云南大学重点教材建设项目

数值计算方法及其程序设计

SHU ZHI JI SUAN FANG FA
JI QI CHENG XU SHE JI

黄其明 廖鸿志 编著

云南大学出版社

云南大学重点教材建设项目

数值计算方法及其程序设计

黄其明　廖鸿志　编著

云南大学出版社

(滇) 新登字 07 号

责任编辑：李继毛

封面设计：丁群亚

书　名	**数值计算方法及其程序设计**
作　者	黄其明　廖鸿志
出　版	云南大学出版社
印　刷	云南教育印刷厂
开　本	850×1168／32
印　张	13.875
字　数	348 千
版　次	1995 年 11 月第 1 版
印　次	1995 年 11 月第 1 次印刷
印　数	0001-3000
书　号	ISBN 7-81025-584-3／O・31
定　价	[illegible]

前　言

运用数学方法解决科学研究、工程技术及社会经济领域中的实际问题，数值计算是不可少的重要环节。随着科学技术水平的不断提高，社会经济的不断发展，特别是计算机科学与技术的迅速发展，数值计算与理论分析、科学实验已成为推动科学技术及社会经济发展的三种手段，它们相互独立而又相辅相成，不可缺少。因此，学习数值计算方法并应用它解决实际问题已成为广大科技工作者和经济管理工作者的需要。在高等院校中除计算数学及其应用软件专业外，其他理、工科很多专业都将它作为必修课程。基于以上原因，我们编写了这本《数值计算方法及其程序设计》。

本书是在原讲义的基础上通过多次教学实践进行修改而成的。原讲义是根据作者多年在昆明的几所高校对本科生和研究生的教学实践和编制数值软件方面的经验编写的。

本书分为三个部分：数值分析、数值代数和常微分方程初值问题数值解，共十二章：误差、范数和极限、解线性代数方程组的直接法、解线性代数方程组的迭代法、线性最小二乘问题的求解、矩阵特征值问题的计算方法、插值与逼近、数值积分和数值微分、最佳一致逼近和最佳平方逼近、快速 Fourier 变换、非线性方程和方程组的数值解法、常微分方程初值问题的数值解法。

本书从实用的角度介绍数值计算方法的基本知识、基本方法以及数值计算方法在计算机上实现的基本方法和技术，即在阐述一般的计算方法、公式推导、收敛性证明与误差估计的同时，还阐述了将计算方法在计算机上实现时涉及的存贮安排和算法描述，使读者便于了解计算过程和利用计算机语言编制相应的程序，从而在计算机上解决实际问题。因此，利用本书进行教学时，应安排一定的计算机实习。

本书是作为理工科某些专业大学生或研究生的教材而编写的，使他们对深入学习该门学科(课程)打下一定的基础，因此注意系统性和全面性。同时为使其适用在职的科技、工程人员和其他人员自学、进修和参考，详细地用算例阐明了方法和计算过程，考虑到为适应不同专业和不同层次读者的教学要求，对一些用“*”号标出的章节可进行完全删除或择其要点进行讲述和学习。

本书在编写过程中，得到云南大学数学系计算数学及其应用软件教研室各位老师的支持，昆明地区部分高等院校教师也为本书的编写提出过宝贵意见。云南大学教务处和云南大学出版社为本书的出版给予了大力支持和帮助，在此表示衷心感谢。

本书虽然几易其稿，其讲义已使用数次，但囿于作者水平，错漏之处难免，敬请广大同仁和读者指正。

黄其明
廖鸿志
一九九五年春于云南大学

目 录

第四章　解线性代数方程组的迭代法

第五章　线性最小二乘问题的求解

第六章　矩阵特征值问题的计算方法

第十章 快速 Fourier 变换(FFT)

第十一章 非线性方程和方程组的数值解法

第十二章 常微分方程初值问题的数值解法

参考文献

第一章

误差

§1 误差的基本概念

误差是普遍存在的。

在数值运算中，参与运算的数据都可能带有误差。计算过程中，计算机是对有限位数据进行运算的，因此舍入误差是基本的误差，也是值得重视的一种误差。

在误差讨论中，绝对误差、相对误差、误差限、有效数字是最基本的概念。

设x^*为准确数x的近似值，记

$$e^* = x - x^*$$

称e^*为近似数x^*的绝对误差（误差）。显然，误差有正有负。若$|x - x^*| \leqslant \varepsilon^*$，则称$\varepsilon^*$为近似数$x^*$的绝对误差限。

