



SHUZHJ JISUAN FANGFA LILUN YU SHIJIAN YANJIU

数值计算方法理论 与实践研究

冯天祥 编著



西南交通大学出版社
<http://press.swjtu.edu.cn>

数值计算方法 理论与实践研究

冯天祥 编 著

西南交通大学出版社

• 成 都 •

图书在版编目 (C I P) 数据

数值计算方法理论与实践研究 / 冯天祥编著. —成都:
西南交通大学出版社, 2005.4
ISBN 7-81104-019-0

I. 数... II. 冯... III. 数值计算—计算方法
IV. 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2004) 第 134554 号

数值计算方法理论与实践研究

冯天祥 编著

责任编辑 张宝华

责任校对 李 梅

封面设计 何东琳设计工作室

西南交通大学出版社出版发行

(成都二环路北一段 111 号 邮政编码: 610031 发行部电话: 028-87600564)

<http://press.swjtu.edu.cn>

E-mail: cbsxx@swjtu.edu.cn

成都蜀通印务有限责任公司印刷

*

开本: 850 mm × 1 168 mm 1/32 印张: 12.25

字数: 318 千字

2005 年 4 月第 1 版 2005 年 4 月第 1 次印刷

ISBN 7-81104-019-0 / O · 003

定价: 22.50 元

图书如有印装问题 本社负责退换

版权所有 盗版必究 举报电话: 028-87600562

序 言

数值方法是研究数学问题如何进行数值计算的学问. 任何数学问题, 要进行数值计算, 都得把问题归结成一串数的加、减、乘、除运算, 而参与运算的数, 只能是有限位数. 因此运算结果常常跟数学结果不完全一样, 数值方法就是要研究如何使两者差别不太大. 数学的规律跟数值计算的规律, 有时会有差别. 譬如, 给定一个光滑函数 $f(x)$ 的导数

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

从数学上来说, 对于任意给定的正小数 ε , 可以找到一个 δ 当 $|\Delta x| \leq \delta$ 时, $\left| \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} - f'(x) \right| \leq \varepsilon$, 即 $\left| \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} - f'(x) \right|$ 任意小都可达到, 只要 $|\Delta x|$ 足够小. 给定 $f(x) = e^x$, 取 $x = 1$, 则自然成立

$$f'(1) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(1+h) - f(1)}{h} = e = 2.71828 \dots$$

可以证明: $g(h) = \frac{e^{1+h} - e}{h}$ 是 h 的单调上升函数, 也即 h 越小, $g(h)$ 越接近 e . 可是取 9 位数字在计算机上计算的结果是: 当 $h = 10^{-5}$ 时, 效果较好, 当 h 更小时, 效果则越来越差, 如表 1 所示.

表 1

h	$g(h)$	e	误差
10^0	4.670 774 46	2.718 281 83	1.95×10^0
10^{-1}	2.858 843 80	2.718 281 83	1.41×10^{-1}

续表 1

h	$g(h)$	e	误差
10^{-2}	2.731 919 29	2.718 281 83	1.36×10^{-2}
10^{-3}	2.719 879 39	2.718 281 83	1.60×10^{-3}
10^{-4}	2.720 356 23	2.718 281 83	2.07×10^{-3}
10^{-5}	2.717 972 04	2.718 281 83	3.10×10^{-4}
10^{-6}	2.662 604 61	2.718 281 83	9.57×10^{-3}
10^{-7}	4.768 372 06	2.718 281 83	2.05×10^0
10^{-8}	0.000 000 00	2.718 281 83	2.72×10^0

从表 1 可以看出, 单调性也被破坏了.

考察三个式子 $A = \frac{1 - \cos x}{x^2}$, $B = \frac{\left(\frac{\sin x}{x}\right)^2}{1 + \cos x}$, $C = \frac{\sin^2\left(\frac{x}{2}\right)}{x^2}$, 从

数学上看, 容易验证它们是恒等的, 即对不同的 x 有相同的值, 但其数值运算的结果却并不一样, 结果如表 2 所示.

