黄世莹　刘廷建　编著

METHODS OF NUMERICAL COMPUTATION

数值计算方法

成都科技大学出版社

工科数学系列教材之一

数值计算方法

Methods of Numerical Computation

黄世莹　刘廷建　编著

成都科技大学出版社

(川)新登字 015 号
责任编辑：王泽彬
封面设计：罗　光

内容简介

本书是为工科院校各专业普遍开设的"数值计算方法"课程编写的教材。其主要内容：方程求根；线性方程组的数值解；插值与最小二乘逼近；数值微分与数值积分；常微分方程数值解及数值计算方法的编程方法与技巧。每章附有难易适中的习题。

本书的特点在于介绍基本数值计算方法的同时，还着重介绍了使用计算机进行科学计算的编程方法与技巧。该书可作工科院校各专业的教材，也可供有关的工程技术人员参考。

数值计算方法

黄世莹　刘廷建　编著

成都科技大学出版社出版发行
广汉市印刷厂印刷
开本：787×1092　1/32　印张：9.1875
1997 年 8 月第一版　1997 年 8 月第一次印刷
字数：222 千字　印数：1—4850
ISBN7－5616－3434－x/O·260
定价：10.00 元

前　言

在现代科学研究和工程设计中，电子计算机已成为不可缺少的有力工具。人们也愈来愈认识到了科学计算是科学研究的第三种方法，是现代科技人员应掌握的基本功。因此，工科大学的学生，学习计算机常用数值计算方法的知识是十分必要的，是现代科学教育的一部分。

本书是在多年讲授该课程的基础上形成的，在内容取舍上，力求精练，系统地介绍各类数值计算问题，重点介绍电子计算机上常用的基本计算方法的构造和使用的方法，并重视理论联系实际。本书中有应用实例，及部分主要算法的编程与例题，还专门安排了计算实习的有关内容。我们认为只要牢固地掌握了这些计算方法的基础，便不难进一步学习更新、更广、更深的内容。

本书的读者对象是高等学校工科二年级或以上年级学生以及与科学计算相关的工程技术人员。该教材是我校工科数学系列课程改革的教材之一，目的是使读者对数值计算方法的构造和使用能有较深的体会。

本书的编写与出版得到了四川联合大学（四川大学，成都科技大学）马季刚教授和王明慈教授的关心和支持，在此深表感谢。本书由清华大学李庆扬教授和天津大学杨凤翔教授评审，他们以认真负责的精神，对本书提出了许多宝贵意见和建议，编者谨向他们表示诚挚的谢意。

本书第1至5章由黄世莹编写，6章、7章及习题的选配由刘廷建编写。由于作者水平有限，缺点在所难免，恳请读者批评指正。

编　者

1995年12月

目　录

第1章　绪论

1.1　数值计算方法的任务及意义 ………………………… (1)
1.2　误差及有关概念 ……………………………………… (2)
1.2.1　误差的来源 ………………………………………… (2)
1.2.2　绝对误差与相对误差 …………………………… (3)
1.2.3　有效数字 …………………………………………… (4)
1.3　数值计算中必须注意的几个问题 ………………… (7)
1.3.1　要避免两相近数相减 …………………………… (7)
1.3.2　要避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法………………………………………………………… (8)
1.3.3　要防止大数“吃掉”小数 ………………………… (8)
1.3.4　简化计算步骤以减少运算次数 ………………… (9)
习题一 ……………………………………………………… (11)

第2章　方程求根

2.1　引言………………………………………………………… (13)
2.1.1　描图法…………………………………………………… (14)
2.1.2　逐步搜索法……………………………………………… (15)
2.2　二分法…………………………………………………… (15)
2.2.1　二分法算法…………………………………………… (18)
2.3　迭代法…………………………………………………… (19)
2.3.1　迭代过程的收敛性…………………………………… (19)

2.3.2 迭代过程的收敛速度和加速收敛的方法……… (25)
2.4 牛顿法…………………………………………… (30)
2.4.1 牛顿法计算公式……………………………… (30)
2.4.2 Newton 法的局部收敛性……………………… (32)
2.5 弦割法…………………………………………… (36)
习题二 ……………………………………………… (38)

