高等学校教材

计算方法

张世禄　何洪英　编著

電子工業出版社
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY　http://www.phei.com.cn

高等学校教材

计算方法

张世禄　何洪英　编著

電子工業出版社
Publishing House of Electronics Industry
北京 • BEIJING

内容简介

本书比较全面地介绍了科学与工程计算中常用的计算方法，具体介绍了这些计算方法的基本理论与实际应用，同时对这些数值计算方法的计算效果、稳定性、收敛效果、适用范围以及优劣性与特点也做了简要分析。全书共11章，主要介绍数值代数和数值逼近中常用的实用算法，书中的所有算法都用带计算过程和计算条件的数学语言描述。凡可以手算的算法都附有带计算过程的算例。书中较为详细地介绍了变带宽压缩存储平方根法和压缩存储Seidel迭代法，并附有C程序。书中所有算例的结果都用程序验证过，保证无错，书中有些内容是作者的科研成果。

本书可作为高等院校数学与应用数学、信息与计算科学、应用物理学、计算机科学等专业的高年级本科生和工科硕士研究生使用，也可供从事科学与工程计算的科技工作者参考。

图书在版编目（CIP）数据

计算方法/张世禄，何洪英编著. —北京：电子工业出版社，2010.8
（高等学校教材）
ISBN 978-7-121-11426-7

Ⅰ. ①计… Ⅱ. ①张… ②何… Ⅲ. ①计算方法－高等学校－教材 Ⅳ. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2010）第 140804 号

策划编辑：王赫男
责任编辑：谭海平
印　　刷：北京市顺义兴华印刷厂
装　　订：三河市双峰印刷装订有限公司
出版发行：电子工业出版社
　　　　　北京市海淀区万寿路 173 信箱　邮编　100036
开　　本：787×980　1/16　印张：15　字数：324 千字
印　　次：2010 年 8 月第 1 次印刷
印　　数：4 000 册　　定价：27.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题，请向购买书店调换。若书店售缺，请与本社发行部联系，联系及邮购电话：（010）88254888。

质量投诉请发邮件至 zlts@phei.com.cn，盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

服务热线：（010）88258888。

前　言

计算方法是数学中的一个古老分支，自计算机问世之后，计算方法得到了飞速发展．计算方法是计算（computing）学科各专业、数学各专业学生的必修课，也是不少理工专业学生的必修课和选修课．考虑到传统关系，主要考虑到课时关系，计算方法不包含有限单元法、快速 Fourier 变换等算法，也不包含最优逼近、最优化算法，仍只由数值代数和数值逼近组成．

本书的特点如下．

1．全书所有算法都用带计算过程和计算条件的数学语言描述．

计算方法主要是计算机使用的算法，计算机只能直接或间接识别人们用计算机语言编写的程序．程序也是算法，是计算机使用的算法．程序设计就是将非计算机使用的算法翻译成计算机使用的算法．带计算过程和计算条件的数学公式和计算机语言有一对一的映射关系，很容易翻译成计算机语言．

现有计算方法教材中，有少数算法是用自然语言描述的，例如，解 $f(x)=0$ 的对分法，求三角矩阵特征值所用的对分法；还有些算法是用表格加算例表述的，例如，牛顿插值多项式系数计算，不少书中仅给出了一个具体算例的差商表．一般的计算方法书中，绝大多数算法虽然都是用数学公式表示的，但是未明确给出计算过程和计算条件，不能直接翻译成计算机语言．

