

数值计算

SHUZHJ JISUAN

何光辉 董海云 魏曙光 编 王开荣 主审



重庆大学出版社

<http://www.cqup.com.cn>

数值计算

何光辉 董海云 魏曙光 编
王开荣 主 审

重庆大学出版社

内 容 提 要

本书是为工科本科生“数值计算”课程编写的教材,书中系统地介绍了数值计算的基本概念、常用算法及有关的理论分析和应用。全书共分7章,第1章是绪论,介绍数值分析中的基本概念;第2章至第7章包含了数值计算中的基本问题,如线性方程组的数值解法,矩阵特征值和特征向量的数值解法,非线性方程及方程组的数值解法,插值方法,数据拟合和函数逼近,数值积分,数值微分以及常微分方程初值问题的数值解法等;在每个章节后面介绍了一些与实际工程结合比较紧密的应用案例,在部分例题后面给出了用 Matlab 软件求解教材中部分例题的源程序。各章都给出典型例题并配有一定数量的习题,书后给出了习题答案和提示。

本书基本概念叙述清晰,语言通俗易懂,注重算法的实际应用,同时给出了部分算法的源代码。本书可作为工科本科生的数值计算课程教科书,还可作为大学本科及硕士生的教学参考书,也可供工程技术人员参考使用。

图书在版编目(CIP)数据

数值计算/何光辉编. —重庆:重庆大学出版社,
2009.9

ISBN 978-7-5624-5049-8

I. 数… II. 何… III. 数值计算 IV. 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 140971 号

数值计算

何光辉 董海云 魏曙光 编

王开荣 主 审

责任编辑:周 立 版式设计:周 立

责任校对:邬小梅 责任印制:张 策

*

重庆大学出版社出版发行

出版人:张鸽盛

社址:重庆市沙坪坝正街 174 号重庆大学(A 区)内

邮编:400030

电话:(023) 65102378 65105781

传真:(023) 65103686 65105565

网址:<http://www.cqup.com.cn>

邮箱:fxk@cqup.com.cn (营销中心)

全国新华书店经销

四川省内江市兼升印务有限公司印刷

*

开本:787×1092 1/16 印张:8.5 字数:212千

2009年9月第1版 2009年9月第1次印刷

印数:1—3 000

ISBN 978-7-5624-5049-8 定价:15.00元

本书如有印刷、装订等质量问题,本社负责调换

版权所有,请勿擅自翻印和用本书

制作各类出版物及配套用书,违者必究

教师信息反馈表

为了更好地为教师服务,提高教学质量,我社将为您的教学提供电子和网络支持。请您填好以下表格并经系主任签字盖章后寄回,我社将免费向您提供相关的电子教案、网络交流平台或网络化课程资源。

请按此裁下寄回我社或在网上下载此表格填好后E-mail发回

书名:				版次	
书号:					
所需要的教学资料:					
您的姓名:					
您所在的校(院)、系:				校(院)	系
您所讲授的课程名称:					
学生人数:	_____人		_____年级	学时:	
您的联系地址:					
邮政编码:		联系电话	(家)		
			(手机)		
E-mail:(必填)					
您对本书的建议:				系主任签字	
				盖章	

请寄:重庆市沙坪坝正街 174 号重庆大学(A 区)
重庆大学出版社教材推广部

邮编:400030
电话:023-65112084
023-65112085
网址:<http://www.cqup.com.cn>
E-mail:fxk@cqup.com.cn

前言

科学计算已经与理论证明、科学实验并列成为三种科学研究方法之一。近年来随着计算机的迅速普及以及工程中需要处理的信息快速增长,掌握和应用科学计算方法或者数值分析方法已经不再局限于有关专业的学生或者专门的工程技术人员。目前在本科阶段选修《数值计算》课程的专业和学生占很大比例,这充分说明了科学计算已经成为各种工程技术中重要的研究手段和工具。