第3章 线性方程组的数值解法

3.1 引言…………………………………………… (41)
3.2 消去法…………………………………………… (43)
3.2.1 Gauss 消去法………………………………… (43)
3.2.2 Gauss 列主元消去法………………………… (48)
3.3 直接三角分解法………………………………… (52)
3.3.1 消去法与矩阵的初等变换…………………… (52)
3.3.2 解线性方程组的直接三角分解法…………… (56)
3.3.3 改进平方根法………………………………… (60)
3.3.4 追赶法………………………………………… (65)
3.4 向量和矩阵的范数……………………………… (70)
3.4.1 向量的范数…………………………………… (70)
3.4.2 矩阵的范数…………………………………… (72)
3.4.3* 方程组的性态、条件数…………………… (75)
3.5 迭代法…………………………………………… (78)
3.5.1 Jacobi 迭代法………………………………… (78)
3.5.2 Gauss－Seidel 迭代法……………………… (81)
3.5.3 迭代公式的矩阵表示………………………… (83)
3.5.4 迭代法的收敛性……………………………… (84)
3.5.5* 超松驰迭代法……………………………… (90)

习题三 …………………………………………………………… (94)

第4章 插值法与最小二乘法

4.1 引言…………………………………………………………… (99)
4.1.1 多项式插值问题的基本提法……………………… (99)
4.1.2 插值多项式的存在唯一性 ……………………… (100)
4.2 Lagrange 插值多项式 ………………………………… (102)
4.2.1 插值基函数 ……………………………………… (102)
4.2.2 Lagrange 插值多项式的求法 …………………… (103)
4.2.3 插值多项式的余项 ……………………………… (107)
4.3 差商及牛顿插值公式 ………………………………… (109)
4.4 埃尔米特插值 ………………………………………… (114)
4.4.1 二点三次 Hermite 插值多项式 ………………… (114)
4.4.1 三点三次带一个导数值的 Hermite 多项式 … (117)
4.5 分段插值法 …………………………………………… (118)
4.5.1 高次插值多项式的龙格现象 …………………… (118)
4.5.2 分段低次插值 …………………………………… (119)
4.6 三次样条插值 ………………………………………… (121)
4.6.1 三次样条插值函数 ……………………………… (121)
4.6.2 三次样条插值函数的求法 ……………………… (123)
4.7 曲线拟合的最小二乘法 ……………………………… (128)
4.7.1 什么是最小二乘法 ……………………………… (128)
4.7.2 最小二乘解的求法 ……………………………… (129)
习题四…………………………………………………………… (138)

第5章 数值积分与数值微分

5.1 等距节点求积公式 …………………………………… (143)

5.1.1　构造数值求积公式的基本思想 …………………… (143)
5.1.2　等距节点的插值型求积公式 …………………… (145)
5.1.3　插值型求积公式的截断误差 …………………… (149)
5.1.4　求积公式的代数精度 …………………………… (152)
5.1.5　复化求积公式及其截断误差 …………………… (154)
5.2　龙贝格算法 ………………………………………… (159)
5.2.1　梯形法的区间逐次分半算法 …………………… (159)
5.2.2　龙贝格算法 ……………………………………… (162)
5.3　数值微分 …………………………………………… (167)
5.3.1　中点公式 ………………………………………… (167)
5.3.2　插值型求导公式 ………………………………… (169)
5.3.3　利用三次样条插值函数求数值导数 …………… (173)
习题五 ………………………………………………………… (174)

第6章　常微分方程数值方法

6.1　引　言 ……………………………………………… (177)
6.2　欧拉方法 …………………………………………… (178)
6.2.1　欧拉公式 ………………………………………… (178)
6.2.2　隐式欧拉公式 …………………………………… (182)
6.2.3　两步欧拉格式 …………………………………… (183)
6.2.4　改进的欧拉格式 ………………………………… (184)
6.3　龙格—库塔方法 …………………………………… (185)
6.3.1　龙格—库塔方法的基本思想 …………………… (185)
6.3.2　二阶龙格—库塔方法 …………………………… (186)
6.3.3　三阶龙格—库塔公式 …………………………… (188)
6.3.4　四阶龙格—库塔公式 …………………………… (190)
6.4*　稳定性、收敛性和误差估计 …………………… (191)