将算法用带计算过程和计算条件的数学公式表示，不仅方便于程序设计，也便于手算．

2．纠正了一般计算方法中不当的提法和结论．

现行教材中有些提法和结论是有问题的，有些提法不准确，不能体现实质．例如，在解方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的直接法的稳定性分析中，一般教材的结论是条件数 $\mathrm{cond}_p(\boldsymbol{A})$愈大，稳定性愈差，未能体现算法．本书的结论是：直接法的稳定性与算法有关，与方程组系数矩阵本身的特性有关，还与右端扰动大小有关，但与系数矩阵的条件数没有直接关系．这样既弄清了高斯列主元消元法、全主元法为什么能求解高斯消元法中所不能求解的问题或者误差很大的问题，又弄清了为什么平方根法、改进平方根法要求方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 中 $\boldsymbol{A}$ 的本身性能必须较好才能使用的原因，这样提法才和算法有关．又如在求解 $f(x)=0$ 的牛顿法收敛性定理中，一般认为定理［$f(a)f(b)<0$，$f'(x)\neq 0$，$f''(x)$ 不变号，$f(x_0)f''(x)>0$］理论性强，用处大，而定理在根的邻域内牛顿法收敛且是二阶收敛实用性差．我们的结论正好相反，原因是牛顿法并不麻烦，但要鉴别一个二阶导数不变号尚未见可行的数值算法．恰恰相反，后一定理的可操作性好，因为对任何求根区间，我们总可以将之划分成等距的 $\boldsymbol{n}$ 等份，只要 $\boldsymbol{n}$ 充分大，任何子区间或者有一个根，或者无根，只要有根，该子区间就是根的邻域，而且前一个定理只能在 $[a,b]$ 上有一个根才管用，而后者可求所有根（单根）．再如在讲逆幂法的功能时，不少书讲逆幂法的功能是求 $\boldsymbol{A}$ 按模最小特征值及对应特征向量，实际上应强调是求 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的按模最大特征值及特征向量为好．因为数学上只关心按模最大特征值．工程物理问题只关心固有频

率（基频），或许还关心次频、第三频，所对应特征值为最大特征值、次大特征值等．实际上逆幂法并不单独使用，它总是和对称矩阵三对角化（镜面反射变换）对分法求指定特征值、原点平移配合使用的，它所求的特征值是 $\boldsymbol{A}$ 经过原点平移后的最小特征值，而不是 $\boldsymbol{A}$ 的最小特征值，一般教材中过分强调原点平移后会降低按模最大特征值和按模次大特征值之比，实际上原点平移可能改变特征值序号，还可能增大二者的比，在数值计算中也只和对分法和逆幂法配合使用才有意义．

3．强调实用和应用．

一般教材都讲迭代法可解大、中型代数方程组，但不介绍压缩存储．实际上若不压缩存储，无论是在算法复杂性上和内存开销上，迭代法都不及直接法，更不及变带宽平方根法或改进平方根法（一般书不介绍），只是对于高阶线性代数方程组计算误差小一些．本书增加了压缩存储算法，压缩存储算法的计算公式与对应的非压缩存储算法的计算公式相比并不复杂，其程序复杂程度比非压缩存储的还要小．

4．对绝大多数（除压缩存储迭代法外）算法都给出了手算算例，其计算结论都用程序做了验证．

书中除了压缩存储赛得尔迭代法和变带宽平方根法外，都给出了手算算例，并在算例中给出了算法计算过程，对压缩存储赛得尔迭代法及程序设计难度较大的算法，例如高斯全主元消元法、镜面反射变换等才附了程序．

计算方法是数学的分支，学生不做习题很难掌握算法，不给出算例也不方便学生做题，不易提高学生的抽象归纳能力，计算方法虽和程序设计相关，但两者不相等，所以不必每个算法都附程序．程序中的算例也不能代替手算算例．冯康先生所著书中在计算每个算法时都附了程序，但冯康先生的计算方法实质上是用文字书写的软件包，不主要作为教学用．本书给出的所有算例都经过了计算机程序的验证，确保无误．

5．增加了一些新算法．

本书增加了幂级数型插值多项式及泰勒级数数值算法，在推导 Adams 线性多步法时，直接使用了幂级数插值多项式，给出了公式推导过程，而其他教材只是讲可使用牛顿插值多项式推导线性多项式，却未给出推导过程（原因在于太麻烦）．

此外，本书给出了一般牛顿积分代数精确度的证明，给出了高斯积分代数精确度的简洁证明，对牛顿插值多项式的计算也做了改进（仿秦九韶计算）……

本书由张世禄和何洪英编写，编写书稿时得到了数学与信息学院领导的大力支持，得到了我的学生陈豫眉、熊华、谭代伦的帮助，这里特以致谢！

张世禄　何洪英

2010 年 6 月于四川南充

目　录

第1章　误差和算法选择

误差是一习惯用语，误差不是失误引起的差错.

