称为近似值 x 的绝对误差。一般情况下,人们无法准确地知道精确数 x^* 的大小,但根据具体的测量和计算情况,如果总有

$$|e(x)| = |x^* - x| \leq \epsilon \quad (1.2)$$

成立,则称 ϵ 为近似值 x 的绝对误差限。显然有

$$x - \epsilon \leq x^* \leq x + \epsilon \quad (1.3)$$

这表明精确数介于某两个数之间。因此在工程上,精确值 x^* 常常可表示成另一种形式:

$$x^* = x \pm \epsilon \quad (1.4)$$

例 1.5 用一把最小刻度为 1mm 的尺子,测量桌子的长度,读出来的值是 $x = 1235\text{mm}$,这是桌子长度 x^* 的近似值,此近似值的绝对误差为:

$$|x^* - x| = |x^* - 1235| \text{mm} \leq \frac{1}{2} \text{mm}$$

所以

$$1234.5 \text{mm} \leq x^* \leq 1235.5 \text{mm}$$

这表明桌子长度的真值 x^* 在 $[1234.5, 1235.5]$ 之间,即

$$x^* = (1235 \pm 0.5) \text{mm}$$

这里,绝对误差限 ϵ 为近似值 x 末位的半个单位。

例 1.6 用游标卡尺测量某个物体的长度 x^* ,其读数是 $x = 12.56\text{mm}$ 。由于游标卡尺的最小刻度为 0.02mm,故物体的长度 x^* 应记为:

$$x^* = (12.56 \pm 0.02) \text{mm}$$

这里,绝对误差限 ϵ 为近似值 x 末位的 2 个单位。

绝对误差不足以刻画近似数的精确程度,如用游标卡尺测量一个物体的尺寸,其误差为 0.1mm 是不允许的,而测量一个人的身高,误差为 1mm 则是允许的。因此,要决定一个近似值的精确程度,除了绝对误差以外,还必须考虑此数本身的大小,即有相对误差的概念。

2. 相对误差与相对误差限

定义近似数 x 的相对误差为:

$$e_r(x) = (x^* - x) / x^*$$

由于精确数 x^* 在一般情形下无法得知,而 $x \approx x^*$,故相对误差常用下列定义:

$$e_r(x) = (x^* - x) / x \quad (1.5)$$

相应地,相对误差限 ϵ_r 定义为:

$$|e_r(x)| = \left| \frac{x^* - x}{x} \right| \leq \epsilon_r \quad (1.6)$$

1.2.2 有效数字

数学上常用“四舍五入”的法则将一个位数很多的数表示成一定位数的数。如果一个近似数的误差限是它某一位的半个单位,则称它准确到这一位(即该位数字是准确的、有效的和可靠的)。并且,从该位起直到前面第一个非零数字为止的所有数字都称为有效数字,即有:

定义 1.1 设 x^* 是一个精确数, x 是它的近似数,若

$$|x^* - x| < 1/2 \times 10^{-n} \quad (1.7)$$

就是说,用 x 近似表示 x^* 时准确到小数点之后第 n 位(精确度),并把从该位起到 x 的第一位非零数字之间的一切数字都叫做有效数字,并把有效数字的位数叫做有效数位。

例如,若将数 x 用规格化形式表示,则有:

$$x = \pm 0 \cdot a_1 a_2 a_3 \cdots a_{s-1} a_s \times 10^m \quad (a_1 \neq 0) \quad (1.8)$$

其中, s 为有效数字的位数, m 为阶数. m 的确定方法如下:

当 $|x| \geq 1$ 时,则 $m =$ 整数部分的位数;

当 $0.1 \leq |x| < 1$ 时,则 $m = 0$;

当 $|x| < 0.1$ 时,则 $m = -$ (小数点后零的个数).

若

$$|x - x^*| < 1/2 \times 10^{-n} = 1/2 \times 10^{-(s-m)} = 1/2 \times 10^{m-s}, \quad 1 \leq s \leq k \quad (1.9)$$

则 x 的有效数位为:

$$s = n + m \quad (1.10)$$

应用公式(1.9)和(1.10)可以判断一个数的某一位数字是否为有效数字,从而可确定该数的有效数位.

例 1.7 确定数 0.08698, 0.8698, 869.8 和 8698 的有效数位.

解 对于数 0.08698, $n = 5, m = -1, s = n + m = 4$;

对于数 0.8698, $n = 4, m = 0, s = n + m = 4$;

对于数 869.8, $n = 1, m = 3, s = n + m = 4$;

对于数 8698, $n = 0, m = 4, s = n + m = 4$.

一个数精确到小数点后 n 位,并不表明它一定有 n 位有效数字.应注意有效数位 s 的计算.

例 1.8 对于圆周率 $\pi = 3.1415926 \cdots$,用四舍五入取小数点后 4 位时,近似值为 3.1416,此时

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

即有 $m = 1, n = 4$,所以有效数位 $s = n + m = 5$,绝对误差限为 $1/2 \times 10^{-4}$.

如果取 $\pi = 3.14$,则 $m = 1, n = 2$,有效数位 $s = n + m = 3$,其绝对误差限为 $1/2 \times 10^{-2}$.

例 1.9 设 $x^* = 8.000033$,若取 $x = 8.0000$,则

$$|x - x^*| = 0.000033 = 0.33 \times 10^{-4} < 1/2 \times 10^{-4} = 1/2 \times 10^{1-5}$$

于是有 $m = 1, s = 5, n = s - m = 5 - 1 = 4$.所以,8.0000 的有效数字为 5 位,它精确到小数点后 4 位.

例 1.10 设 $x^* = 30.4500364 \cdots$,若取 $x = 30.45004$,则

$$|x - x^*| = 0.0000036 = 0.36 \times 10^{-5} < 1/2 \times 10^{-5} = 1/2 \times 10^{2-7}$$

所以,30.45004 的有效数字为 7 位,它精确到小数点后 5 位.

1.2.3 相对误差和有效数位之间的关系

根据有效数字和相对误差的概念可以得出两者之间的关系.

定理 1.1 若近似数 $x = \pm 0 \cdot a_1 a_2 a_3 \cdots a_{s-1} a_s \times 10^m$ ($a_1 \neq 0$) 具有 s 位有效数字,则其相对误差为:

$$e_r(x) \leq \epsilon_r = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-s+1} \quad (1.11)$$

证明 由于 x 有 s 位有效数字,故可设

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-s}$$