由于x值一般是不知道的，因此，给出误差限是有意义的。若$|x - x^*| \leqslant \varepsilon^*$，则$x^* - \varepsilon^* \leqslant x \leqslant x^* + \varepsilon^*$，即$x \in [x^* - \varepsilon^*, x^* + \varepsilon^*]$。由此给出了$x$所在的范围。此时也可表示为$x = x^* \pm \varepsilon^*$。

一个十进制的数 x，通过“四舍五入”就得到一个近似数 x^*，且可表为 $x^* = \pm 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\cdots\alpha_n \times 10^m (\alpha_1 \neq 0)$。从而有 $\left|x - x^*\right| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$

即 $\left|e^*\right| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$。

对于 x 的近似数 x^*，有

$$x^* = \pm 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\cdots\alpha_n \times 10^m，且 \alpha_1 \neq 0$$

若其绝对误差限满足 $\left|x - x^*\right| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$，则称 x^* 有 n 位有效数字，或称 x^* 准确到 n 位。

π 的近似值 3.1416 具有五位有效数字。将 $x = 0.00134$ 舍入成：$x^* = 0.0013 = 0.13 \times 10^{-2}$， $\because$ $m = -2$，而

$$\left|x - x^*\right| = 0.00004 < \frac{1}{2} \times 10^{-4} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

$\therefore$ n=2 $\therefore$ $x^* = 0.0013$ 具有两位有效数字

如果已知近似数的有效数字位数，即可求得绝对误差限。例如，若 $x^* = 0.00135$ 具有三位有效数字，因为 $x^* = 0.00135 = 0.135 \times 10^{-2}$

$$\therefore \quad \left|x - x^*\right| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2-3} = \frac{1}{2} \times 10^{-5}$$

显然，有效数字越多，则绝对误差限便越小。

用绝对误差限还不能完全刻画近似数的近似程度。例如，测量 100 米距离和 10 米距离的误差都是 1 厘米，则绝对误差限都是 0.01 米，但是显然前者比后者测量更准确。因此，误差不仅与绝对误差的大小有关，还应考虑 x 的大小，记

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

称 e_r^* 为近似数 x^* 的相对误差。实际应用时，也将

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

称为 x^* 的相对误差。相对误差也有正有负。若 $\left|e_r^*\right| \leqslant \delta$，则称 δ 为 x^* 的相对误差限。

若 $x^* = \pm 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\cdots\alpha_n \times 10^m (\alpha_1 \neq 0)$ 有 n 位有效数字，则因 $\left|x^*\right| \geqslant \alpha_1 \times 10^{m-1}$，所以

$$\left|e_r^*\right| = \frac{\left|x - x^*\right|}{\left|x^*\right|} \leqslant \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{\left|x^*\right|} \leqslant \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{-(n-1)}$$

另外，若 $x^* = \pm 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\cdots\alpha_n \times 10^m (\alpha_1 \neq 0)$ 的相对误差限为 $\left|e_r^*\right| \leqslant \frac{1}{2(\alpha_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)}$，则因 $\left|x^*\right| \leqslant (\alpha_1 + 1) \times 10^{m-1}$

$$\therefore \left|x - x^*\right| = \left|e_r^*\right| \left|x^*\right| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

即 x^* 有 n 位有效数字。此即为相对误差限与有效数字间的关系。

例如，3.1416 是 π 的具有五位有效数字的近似数，则相对误差限为

$$\left|e_r^*\right| \leqslant \frac{1}{2 \times 3} \times 10^{-(5-1)} = \frac{1}{6} \times 10^{-4}$$