本书力求适应工科类本科学习的特点。相对于理科类本科生,他们有劣势也有优势。工科类本科生在一年级学习过基本的大学数学课程,有一定的数学基础,但前期的数学类课程偏重于计算的较多,对理论证明部分掌握的不够深入;而他们的优势在于,有具体的专业知识背景,他们希望理解数学知识在工程应用中的过程,学习的目的性更明确,主动性也更强。

因此本书编写时注重了以下原则:一是保持课程体系的完整性,二是强调本课程的实用性,三是强调内容的可读性。为此,我们在系统介绍基础理论的同时,省略了一些繁琐艰深的证明过程,而主要侧重于算法叙述和算例分析。行文时注重通俗易懂,对专业术语尽量作通俗的解释,特别是避免完全用术语解释术语,以增强本书的可读性。同时为常用的算法给出了 Matlab 程序的源代码,方便读者编程运行进行验证。

学习本书必需的数学基础是微积分、线性代数和常微分方程,这是一般工科大学生都具备的。为便于自学,各章后均附有习题,书后有习题参考答案和提示。在计算习题计算量较大时,可考虑使用程序计算。

全书共分 7 章,其中第 1 章至第 4 章、第 7 章由何光辉老师执笔;第 2 章、第 3 章由董海云老师编写,第 5 章、第 6 章由魏曙光老师完成,习题及参考答案由李东、谭宏老师编写,全书由王开荣老师审核并校正。全书设计讲授学时数为 36 学时。

该书的出版得到重庆大学数理学院领导的大力支持,在此表示感谢。

由于我们的经验和水平有限,对教材中疏忽和谬误之处,敬请读者指正赐教,以期修订时改进完善。

编 者

2009 年 6 月

目 录

第1章 绪 论	1
1.1 算法	1
1.2 误差	4
1.3 设计数值型算法的基本原则	5
本章小结	7
习题一	8
第2章 线性方程组的解法	9
2.1 消元法	9
2.2 矩阵三角分解	14
2.3 向量和矩阵的范数	20
2.4 线性方程组的迭代法解法	23
2.5 求解静止固定的支架问题	31
本章小结	34
习题二	37
第3章 方阵特征值	39
3.1 乘幂法	39
3.2 Jacobi 方法	43
3.3 队员选拔问题	48
本章小结	50
习题三	51
第4章 非线性方程求根	52
4.1 对分法	52
4.2 迭代法	54
4.3 Newton 迭代法	56
4.4 明水渠水流问题	59
本章小结	60

习题四	62
第5章 多项式插值法与数据拟合	63
5.1 Lagrange 插值法	64
5.2 Newton 插值法	67
5.3 Hermite 插值	70
5.4 分段插值	73
5.5 样条插值	75
5.6 数据拟合	78
5.7 河水温度突变问题	83
本章小结	85
习题五	87
第6章 数值积分与数值微分	89
6.1 求积公式	89
6.2 Newton—Cotes 公式	91
6.3 复化求积公式	93
6.4 Gauss 求积公式	99
6.5 数值微分	102
6.6 竞赛帆船桅杆上的有效作用力问题	103
本章小结	106
习题六	107
第7章 常微分方程的数值解法	108
7.1 引言	108
7.2 Euler 方法	108
7.3 Runge—Kutta 方法	112
7.4 线性多步法	115
7.5 一阶常微分方程组与高阶常微分方程	117
7.6 收敛性与稳定性	118
7.7 追捕模型问题	120
本章小结	121
习题七	122
习题参考答案及提示	123
参考文献	127

第 1 章

绪 论

数值计算是数学学科的一个分支,是一门与计算机密切结合的实用性很强的数学课程,也是科学计算的基础。数值计算是以各类数学问题的数值解法作为研究对象,并结合现代计算机科学或技术为解决科学或工程中遇到的各类数学问题提供基本的算法。内容包含了数值代数(线性方程组的解法、矩阵特征值计算等)、非线性方程的解法、数值逼近、数值微分与数值积分、常微分方程的数值解法等。

近年来个人计算机的飞速发展,使得数值计算的方法发展和使用异常迅速。学习数值计算方法有以下几点益处:

(1) 数值计算是强大的问题求解工具。在工程中大规模方程组、非线性系统和复杂的几何问题很常见,用解析方法对其求解几乎是不可能的。但是,数值计算可以得到满足精度要求的近似解。

(2) 在实际工程中,经常用到一些已经封装了数值计算的商业软件,如果需要理解这些程序,就必须掌握数值方法的基本知识。读者还可以自己编写一些简单的数值计算的程序,避免花费大量的资金购买商业软件。

(3) 数值计算方法为加深对数学的理解提供了一种工具。数值计算方法可以将复杂的数学问题转化成为简单的算术运算。通过不同的角度获得的结论,可以加深我们对数学的理解和认识。

1.1 算 法

算法是对问题求解过程的一种描述,是为解决一个或一类问题给出的一个确定的、有限长的操作序列。严格说来,一个算法必须满足以下五个重要特性:

(1) 有穷性: 对于任意一组合法的输入值,在执行有穷步骤之后一定能结束。即算法中的操作步骤为有限个,且每个步骤都能在有限时间内完成。

(2) 确定性: 表现在对算法中每一步的描述都没有二义性,只要输入相同,初始状态相同,则无论执行多少遍,所得结果都应该相同。

(3) 可行性: 算法中的所有操作都可以通过已经实现的基本操作运算有限次来实现。

(4)有输入:作为算法加工对象的量值,通常体现为算法中的一组变量。

(5)有输出:它是一组与“输入”有确定关系的量值,是算法进行信息加工后得到的结果,这种确定关系即为算法的功能。

1.1.1 算法常用描述形式

(1)数学公式和文字说明描述:符合人们的理解习惯,与算法的推证相衔接,易于学习接受,但不方便转换成程序语言。

(2)框图描述:描述计算过程流向清楚,易于编制程序,但对初学者有一个习惯过程。此外框图描述格式不统一,详略难以掌握。

(3)伪代码描述:表述算法的一种通用的语言,有特定的表述程序和语句。它独立于计算机的硬件和软件系统,可以很容易地转换某种实用的计算机高级语言,同时也具有一定的可读性。

(4)程序语言描述:用计算机语言描述的算法,即计算机可直接运行算法。

由于数值计算课程的特点是公式比较多,因此本教材主要采用数学公式和文字说明的描述方式。同时为方便读者调试程序,我们给出了部分典型的算法程序。

1.1.2 数值型算法的基本特点

数值型算法的执行总是与特定的工具有关,而每一种计算工具的有效数位总是一定的。因此相对于普通算法而言,数值计算问题在实际过程中参与运算的数值基本都是近似的。为准确而全面地描述整个问题的解决过程,数值型算法常具有如下特点:

1) 无穷过程的截断

例 1.1 计算 $\sin x \quad x \in \left[0, \frac{\pi}{4}\right]$ 。

解 据 Taylor 公式:

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \cdots \quad (1.1)$$

对该无穷级数,只能在适当的地方“截断”,使计算量不太大,而精度又能满足要求。如取 $n = 3$,

$$\text{计算 } \sin 0.5 \approx 0.5 - \frac{0.5^3}{3!} + \frac{0.5^5}{5!} - \frac{0.5^7}{7!} = 0.479\,426$$

据 Taylor 余项公式,它的误差应为:

$$R = (-1)^4 \frac{\xi^9}{9!}, \quad \xi \in \left[0, \frac{\pi}{4}\right] \quad (1.2)$$

$$|R| \leq \frac{(\pi/4)^9}{362\,880} = 3.13 \times 10^{-7}$$

2) 连续过程的离散化

例 1.2 计算积分值 $I = \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx$

解 见图 1.1,将 $[0,1]$ 分为 4 等分,分别计算 4 个小曲边梯形的面积的近似值,然后加起来作为积分的近似值。设 $f(x) = \frac{1}{1+x}$

取 $h = \frac{1}{4}$, 有 $x_i = ih$, $i = 0, 1, 2, 3, 4$, $T_i = \frac{f(x_i) + f(x_{i+1}))}{2}h$