表 2

x	A	B	C
0.200 00	0.498 336	0.498 336	0.498 336
0.020 00	0.499 971	0.499 983	0.499 983
0.002 00	0.501 052	0.500 000	0.500 000
0.000 20	0.558 794	0.500 000	0.500 000
0.000 02	0.500 000	0.500 000	0.500 000
3.141 59	0.177 326	0.177 326	0.177 326
3.161 59	0.200 067	0.200 064	0.200 067

表 2 中有下划线的数字表示不正确. 三个恒等式, 计算结果却不一样. 由此可以想到, 对于一个数学问题可能有多种方法, 但是采用不同的数值方法计算的结果可能是不一样的. 对于一个

数值问题，追求好的数值方法来计算是需要研究的。

对于一座建筑物中的横梁，曾有人求在向下压力作用下梁的位移。从常识来说，计算出的位移，应该是向下的。但实际计算出来的位移，在有些地方却是向上的。显然有错。他认真检查计算过程，没有发现错误，那么究竟是怎么一回事？那人来找我，让我分析一下。我研究后，告诉他：他求梁的位移问题，最后归结为一个线性代数方程组的求解问题。但是这个方程组的系数矩阵，非常病态，即条件数非常大，这样即使很小的误差影响也会很大。建议他用双倍位小数进行计算，就不会出现这种问题了。他按此种方法重新计算，果然获得成功。

上述这些例子，说明数值计算也不是很简单的，是很有学问的。

很多理工科的学生毕业后在工作中也会遇到各种各样的数学问题要进行计算。因此在大学里开设数值计算课是有必要的。学过以后，碰到计算问题，就会有章法。但是大学生要学的东西太多了，除非是专门学计算数学的，一般学生只能花少量时间，学到基本的数值计算内容。

这本“数值计算方法理论和实践研究”就是为适应这种需要而写的。它有以下几个特点：

(1) 少而精，简明扼要。内容共分八章，把通常“数值逼近”教材中的内容都讲了，还加上了常微分方程的数值解的内容，线性方程组求解的内容。但有些定理只讲结论，不讲证明。这样学生不必在定理的证明上花很大精力，减轻了学生的负担。

(2) 便于学生学到手。每章都有“要点提示”，“基本要求”，使学生知道哪些是一定要掌握的。还有“例题选讲”，通过例题使学生对内容有感性认识，容易掌握内容。如果要进一步提高，还有“研究与提高”部分，指明了进一步学习的方向。

(3) 每章设置“数值实验”内容，通过实验，使学生学会本章内容如何上机计算，而且使学生对数值计算的规律也有进一步

的认识.

(4) 配有丰富的习题和习题解答. 对教和学都方便, 也便于自学.

以上几点也是本书的特色. 我看到的数值计算的教材很多, 但具备这些特色的, 还是第一本. 相信它会受到老师和同学们的欢迎.

蒋尔雄

2005 年 1 月

目 录

第一章 数值计算方法与误差分析	1
第一节 要点提示和基本要求	1
第二节 研究与提高	10
第二章 非线性方程求根的数值方法	11
第一节 要点提示和基本要求	11
第二节 研究与提高	32
第三章 线性方程组的求解与误差分析	35
第一节 要点提示和基本要求	35
第二节 研究与提高	81
第四章 插值方法与曲线拟合	87
第一节 要点提示和基本要求	87
第二节 研究与提高	136
第五章 数值逼近	144
第六章 数值积分	169
第一节 要点提示和基本要求	169
第二节 研究与提高	196
第七章 微分方程的数值解法	207
第一节 要点提示和基本要求	207
第二节 研究与提高	240

第八章 求矩阵特征值的数值方法	245
第九章 试 题	271
第一节 模拟试题	271
第二节 模拟试题解答	303
第三节 自我测试题	364
后 记	379
参考文献	382

第一章 数值计算方法

与误差分析

第一节 要点提示和基本要求

一、要点提示

(一) 误差的来源

1. 模型误差

定量分析时, 抓住事物的主要因素而忽略其次要因素, 建立起来的数学模型与现实原型之间必然有着某些差距和差异, 它是现实原型的近似. 称这种误差为模型误差.