若将 x^* 的误差 $e^* = x - x^*$ 视为 x 的微分，即

$$\mathrm{d}x = x - x^*$$

x^* 的相对误差为

$$e_r^* = \frac{x - x^*}{x} = \frac{\mathrm{d}x}{x} = \mathrm{d}(\ln x)$$

若　$u = x \pm y$，则

$$\mathrm{d}u = d(x \pm y) = \mathrm{d}x \pm \mathrm{d}y$$

$\therefore |\mathrm{d}u| \leqslant |\mathrm{d}x| + |\mathrm{d}y|$

因此，和（差）的绝对误差是绝对误差的和（差）。和与差的绝对误差限不大于各绝对误差限之和。

若　$u = xy$

$$\mathrm{d}\ln u = \mathrm{d}\ln x + \mathrm{d}\ln y$$

因此，乘积的相对误差是各乘数的相对误差之和。

若　$u = \frac{x}{y}$

$$\mathrm{d}\ln u = \mathrm{d}\ln x - \mathrm{d}\ln y$$

因此，商的相对误差是被除数的相对误差减去除数的相对误差。

由上也易知，乘积与商的相对误差限是各数相对误差限之和。

设　$y = f(x)$，$y^* = f(x^*)$，则

$$e_r^* = \mathrm{d}\ln y = \frac{f'(x)}{f(x)}\mathrm{d}x$$

对于多元函数的计算误差，可用 Taylor 展式进行讨论。设 $y = f(x_1, x_2, \cdots\cdots, x_n)$，$y^* = f(x_1^*, x_2^*, \cdots\cdots, x_n^*)$，则由 Taylor 展式

$$y - y^* \approx \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_* (x_i - x_i^*)$$

其中 $\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_*$ 表示$\frac{\partial f}{\partial x_i}$在（$x_1^*$，$x_2^*$，$\cdots\cdots$，$x_n^*$）处取

值。

$$\frac{y-y^*}{y^*} \approx \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_* \frac{x_i - x_i^*}{y^*}$$

由于误差的普遍存在，计算的每一步都可能产生误差，而对一个科学和工程问题，计算量是很大的，因此要较准确地对每个问题进行误差分析是复杂而困难的，有时甚至是不可能的。况且，误差的积累有时是增加有时是减少，故更增加困难程度。然而，在大量的实际计算中，人们也发现，为提高计算结果的可靠性需要注意的一些问题:

(1) 注意两个相近数相减时有效数字的减少。

$u = x - y$ 的相对误差是

$$\mathrm{d}\ln u = \frac{\mathrm{d}x - \mathrm{d}y}{x - y}$$

当 x 和 y 很接近时，$x - y$ 的有效数字减少，u 的相对误差增大。为避免有效数字的丧失，可变换计算公式，防止相近数的相减。

如，对很大的 x，$\sqrt{1+x} - \sqrt{x}$ 用 $\dfrac{1}{\sqrt{1+x} + \sqrt{x}}$ 代替。

当 x 接近于 0 时，$\dfrac{1-\cos x}{\sin x}$ 用 $\dfrac{\sin x}{1+\cos x}$ 代替等等。

(2) 两个相差很大的数进行运算时，要注意小的数被大的数“吃掉”。

例如，计算 $x^2 - (10^9 + 1)x + 10^9 = 0$ 的根。易知两个根为 $x_1 = 10^9$，$x_2 = 1$。按求根公式

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

用计算机计算，$b = -1E+09$，$c = 1E+09$，$b^2 = 1E+18$，

$b^2-4ac=1E+18$。从而得 $x_1=1E+09$，$x_2=0$。x_2 的结果显然是错的，这是由于 10^9 把 1 “吃掉”，b^2 把 $4ac$ “吃掉” 所至。若在求得 x_1 后，按 $x_2=\frac{c}{x_1}$ 求出 x_2，此时有 $x_2=1$，显然结果是可靠的。

(3) 注意计算步骤的简化，减少算术运算的次数。

算述运算的次数，对计算的速度和误差的积累有直接的影响。

如计算多项式 $P(x)=\sum_{k=0}^{n}a_kx^k$ 的值时，若先计算 a_kx^k 后再求和，则需 $\frac{1}{2}n(n+1)$ 次乘法和 n 次加法。但若按递推公式(秦九韶算法)计算:

$$
\begin{aligned}
&y_n=a_n\\
&y_k=xy_{k+1}+a_k \quad (k=n-1,\cdots,1,0)
\end{aligned}
$$