所以有 $I \approx \sum_{i=0}^3 T_i = 0.697\ 024$, 与精确值 $0.693\ 147$ 比较, 可知结果不够精确, 如进一步细分区间, 精度可以提高。

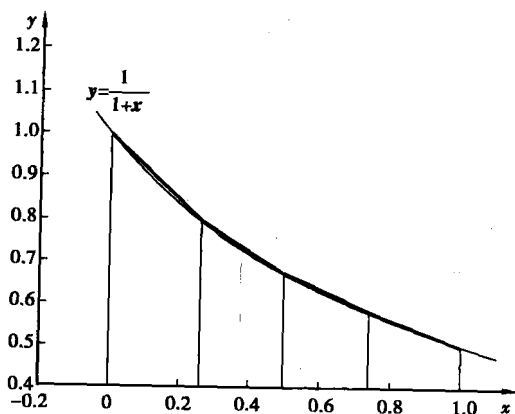


图 1.1

3) 迭代计算

迭代是指某一简单算法的多次重复, 后一次使用前一次的结果。这种形式易于在计算程序中实现, 在程序中表现为“循环”过程。

例 1.3 不用开平方计算 $\sqrt{a}$ ($a > 0$) 的值。

解 假定 x_0 是 $\sqrt{a}$ 的一个近似值, $x_0 > 0$, 则 $\frac{a}{x_0}$ 也是 $\sqrt{a}$ 的一个近似值, 且 x_0 和 $\frac{a}{x_0}$ 两个近似值必有一个大于 $\sqrt{a}$, 另一个小于 $\sqrt{a}$, 可以设想它们的平均值应为 $\sqrt{a}$ 的更好的近似值, 于是设计算法:

$$x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{a}{x_k} \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.3)$$

如计算 $\sqrt{3}$, 取 $x_0 = 2$, 有 $x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{3}{x_k} \right), k = 0, 1, 2, \dots$

计算得到以下结果:

$$\begin{aligned} x_0 &= 2 \\ x_1 &= 1.75 \\ x_2 &= 1.732\ 142\ 9 \\ x_3 &= 1.732\ 050\ 8 \\ &\vdots \end{aligned}$$

可见此法收敛速度很快, 只迭代三次就得到 8 位精确数字。

迭代法应用时需要考虑迭代格式是否收敛、收敛条件及收敛速度等问题, 将在后续章节进一步讨论。

1.2 误差

用数值计算处理的数值型问题在任何环节中都是近似的,因而数值计算中误差总是不可避免存在的。我们关注的是如何估计误差,并将误差控制在可以接受的范围内。因此,在数值计算中误差分析十分重要。

1.2.1 误差的来源

误差按照起源可以分为模型误差、测量误差、截断误差、舍入误差,由于前两种误差不是计算过程中产生的,所以数值计算主要考察截断误差和舍入误差。

①截断误差:数学模型常难于直接求解,往往要近似替代,简化为易于求解的问题,这种简化带入的误差称为方法误差或截断误差。

②舍入误差:计算机只能处理有限数位的小数运算,初始参数或中间结果都必须进行四舍五入运算,这必然产生舍入误差。

截断误差和舍入误差是数值分析课程的主要讨论对象,往往是计算中误差的主要部分,在讲到各种算法时,通过数学方法可推导出截断误差限的公式如(1.2)式;舍入误差的产生往往带有很大的随机性,讨论比较困难,在问题本身呈病态或算法稳定性不好时,它可能成为计算中误差的主要部分。

1.2.2 误差的基本概念

1) 误差与误差限

定义 1.1 设 x^* 是精确值, x 是它的一个近似值,称

$$e = x - x^* \quad (1.4)$$

为近似值 x 的绝对误差,简称误差。

绝对误差一般无法准确计算,只能根据测量或计算估计出它的绝对值的一个上限,这个上限称为近似值 x 的绝对误差限,记为 ε 。即

$$|x - x^*| \leq \varepsilon \quad (1.5)$$

其意义是: $-\varepsilon \leq x - x^* \leq \varepsilon$, 在工程中常记为: $x^* = x \pm \varepsilon$ 。如 $l = 10.2 \pm 0.05 \text{ mm}$ 。