2. 截断误差

在将连续问题离散化的过程中, 在将无限问题有限化的过程中, 由于计算机只能完成有限次运算而产生的误差称为截断误差.

3. 数值运算误差

对数进行运算, 无论是人工还是计算机, 都只能计算有限位数, 与原始数据之间可能有些误差, 而每一步计算的过程也可能因四舍五入而产生误差, 我们称这种误差为数值运算误差或舍入误差.

在数值计算中, 主要研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响, 而不考虑模型误差.

(二) 误差的基本概念

1. 绝对误差

准确值 x 与其近似值 x^* 之差称为近似数 x^* 的绝对误差 (简称误差), 记为 $e(x^*)$, 简记为 e^* . 但一般来说, 不能准确知道 $e(x^*)$ 的大小, 可以通过测量或计算来估计其绝对值的上界. 如果 $|e(x^*)| = |x - x^*| \leq \varepsilon(x^*)$, 那么 $\varepsilon(x^*)$ 叫做近似数 x^* 的绝对误差限, 简称误差限. 简记为 ε^* .

2. 相对误差

称 $e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x}$ 为近似数 x^* 的相对误差, 简记为 e_r^* . 如果 $|e_r(x^*)| \leq \varepsilon_r(x^*)$, 则称 $\varepsilon_r(x^*)$ 为近似数 x^* 的相对误差限, 简记为 ε_r^* . 在实际运用中, x 通常是不知道的, 因而常将相对误差改写成 $e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x^*}$. 相对误差一般用百分数来表示.

3. 有效数字

设数 x 的近似值

$$x^* = \pm 0.x_1x_2 \cdots x_n \cdots \times 10^m \quad (1.1)$$

其中: x_i ($i=1, 2, \cdots$) 是 0 到 9 间的数字; $x_1 \neq 0$; m 是整数. 如果

$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$, 则称 x_n 是有效数字.

有效数字与相对误差限的关系:

(1) 如果 x 的近似数 x^* 写成式 (1.1), 则

① 若 x_n 是有效数字, 那么相对误差 $e_r(x^*)$ 满足

$$|e_r(x^*)| \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)}$$

② 若相对误差 $e_r(x^*)$ 满足

$$|e_r(x^*)| \leq \frac{1}{2(x_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

则 x_n 是有效数字.

(2) 如果 x 的近似数 x^* 写成式 (1.1), 则

① 若 x^* 最多只有 n 位有效数字, 则 x^* 的相对误差满足

$$|e_r(x^*)| > \frac{1}{2(x_1+1)} \times 10^{-n}$$

② 若 x^* 的相对误差满足

$$|e_r(x^*)| > \frac{1}{2x_1} \times 10^{-n}$$

则 x^* 最多只有 n 位有效数字.

4. 可靠数字

如果 x 的近似数 x^* 写成式 (1.1), 并且 $|x - x^*| \leq 10^{m-n}$, 则称 x_n 是可靠数字.

可靠数字与相对误差限之间有如下关系:

(1) 如果 x 的近似数 x^* 写成式 (1.1), 则

① 若 x_n 是可靠数字, 那么相对误差 $e_r(x^*)$ 满足

$$|e_r(x^*)| \leq \frac{1}{x_1} \times 10^{-(n-1)} \quad (1.2)$$

② 若相对误差 $e_r(x^*)$ 满足

$$|e_r(x^*)| \leq \frac{1}{x_1+1} \times 10^{-(n-1)} \quad (1.3)$$

则 x_n 是可靠数字.