6.4.1 稳定性 …………………………………………… (191)
6.4.2 收敛性与误差估计 ……………………………… (193)
6.5 线性多步法 ……………………………………………… (195)
6.6 一阶方程组的情形 ……………………………………… (198)
习题六………………………………………………………… (200)
第7章 数值计算方法实验与应用
7.1 引言 ……………………………………………………… (202)
7.1.1 算法与应用 …………………………………………… (202)
7.1.2 环境 …………………………………………………… (202)
7.2 基本的数值计算方法的实现 …………………………… (203)
7.2.1 基本算法及相应的程序设计方法和语句 …… (203)
7.2.2 基本算法实例 ……………………………………… (208)
7.3 进一步数值计算方法编程 ……………………………… (223)
7.3.1 设计方法 ……………………………………………… (223)
7.3.2 程序设计实例 ………………………………………… (225)
7.4 数值计算方法软件系统设计 …………………………… (240)
7.4.1 逐步求精的设计方法 ………………………………… (240)
7.4.2 基本数值计算方法的菜单控制 ……………………… (241)
7.4.3 表达式分析——实现数值计算方法软件的封装 ………………………………………………… (271)
习题七………………………………………………………… (281)
参考书目…………………………………………………… (284)

第1章 绪 论

1.1 数值计算方法的任务及意义

科学计算是当代科学研究与工程技术中解决问题的重要手段和途径.科学计算的全过程如下.

$\boxed{\text{实际问题}} \rightarrow \boxed{\text{建立数学模型}} \rightarrow \boxed{\text{数值计算方法}} \rightarrow \boxed{\text{程序设计}} \rightarrow \boxed{\text{上机计算出数值结果}}$

为建立起来的数学模型制订或选择便于在计算机上实现的数值计算方法是科学计算的重要环节.所以,数值计算方法的任务就是构造能通过计算机有效地算出数值结果的算法并研究有关的理论,它是一门与计算机密切结合且实用性很强的课程.

科学技术的发展提出了大量复杂的数值计算问题,这些问题的解决必须依靠电子计算机.使用计算机通过计算方法或模拟的手段去解决科学或工程中数值问题的科学计算,已成为科学研究、工程设计等越来越不可少的一个环节,它是继"实验"、"理论研究"之后当代科学研究的第三种方法.

在国防尖端的一些科研项目,核武器的研制,导弹的发射,天气预报,飞机、造船工业……等领域中都离不开"科学计算".如今,应用计算机从事科学计算已成为工程师和广大技术人员应具备的基本技能.本书将向读者介绍计算机上常用的数值计算方法与相关理论,以及科学计算的编程技术.

1.2 误差及有关概念

1.2.1 误差的来源

一个量的真实值与我们通过观测或计算得到的值往往存在差异，它们之差称为误差. 而引起误差的原因是多方面的，主要有以下几种.

(1)模型误差

描述实际问题的数学模型，是忽略了一些次要因素，进行抽象、简化而得出的结果. 因而数学模型是客观现象的一种近似. 这种数学模型与实际问题之间出现的误差称为**模型误差**.

(2)观测误差

在数学模型中往往还有一些根据观测得到的物理量，如温度、长度、电压，这些参量往往是由观测、实验得到的，显然也包含误差. 这种误差称为**观测误差**.

(3)截断误差

在计算中常常遇到需通过无限过程才能得精确解，但实际上人们只能进行有限次的运算用有限步骤来求得近似的结果. 如无穷级数求和，一般只取前面有限项求和来近似代替. 这样由于截断一个无穷过程而引起的误差称为**截断误差**.

(4)舍入误差

在计算过程中所遇到的数可能位数很多，也可能是无穷，但计算时只能对有限位数进行计算，因而需进行舍入，此时产生的误差称为**舍入误差**.

1.2.2 绝对误差与相对误差

误差是不可避免的，但人们总希望计算结果能更准确，这就需估计误差. 人们常用绝对误差与相对误差来说明一个近似值的准确程度.