2) 相对误差与相对误差限

绝对误差不能完全刻画近似值的精度。如测量高速路段长度产生 1 m 的误差与测量一张课桌长度产生 1 cm 的误差,不能简单的认为后者更精确,还应考虑被测值的大小。

定义 1.2 绝对误差与精确值的比值

$$e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*} \quad (1.6)$$

称为 x 的相对误差。相对误差是无量纲的量,常用百分比表示。

相对误差也常不能准确计算,而是用相对误差限来估计。相对误差限:

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|x^*|} \geq \frac{|x - x^*|}{|x^*|} = |e_r| \quad (1.7)$$

实际上由于 x^* 不知道, 用式(1.7)无法确定 ε_r , 常用 x 代 x^* 作分母, 用 $\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|x|}$ 表示相对误差限。

例 1.4 在刚才测量的例子中, 若测得高速段路长为 $2\,500 \pm 1$ m, 课桌长为 120 ± 1 cm, 则

$$\varepsilon_r^{(1)} = \frac{1}{2\,500} = 0.04\%$$

$$\varepsilon_r^{(2)} = \frac{1}{120} = 0.83\%$$

显然后者比前者相对误差大。

1.2.3 有效数字

定义 1.3 若 x 的误差限 ε 是它某一数位的半个单位, 就称 x 准确到该位, 从这一位起直到前面第一个非零数字为止的所有数字称为 x 的有效数字。

如: $x = \pm 0. a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$, 其中 $a_1, a_2, \cdots, a_n$ 是 $0 \sim 9$ 之中的整数, 且 $a_1 \neq 0$, 如 $|e| = |x - x^*| \leq \varepsilon = 0.5 \times 10^{m-l}$, $1 \leq l \leq n$, 则称 x 有 l 位有效数字。有效数字的位数称为有效数位。

以上定义可以用于在知道精确值 x^* 时去确定 x 的有效数位。如: $\pi = 3.141\,592\,65 \cdots$ 则 3.14 和 3.141 6 分别有 3 位和 5 位有效数字。而 3.143 相对于 π 也只能有 3 位有效数字。

但在更多的情况, 不知道准确值 x^* 。如果认为计算结果的各数位可靠, 将它四舍五入到某一位, 这时从这一位起到前面第一个非零数字共 l 位, 由于四舍五入的原因, 它与计算结果之差必不超过该位的半个单位, 习惯上称将计算结果保留 l 位有效数字。

相对误差与有效数位的关系十分密切。具体地讲, 相对误差越小, 有效数位越多, 反之亦正确。同时有以下两个定理:

定理 1.1 设近似值 $x = \pm 0. a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$, 有 n 位有效数字, 则其相对误差限

$$\varepsilon_r \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1} \quad (1.8)$$

定理 1.2 设近似值 $x = \pm 0. a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$ 的相对误差限不大于

$$\varepsilon_r \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-n+1} \quad (1.9)$$

则它至少有 n 位有效数字。

1.3 设计数值型算法的基本原则

当参与运算的数值带有误差时, 结果也必然带有误差, 问题是结果的误差与原始误差相比是否会扩大。

1.3.1 函数计算的误差传播

设 x 是 x^* 的近似值, 则结果误差 $e(f(x)) = f(x) - f(x^*)$, 用 Taylor 展式分析, 忽略第二项高阶无穷小之后, 可得函数 $f(x)$ 的误差限估计式

$$\varepsilon(f(x)) \approx |f'(x)| \varepsilon(x) \quad (1.10)$$

1.3.2 四则运算中误差的传播

四则运算可以看作是二元函数运算,按公式(1.10)易得近似数作四则运算后的误差限公式:

$$\varepsilon(x \pm y) = \varepsilon(x) + \varepsilon(y) \quad (1.11)$$

$$\varepsilon(x \cdot y) \approx |y| \varepsilon(x) + |x| \varepsilon(y) \quad (1.12)$$

$$\varepsilon\left(\frac{x}{y}\right) \approx \frac{|y| \varepsilon(x) + |x| \varepsilon(y)}{y^2}, (y \neq 0) \quad (1.13)$$