(2) 如果 x 的近似数 x^* 写成式 (1.1), 则

① 若 x^* 最多只有 n 位可靠数字, 则 x^* 的相对误差满足

$$|e_r(x^*)| > \frac{1}{x_1+1} \times 10^{-n} \quad (1.4)$$

② 若 x^* 的相对误差满足

$$|e_r(x^*)| > \frac{1}{x_1} \times 10^{-n} \quad (1.5)$$

则 x^* 最多只有 n 位可靠数字.

(三) 数值运算中应遵循的几个原则

由于在数值运算中, 不可避免地会产生误差, 如果懂得产生

误差的某些规律,就可在一定程度上控制误差,这是我们应该追求的基本目标.因此,在进行数值运算时,要遵循以下原则:

- (1) 要避免相近两数相减,防止有效数字丢失.
- (2) 要防止大数吃掉小数.
- (3) 绝对值相对太小的数不宜作除数.
- (4) 要尽量简化运算步骤,减少运算次数.
- (5) 要选取数值稳定的算法.

二、基本要求

(1) 了解数值计算方法的基本概念、特点和该学科的地位和作用.

(2) 了解误差的来源.

(3) 结合实例理解并掌握绝对误差、相对误差和有效数字、可靠数字及其相互间的关系.

(4) 熟悉误差分析的方法和掌握减少运算误差应遵循的基本原则.

三、例题选讲

例 1 求 $\sqrt{3}$ 的近似值,使其绝对误差限精确到 $\frac{1}{2} \times 10^{-3}$.

解 因为 $\sqrt{3} = 1.732\ 05 \dots$, 由于 $\varepsilon^*(1.732) = |\sqrt{3} - 1.732| \leq 0.000\ 05$, 所以 $x^* = 1.732$.

例 2 设 $x^* = -2.18$, $y^* = 2.120\ 0$ 分别是由准确值 x 和 y 经过四舍五入得到的近似值,问 $e(x^*)$, $e(y^*)$, $e_r(x^*)$, $e_r(y^*)$ 分别是多少?

解
$$e(x^*) = 0.005, \quad e(y^*) = 0.000\ 05$$

$$e_r(x^*) = \frac{0.005}{2.18} \approx 0.23\%, \quad e_r(y^*) = \frac{0.000\ 05}{2.120\ 0} \approx 0.002\ 4\%$$

例 3 已知近似数 x^* 有 2 位有效数字,求其相对误差限.

解 由式 (1.2), 已知 $n = 2$, 但近似数 x^* 的第一位有效数

字 x_1 未知, 所以可按第一位有效数字出现的最不利的情况估计, 即令 $x_1 = 1$, 则 $\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)} = \frac{1}{2 \times 1} \times 10^{-(2-1)} = 5\%$, 故 x^* 的相对误差限为 5%.

例 4 求方程 $x^2 - 16x + 1 = 0$ 的较小正根, 要求有 3 位有效数字.

解 求解方程 $x^2 - 16x + 1 = 0$, 得两根 $x_1 = 8 - \sqrt{63}$, $x_2 = 8 + \sqrt{63}$, 故此方程的较小正根为 $x_1 = 8 - \sqrt{63}$. 若取 $\sqrt{63} \approx 7.94$, 且有 3 位有效数字, 则 $x_1 = 8 - \sqrt{63} \approx 0.06$, 只有 1 位有效数字, 若改用 $x_1 = \frac{1}{x_2} = \frac{1}{8 + \sqrt{63}} \approx \frac{1}{15.94} \approx 0.0627$, 就有 3 位有效数字.

四、习 题

1. 填空题:

(1) 精确值 $x = 36.85$ 用四舍五入保留 3 位有效数字的近似数为_____.

(2) 数值运算中必须遵循以下原则: _____, _____和_____, _____.