定义 1.1 设 x^* 为准确值 x 的一个近似值，称 $e=x^*-x$ 为近似值的**绝对误差**，简称**误差**.

注意定义中的 e 可正可负. 通常我们不能算出准确值 x，也就不能算出 e 的准确值，只能根据具体测量或计算情况估计出误差 e 的绝对值不超过某个正数 ε，即

$$|e| = |x^* - x| \leqslant \varepsilon. \tag{1.1}$$

ε 称为近似值 x^* 的**绝对误差限**，简称**误差限**. 有时也将(1.1)式表示成

$$x = x^* \pm e$$

绝对误差的大小还不能完全刻划出近似值的准确程度. 例如，有两个数

$$x = 10 \pm 1, \qquad y = 1000 \pm 5,$$

即 $\quad x^*=10, \quad e(x)=1; \quad y^*=1000, \quad e(y)=5.$

这里 $e(y)$ 是 $e(x)$ 的 5 倍，但不能就此断定近似值 x^* 一定比 y^* 准确程度高，若考虑到数本身的大小，在 1000 内差 5 显然比在 10 内差 1 更准确些. 因此刻画近似值的准确程度不仅要看绝对误差的大小，也要考虑近似数本身的大小. 为此需引入相对误差的概念.

定义 1.2 设 x^* 是准确值 x 的近似值，e 为 x^* 的绝对误差，称比值 $\frac{e}{x}$ 是近似值 x^* 的相对误差，记作 e_r，即

$$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x^* - x}{x}.$$

若已知正数 ε_r，使

$$|e_r| = \frac{|x^* - x|}{|x|} \leqslant \varepsilon_r, \tag{1.2}$$

则称 ε_r 为近似数 x^* 的**相对误差限**.

在实际计算中,由于真值 x 总是不知道的,通常取 $e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$.

相对误差与相对误差限都是无名数,通常用百分数表示.因此上例中:

$x = 10 \pm 1$ 的近似值 $x^* = 10$ 的相对误差限为

$$\varepsilon_r(x) = \frac{1}{10} = 10\%;$$

$y = 1000 \pm 5$ 的近似值 $y^* = 1000$ 的相对误差限为

$$\varepsilon_r(y) = \frac{5}{1000} = 0.5\%.$$

可见,从相对误差看 y 的近似值 y^* 远比 x 的近似值 x^* 的准确程度高.

1.2.3 有效数字

写出一个近似数后,我们当然希望从这个近似数本身就能看出其误差的大小.为此引进有效数字的概念.

当准确值 x 有很多位数时,常常按四舍五入的原则得到 x 的近似值 x^*.例如

$$x = \sqrt{3} = 1.732050808\cdots,$$

取 3 位 $\qquad x_3^* = 1.73,$

取 5 位 $\qquad x_5^* = 1.7321,$

则 $\qquad |x_3^* - \sqrt{3}| = 0.002050808 \leqslant 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2};$

$$|x_5^* - \sqrt{3}| = 0.000049992 \leqslant 0.00005 = \frac{1}{2} \times 10^{-4}.$$

它们的误差都不超过末位数字的半个单位.

定义 1.3　若近似值 x^* 的误差不超过某位数字的半个单位，而从该位数字起直到前面第一个非零数字为止共有 n 位，我们就说 x^* 有 n 位**有效数字**.

如近似值 $x_3^* = 1.73$ 有三位有效数字；$x_5^* = 1.7321$ 有五位有效数字.

例 1.1　对下列各数写出具有五位有效数字的近似值.

23.6841，　0.00346126，　5.000032，　5.000032×10^3.

解：由定义上述各数具有五位有效数字的近似值分别是

23.684，　0.0034613，　5.0000，　5000.0.

例 1.2　指出下列各近似数分别有几位有效数字？

3.002，−0.000206，−5000，4×10^{-3}.

解：按定义上述各近似数的有效数字位数分别是

4，3，4，1.