其中公式(1.11)取等号,是因为作为多元函数,加减运算是一次函数, Taylor 展开式没有二次余项。

例 1.5 若电压 $V = 220 \pm 5$ 伏特,电阻 $R = 300 \pm 10$ 欧姆,求电流 I 并计算其误差限及相对误差限。

解 $I \approx \frac{220}{300} = 0.733 \ 3$ (安培)

$$\varepsilon(I) = \frac{|V| \varepsilon(R) + |R| \varepsilon(V)}{R^2} = \frac{220 \times 10 + 300 \times 5}{90\ 000} = 0.041 \ 1$$

所以 $I = 0.733 \ 3 \pm 0.041 \ 1$ (安培) $\varepsilon_r(I) = \frac{0.041 \ 1}{0.733 \ 3} = 0.056 = 5.6\%$

根据上面误差传播的分析可知,我们在设计数值型算法时需要注意以下的问题:

1) 避免两个相近数相减

两个相近的数相减会造成有效数字在算法中突然变少,便意味着相对误差在这一步的突然扩大,这就是计算出问题的地方。

例 1.6 计算 $\frac{1}{759} - \frac{1}{760}$, 视已知数为精确值,用 4 位浮点数计算。

解 原式 $= 0.131 \ 8 \times 10^{-2} - 0.131 \ 6 \times 10^{-2} = 0.2 \times 10^{-5}$

结果只剩 1 位有效数字,有效数字大量损失,造成相对误差的扩大。若通分后再计算:

原式 $= \frac{1}{759 \times 760} = \frac{1}{0.576 \ 8 \times 10^6} = 0.173 \ 4 \times 10^{-5}$, 就得到 4 位有效数字的结果。

如 $\sqrt{x+1} - \sqrt{x}$, ($x \gg 1$) 可改为 $\frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}$, $1 - \cos x$, ($|x| \ll 1$) 可改为 $2 \sin^2\left(\frac{x}{2}\right)$, 都可

以得到比直接计算好的结果。

2) 避免除法中除数的数量级远小于被除数

当采用相对于被除数很小的数作为除数时,容易产生浮点溢出现象,同时也可能引起大数吃小数的问题,导致误差的扩大。

3) 合理安排运算顺序

在以前我们学习的公理系统中加法满足交换律,即 $a + b + c \equiv a + c + b$ 。但在数值计算中就不一定成立,如果我们的计算机只有 4 位字长,而假设 $a = 10^{20}$, $b = 2$, $c = -10^{20}$ 。如果按照顺序计算得到的结果是 0,而改写成先计算 $a + c$ 后结果为 2。由此可知,在数值计算中,加法的交换律和结合律可能不成立,这是在大规模数据处理时应注意的问题。

4) 注意运算步骤的简化

减少算术运算的次数,除可以减少运算时间,提高运算效率外,还有一个重要作用就是减少误差的积累效应。同时参与运算的数字的精度应尽量保持一致,否则那些较高精度的量的精度没有太大意义。