(3) 设精确值 $x = 256.356$ 的近似值为 256.36, 此近似值有_____位有效数字, 其相对误差限为_____.

2. 要使 $\sqrt{11}$ 的近似值的相对误差限不超过 0.1%, 应取几位有效数字?

3. 求方程 $x^2 - 116x + 1 = 0$ 的较小正根, 要求至少有 3 位有效数字.

4. 设有 3 个近似数 $a^* = 2.31$, $b^* = 1.93$, $c^* = 2.24$, 计算:

$$A^* = a^* + b^*c^*, \quad \varepsilon(A^*), \quad \varepsilon_r(A^*)$$

5. 设 $x > 0$, x 的相对误差为 δ , 求 $\ln x$ 的误差.

6. 计算球的体积, 要使相对误差限为 1%, 问测量半径 R 时, 允许的相对误差限是多少?

7. 设 $Y_0 = 28$, 按递归公式 $Y_n = Y_{n-1} - \frac{1}{100}\sqrt{783}$ ($n = 1, 2, \dots$) 计算 Y_{100} . 若取 $\sqrt{783} \approx 27.982$, 问计算 Y_{100} 将有多大的误差?

8. 序列 $\{y_n\}$ 满足关系式 $y_n = 10y_{n-1} - 1$ ($n = 1, 2, \dots$), 若 $y_0 = \sqrt{2} \approx 1.41$, 计算到 y_{10} , 误差有多大? 这个算法稳定吗?

9. 计算 $f = (\sqrt{2} - 1)^6$, 取 $\sqrt{2} \approx 1.4$, 利用下列算式进行计算, 得到的结果哪一个最好?

$$\frac{1}{(\sqrt{2} + 1)^6}, (3 - 2\sqrt{2})^3, \frac{1}{(3 + 2\sqrt{2})^3}, 99 - 70\sqrt{2}$$

10. 设函数 $f(x) = \ln(x - \sqrt{x^2 - 1})$, 求 $f(30)$ 的值. 若开平方用 6 位函数表, 求对数时误差有多大? 如果改用等价公式 $\ln(x - \sqrt{x^2 - 1}) = -\ln(x + \sqrt{x^2 - 1})$ 计算, 误差有多大?

五、习题解答

1. 填空题:

(1) 精确值 $x = 36.85$ 用四舍五入保留 3 位有效数字的近似数为 36.8.

(2) 数值运算中必须遵循以下原则: 避免相近两数相减、防止有效数字丢失, 防止大数吃掉小数 和 绝对值相对太小的数不宜作除数, 尽量简化运算步骤、减少运算次数, 选取数值稳定的算法.

(3) 设精确值 $x = 256.356$ 的近似值为 256.36, 此近似值有 5 位有效数字, 其相对误差限为 0.001 56%.

2. 解 因为 $\sqrt{11} = 3.316\ 624 \dots$, $x_1 = 3$, 设所求近似数有 n

位有效数字, 则

$$\varepsilon_r = \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)} \Rightarrow \frac{1}{2 \times 3} \times 10^{-(n-1)} \leq 0.1\% \Rightarrow n \geq 5 \Rightarrow \sqrt{11} = 3.3166$$

3. 解 利用求根公式有 $x_1 = 58 + \sqrt{3363}$, $x_2 = 58 - \sqrt{3363}$, 所以较小正根为 $x_2 = 58 - \sqrt{3363}$, 直接计算通常不能达到要求, 取

$$x_2 = \frac{1}{x_1} = \frac{1}{58 + \sqrt{3363}} \approx 8.6213 \times 10^{-3}, \text{ 至少具有 4 位有效数字.}$$

$$4. \text{ 解 } A^* = 2.31 + 1.93 \times 2.24 = 6.6332$$

$$\begin{aligned} \varepsilon(A^*) &\approx \varepsilon(a^*) + |b^*| \varepsilon(c^*) + |c^*| \varepsilon(b^*) \\ &= 0.005 + 0.005(1.93 + 2.24) = 0.02585 \end{aligned}$$

$$\varepsilon_r(A^*) = \frac{\varepsilon(A^*)}{|A^*|} \approx \frac{0.02585}{6.6332} \approx 0.39\%$$