则 $P(x)=y_0$，此时只需 n 次乘法和 n 次加法，

§2　算法的数值稳定性和问题的性态

在上节计算$x^2-(10^9+1)x+10^9=0$的根时，采用不同的算法得到不同的结果。可见，对同一问题计算结果与所选择的算法有直接的联系。如果一个算法的计算结果受舍入误差的影响较小，就称该算法有较好的数值稳定性；否则，若计算结果受舍入误差的影响很大，便称该算法的数值稳定性不好。为说明算法的数值稳定性，请看下例:

对 $n=0,1,2,\cdots$, 计算

$$I_n=\int_0^1\frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x$$

$\because\quad I_n+5I_{n-1}=\int_0^1 x^{n-1}\mathrm{d}x=\frac{1}{n}$

于是有递推公式:

$$\begin{cases}I_n=-5I_{n-1}+\dfrac{1}{n}\\ I_0=\displaystyle\int_0^1\frac{1}{x+5}\mathrm{d}x=\ln 6-\ln 5\end{cases}$$

若取三位小数，结果为

$I_0\approx 0.182$，$I_1\approx 0.090$，$I_2\approx 0.050$，$I_3\approx 0.083$，$I_4\approx -0.165$

由 $I_n=\int_0^1\frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x$ 易知 $I_n>I_{n+1}>0$，且当 $n\to\infty$ 时 $I_n\to 0$。但由上面的递推公式所得计算结果有 $I_3>I_2$，且 $I_4<0$，显然计算结果是不可靠的。

若小数位取八位，计算仍有 $I_{11}>I_{10}$，$I_{12}<0$，计算结果仍不可靠。

设 I_{n-1} 的计算值为 $\tilde{I}_{n-1}$，由公式

$$I_n=-5I_{n-1}+\frac{1}{n}$$

得到 I_n 的计算值 $\tilde{I}_n=-5\tilde{I}_{n-1}+\frac{1}{n}$

$\therefore\quad I_n-\tilde{I}_n=(-5)^n(I_0-\tilde{I}_0)=(-5)^n\varepsilon$

可见，若 $\tilde{I}_0$ 有误差 ε，则 $\tilde{I}_n$ 的误差是 ε 的 $(-5)^n$ 倍，所以 n 越大，$\tilde{I}_n$ 的值越不可靠。

现考虑另一个计算方案：

由 $I_n=-5I_{n-1}+\frac{1}{n}$ 有

$$I_{n-1}=\frac{1}{5n}-\frac{I_n}{5}$$

若知 I_n 之值，由上公式可求得 I_{n-1}，……，I_0。

因$\{I_n\}$单调下降、收敛，故对充分大的 n 有 $I_n\approx I_{n-1}$。若取 $I_5=I_4$，可得 $I_4=\frac{1}{30}\approx 0.033$，于是得递推公式：

$$\begin{cases} I_{n-1}=\dfrac{1}{5n}-\dfrac{I_n}{5} \\ I_4=I_5\approx 0.033 \end{cases}$$

由此得 $I_3\approx 0.043$，$I_2\approx 0.058$，$I_1\approx 0.088$，$I_0\approx 0.182$。

其实，因 $I_n\to 0$ $(n\to\infty)$，故对充分大的 n 有 $I_n\approx 0$。

若取 $I_4=0$，则 $I_3\approx 0.050$，$I_2\approx 0.057$，$I_1\approx 0.089$，$I_0\approx 0.182$，可见，按此算法，甚至取 $I_4=0$，由此求得的 I_0 与 $\ln 6-\ln 5$ 很接近。

设 I_n 的计算值为$\tilde{I}_n$，则

$$I_{n-1}-\tilde{I}_{n-1}=-\frac{1}{5}(I_n-\tilde{I}_n)$$

$$\therefore I_0-\tilde{I}_0=\left(-\frac{1}{5}\right)^n(I_n-\tilde{I}_n)$$

可见，若$\tilde{I}_n$ 有误差 ε，则$\tilde{I}_0$ 的误差是 ε 的$\left(-\frac{1}{5}\right)^n$倍，所以误差逐渐减小。

上面讨论的计算结果误差与计算过程有关，即与所使用的算法有关。当不考虑算法，而只考虑问题本身由初始数据的误差带