本章小结

本章主要介绍了数值计算方法中的误差、误差限的概念,数值计算的内容和数值型算法设计时的基本原则。总结如下表所示。

数值计算:结合现代计算机科学与技术为解决科学或工程中的各类数学问题提供基本的算法。	
算法的5个重要特性:①有穷性;②确定性;③可行性;④有输入;⑤有输出。	
数值型算法的特点:①无穷过程的截断;②连续过程的离散化;③迭代计算。	
误差	误差的来源:①截断误差;②舍入误差。
	误差的基本概念
	1. 绝对误差:精确值与近似值之差 $e = x - x^*$;
	2. 相对误差:绝对误差与精确值的比值 $e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*}$;
	3. 绝对误差限:绝对误差绝对值的一个上限 $ x - x^* \leq \varepsilon$;
	4. 相对误差限:相对误差绝对值的一个上限 $\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{ x^* } \geq \frac{ x - x^* }{ x^* } = e_r $;
	5. 有效数字与误差:
	(1) x^* 具有 n 位有效数字,则其相对误差限 $\varepsilon_r \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$;
	(2) 近似值 x 的相对误差限 $\varepsilon_r \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-n+1}$, 则其至少有 n 位有效数字。
误差传播:	
1. 函数 $f(x)$ 的误差限估计式	
$\varepsilon(f(x)) \approx f'(x) \varepsilon(x)$	
2. 四则运算的误差传播	
$\varepsilon(x \pm y) = \varepsilon(x) + \varepsilon(y)$	
$\varepsilon(x \cdot y) \approx y \varepsilon(x) + x \varepsilon(y)$	
$\varepsilon\left(\frac{x}{y}\right) \approx \frac{ y \varepsilon(x) + x \varepsilon(y)}{y^2}, (y \neq 0)$	
设计数值型算法的基本原则:	
1. 避免两个相近数相减;	
2. 避免除法中除数的数量级远小于被除数;	
3. 合理安排运算顺序;	
4. 注意运算步骤的简化。	

习题一

1. 填空题

(1) 在数值计算中为避免损失有效数字, 尽量避免两个_____数作减法运算; 为避免误差的扩大, 也尽量避免分母的绝对值_____分子的绝对值;

(2) 误差有四大来源, 数值分析主要处理其中的_____和_____;

(3) 有效数字越多, 相对误差越_____;

2. 用例 1.3 的算法计算 $\sqrt{10}$, 迭代 3 次, 计算结果保留 4 位有效数字。

3. 以下各数都是对准确值进行四舍五入得到的近似数, 指出它们的有效数位、误差限和相对误差限。

$$x_1 = 0.3040, x_2 = 5.1 \times 10^9, x_3 = 400, x_4 = 0.003346, x_5 = 0.875 \times 10^{-5}$$

4. 已知 $e = 2.71828\cdots$, 试问其近似值 $x_1 = 2.7, x_2 = 2.71, x_3 = 2.718$ 各有几位有效数字? 并给出它们的相对误差限。

5. 已知 $x_1 = 1.42, x_2 = -0.0184, x_3 = 184 \times 10^{-4}$ 的绝对误差限均为 0.5×10^{-2} , 问它们各有几位有效数字?

6. 若钢珠的直径 d 的相对误差为 1.0%, 则它的体积 V 的相对误差将为多少(假定钢珠为标准的球形)?

7. 若跑道长的测量有 0.1% 的误差, 对 400 m 成绩为 60 s 的运动员的成绩将会带来多大的误差和相对误差。

8. 为使 $\sqrt{20}$ 的近似数相对误差小于 0.05%, 试问该保留几位有效数字。

9. 下列各式应如何改进, 使计算更准确:

$$(1) y = \frac{1}{1+2x} - \frac{1-x}{1+x}, \quad (|x| \ll 1)$$

$$(2) y = \sqrt{x + \frac{1}{x}} - \sqrt{x - \frac{1}{x}}, \quad (x \gg 1)$$

$$(3) y = \frac{1 - \cos 2x}{x}, \quad (|x| \ll 1)$$

$$(4) y = \sqrt{p^2 + q^2} - p, \quad (p > 0, q > 0, p \gg q)$$

$$(5) \ln(x - \sqrt{x^2 - 1}), \quad (x \gg 1)$$

$$(6) e^x - 1 \quad (|x| \ll 1)$$

第 2 章

线性方程组的解法

设有线性方程组:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (2.1)$$

常记为矩阵形式

$$Ax = b \quad (2.2)$$

根据线性代数知识, 若 $\det(A) \neq 0$, (2.2) 的解存在且唯一。

线性方程组有直接解法和迭代解法两大类。直接解法即经过有限次的算术运算, 可以求得 (2.1) 的精确解 (假定计算过程没有舍入误差); 迭代法即将 (2.1) 变形为某种迭代公式, 给出初始解 $x^{(0)}$, 用迭代公式得到近似解的序列 $\{x^{(k)}\}$, $k=0, 1, 2, \dots$, 在一定的条件下 $x^{(k)} \rightarrow x^*$ (精确解)。