因为 $\varepsilon(A^*) = 0.02585 < 0.05$, 所以 A^* 中有 2 位有效数字.

$$5. \text{ 解 } \ln x - \ln x^* = \ln \frac{x}{x^*} = \ln \frac{x - x^* + x^*}{x^*} = \ln(\delta + 1) \approx \delta$$

$$6. \text{ 解 } e_r^*(V) = \frac{\frac{4}{3}\pi R^3 - \frac{4}{3}\pi R^{*3}}{\frac{4}{3}\pi R^3} \approx \frac{R - R^*}{R} \cdot \frac{R^2 + R^*R + R^{*2}}{R^2}$$

$$\approx \frac{R - R^*}{R} \cdot \frac{3R^2}{R^2} = \frac{R - R^*}{R} \cdot 3 = 1\%$$

$$\Rightarrow \frac{R - R^*}{R} = \frac{1}{300}$$

即测量半径 R 时, 允许的相对误差限是 $\frac{1}{300}$.

$$7. \text{ 解 } \text{ 设 } Y = \sqrt{783}, Y^* = 27.983, \delta = |Y - Y^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

$$Y_0 = 28, Y_0^* = 28, \delta_0 = |Y_0 - Y_0^*| = 0$$

$$|Y_1 - Y_1^*| = \left| \left(28 - \frac{1}{100} \sqrt{783} \right) - \left(28 - \frac{1}{100} \times 27.983 \right) \right| \leq \frac{1}{100} \delta$$

$$\begin{aligned} |y_2 - y_2^*| &= \left| \left(y_1 - \frac{1}{100} \sqrt{283} \right) - \left(y_1^* - \frac{1}{100} \times 27.983 \right) \right| \\ &= \left| (y_1 - y_1^*) - \frac{1}{100} (y_1 - y_1^*) \right| \leq \frac{1}{100} \delta + \frac{1}{100} \delta = \frac{2\delta}{100} \end{aligned}$$

⋮

于是有

$$|y_n - y_n^*| \leq \frac{n\delta}{100}$$

从而

$$|y_{100} - y_{100}^*| \leq \frac{100}{100} \delta = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

8. 解 $y_0 = \sqrt{2}$, $y_0^* = 1.41$, $|y_0 - y_0^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \delta$, 于是

$$|y_1 - y_1^*| = |10y_0 - 1 - 10y_0^* + 1| = 10|y_0 - y_0^*| \leq 10\delta$$

$$|y_2 - y_2^*| = |10y_1 - 1 - 10y_1^* + 1| = 10|y_1 - y_1^*| \leq 10^2 \delta$$

⋮

一般地,

$$|y_n - y_n^*| \leq 10^n \delta$$

因此计算到 y_{10} 其误差限为 $10^{10} \delta$, 可见这个计算过程是不稳定的.

9. 解 取 $\sqrt{2} \approx 1.4$, $(\sqrt{2} - 1)^6 \approx 0.005\,050\,6 \cdots$, 则

$$\frac{1}{(\sqrt{2} + 1)^6} \approx \frac{1}{(1.4 + 1)^6} = \frac{1}{2.4^6} \approx 0.005\,232\,8$$

$$(3 - 2\sqrt{2})^3 \approx (2 - 2 \times 1.4)^3 = 0.008$$

$$\frac{1}{(3 + 2\sqrt{2})^3} \approx \frac{1}{(3 + 2.8)^3} \approx 0.005\,125\,3$$

$$99 - 70\sqrt{2} \approx 99 - 70 \times 1.4 = 1$$

经比较, 以 $\frac{1}{(3 + 2\sqrt{2})^3}$ 计算的结果最好.