应当指出：

1°　在有效数的意义下，近似数 20.5 与 20.500 不一样，它们的精确度是不相同的，前者只有三位有效数字.其绝对误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-1}$；后者确具有五位有效数字，其绝对误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-3}$.

2°　对任意一个准确值 x，用四舍五入法得到具有 n 位有效数字的近似值 x^*，总可以写成

$$\begin{aligned} x^* &= \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m \\ &= \pm 10^m \times (a_1 \times 10^{-1} + a_2 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n}). \quad (1.3) \end{aligned}$$

其中 a_1 是 1～9 中某个整数，a_2，a_3，…，a_n 是 0～9 中的某个整

数或零，且 x^* 的误差为

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n}. \tag{1.4}$$

可以看出有效数字位数越多，绝对误差限就越小，而且只要知道有效数字位数，就容易写出它的绝对误差限（由（1.4）式）. 反之亦然. 关于有效数字与相对误差的关系我们给出如下定理.

定理 1.1 如果形如（1.3）式的近似数 x^* 具有 n 位有效数字，则其相对误差

$$|e_r| \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}. \tag{1.5}$$

反之，如果 x^* 的相对误差

$$|e_r| \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}, \tag{1.6}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证：由（1.3）式可知

$$a_1 \times 10^{m-1} \leqslant |x^*| \leqslant (a_1+1) \times 10^{m-1},$$

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

所以 $$|e_r| = \frac{|x^* - x|}{|x^*|} \leqslant \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{a_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}.$$

反之，由 $|x^* - x| = |x^*| . |e_r|$

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

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

故 x^* 具有 n 位有效数字.

这也表明了，有效位数越多，相对误差限也越小.

例 1.3 为使 $\sqrt{5}$ 的近似值的相对误差小于 1%，问需取几位

有效数字？

解：$\sqrt{5}$ 的近似值的首位数字 $a_1=2$，由

$$|e_r| \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} = \frac{1}{2 \times 2} \times 10^{-(n-1)} < 0.01,$$

解之得　$n>2.4$，因而可取 $n=3$，即

$$\sqrt{5} \approx 2.24.$$

1.3 数值计算中必须注意的几个问题

误差分析在数值计算中是一个既重要而又复杂的问题，因每步计算中都可能产生误差，而一个问题的解决往往要经过成千上万次运算，不可能（也没必要）每步都加以分析．这里只提出在数值计算中应该注意的几个问题，以避免某些误差危害现象的产生．

1.3.1 要避免两相近数相减

两相近数相减有效数字会严重损失．例如，$x^*=4.312$，$y^*=4.308$ 都具有四位有效数字．但是 $x^*-y^*=0.004$ 却只有一位有效数字，这说明应尽量避免出现相近数相减，其办法是改变计算方法．例如，以下情况都用右端算式代替左端算式，有效数字就不损失．

当 $x>0$ 很大时，

$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}},$$

$$\frac{1}{x}-\frac{1}{x+1}=\frac{1}{x(x+1)},$$

$$\operatorname{arctg}(x+1)-\operatorname{arctg}x=\operatorname{arctg}\frac{1}{1+x(x+1)};$$

当 $|x|$ 很小时，

$$1-\cos x=2(\sin\frac{x}{2})^2,$$

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

$$=x(1+\frac{1}{2}x+\frac{1}{6}x^2+\cdots),$$

当 x，y 很接近且都为正时，

$$\ln x-\ln y=\ln\frac{x}{y}.$$

如果难于改变算式，也可采用增加有效数位的办法.

1.3.2 要避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法

在计算过程中，如计算 $\frac{x}{y}$，若 $0<|y|\ll|x|$，即用绝对值很小的数作除数，会使商的数量级增加，从而舍入误差会增大，给计算结果带来严重的影响，故应尽量避免.

1.3.3 要防止大数“吃掉”小数

为了说明这一点，下面举个例子

例 1.4 计算二次方程 $x^2-(10^9+1)x+10^9=0$ 的根显然方程的二个根为 $x_1=10^9$，$x_2=1$.

但如果我们用求根公式

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

在能将规格化的数表达到小数后八位的计算机上进行运算，则

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

由于第二项最后两位数“01”在机器上表示不出来，故在上机运