2.1 消元法

消元法是求解线性方程组的一类重要的直接解法, 是将线性方程组通过初等变换化为上三角形方程组, 再回代得其解。

2.1.1 Gauss 消元法

例 2.1 解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 1 \end{cases} \quad (2.3)$$

$$\begin{cases} 2x_1 + 7x_2 + 5x_3 = 6 \end{cases} \quad (2.4)$$

$$\begin{cases} x_1 + 4x_2 + 9x_3 = -3 \end{cases} \quad (2.5)$$

解 第一步, 将 (2.3) 乘 -2 加到 (2.4), (2.3) 乘 -1 加到 (2.5), 得到

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 1 \end{cases} \quad (2.3)$$

$$\begin{cases} 3x_2 - x_3 = 4 \end{cases} \quad (2.6)$$

$$\begin{cases} 2x_2 + 6x_3 = -4 \end{cases} \quad (2.7)$$

第二步,将(2.6)乘 $-\frac{2}{3}$ 加到(2.7),得到

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 1 \end{cases} \quad (2.3)$$

$$\begin{cases} 3x_2 - x_3 = 4 \end{cases} \quad (2.6)$$

$$\begin{cases} \frac{20}{3}x_3 = -\frac{20}{3} \end{cases} \quad (2.8)$$

回代:解(2.8)得 x_3 ,将 x_3 代入(2.6)得 x_2 ,将 x_2, x_3 代入(2.3)得 x_1 ,最后得到解 $x^* = (2, 1, -1)^T$ 。

容易看出第一步和第二步相当于增广矩阵 $[A:b]$ 在作行变换,用 r_i 表示增广阵 $[A:b]$ 的第 i 行:

$$[A:b] = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 \\ 2 & 7 & 5 & 6 \\ 1 & 4 & 9 & -3 \end{pmatrix} \xrightarrow[r_3 \leftarrow -r_1 + r_3]{r_2 \leftarrow -2r_1 + r_2} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 3 & -1 & 4 \\ 0 & 2 & 6 & -4 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_3 \leftarrow -\frac{2}{3} \times r_2 + r_3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 3 & -1 & 4 \\ 0 & 0 & \frac{20}{3} & -\frac{20}{3} \end{pmatrix}$$

由此看出上述过程是逐次消去未知数的系数,将 $Ax=b$ 化为等价的上三角形方程组,然后回代解之,这就是 Gauss 消元法。

Gauss 消元法解线性方程组的公式为:

1. 消元

(1) 令

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} \quad (i, j = 1, 2, \dots, n)$$

$$b_i^{(1)} = b_i \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

(2) 对 $k=1$ 到 $n-1$,若 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$,进行:

$$\begin{cases} l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \\ a_{ik}^{(k+1)} = 0 \\ a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik} \times a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - l_{ik} \times b_k^{(k)} \end{cases} \quad (2.9)$$

$$(i, j = k+1, k+2, \dots, n)$$

2. 回代, 若 $a_{nn}^{(n)} \neq 0$

$$\begin{cases} x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}} \\ x_i = \frac{1}{a_{ii}^{(i)}} \left(b_i^{(i)} - \sum_{j=k+1}^n a_{ij}^{(i)} x_j \right) \quad (i = n-1, n-2, \dots, 1) \end{cases} \quad (2.10)$$

以上过程中,消元过程要求 $a_{ii}^{(i)} \neq 0, (i=1, 2, \dots, n-1)$,回代过程则进一步要求 $a_{nn}^{(n)} \neq 0$ 。

定理 2.1 $Ax=b$ 能用 Gauss 消元法求解的充要条件是 A 的各阶顺序主子式不为零。