1.1　误差概念

误差与失误无关，误差对于原始数据而言是指用于计算时它（们）与真实值之间的差；对于计算结果而言是指它（们）与理论结果之间的差. 误差和准确值没有直接关系，准确值是存在的，但是人类所有文献和资料中的值都不是准确值.

1.1.1　误差分类

若按误差来源分类，误差可分为如下四类.

1. 模型误差

对于任何实际计算问题，计算之前至少要建立数学模型. 对于工程物理问题，在建立数学模型之前还要建立物理模型. 物理模型和数学模型的建立都是经过高度简化和抽象的结果. 简化和抽象自然和真实问题有了差异，这种差异称为模型误差.

例如，“方桌”面积可用算式

$$S = a^2 \tag{1.1-1}$$

计算.

$S = a^2$ 就是数学模型. 世界上没有绝对的平面，也没有四边相等且四个角都是直角的几何正方形，因此式（1.1-1）是简化和抽象的结果. 这也是将方桌打上引号的原因. 若一定按真实桌面计算面积，则需要做重积分运算，而边界条件是一条无法用解析算式描述的空间封闭曲线. 显然，按式（1.1-1）所算出的面积值是可接受的且有意义的，真正的面积至少是目前算不出来的.

又如某研究站研制一种冶炼控制系统. 研制人员将冶炼的材料视为绝对绝热的，遵守热力学第一定律. 同时将炉体当做无限长的直圆柱. 这样就把一个三维的边界复杂的热学问题变成了一个一维的可用热传导方程描述的简单问题：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = a^2 \dfrac{\partial^2 u}{\partial r^2} \\ \text{边界条件略} \end{cases} \tag{1.1-2}$$

世界上没有绝对绝热的材料，也没有几何中的直圆柱，更不可能无限长，但按式（1.1-2）

可及时算出炉体中半径为r处任何时刻的相关参数值，而且比人工从炉中用特制器皿取出溶液再由人工送到化验地化验后得到相关值既“及时”又“准确”得多．当然，按式（1.1-2）也不可能得到准确值．

计算方法里不考虑模型误差，或者说认为所做物理模型和数学模型都是合理的，或是满足用户要求的．

2．测试误差

所有实际计算问题在计算前都有一定量的已知数据，这些数据绝大多数都是由仪器仪表测量出来的．所有仪器仪表都有测量精度．测量精度决定于该仪器仪表的最小刻度或最小量度．

比最小刻度或最小量度小的部分只能用四舍五入法表示．由此带来的误差称为测试误差．测试误差为该仪器仪表的最小刻度或量度的一半．例如木匠用卷尺或角尺测量家具长度，卷尺和角尺的最小刻度为 1 mm，测试误差为 0.5 mm．测试误差实际上就是最大测试误差，常用绝对值表示．

3．舍入误差

所有工程物理问题的计算都不是人工完成的，而是计算机完成的．所有数都存放在计算机的存储器里（对于较大型问题及数据较多的问题，原始数据先以文件方式存入外存储器，程序运行时再读入内存器），存储器由若干字节组成，一个数可存放在一个字节里，也可存放在两个字节里，还可存放在 4 个字节里，甚至可存放在 16 个字节里（4 倍精度数）．即使存放在 16 个字节里，也不可能存放无理数或超过 16 个字节所允许的长度的更长数．在计算机中，整数或长整数是没有误差的．但实（型）数是用尾数和指数表示的．尾数中第 1 个数表示数符，指数中第 1 个数为阶符，尾数和指数的数字（二进制）个数是有限的．比尾数所容许的个数多的数后面的数字只能舍或入，若尾数（去掉数符）共k位，则对有$k+1$位数字（后面介绍）的数的第$k+1$位用舍入处理（转换成十进制数后为四舍五入）．对于阶比指数中所允许的最大值还大的数，当阶符为正时，溢出．当阶符为负时，以 0 表示．由此所产生的误差称为舍入误差．

4．截断误差

计算方法由两部分组成．其一是数值代数，其二是数值逼近．对于数值逼近部分，常用多项式或有理式代替原来的函数，或者用多项式代替原来的函数再计算，截断误差是算法本身的误差．

高等数学中有计算公式

$$e=\sum_{i=0}^{\infty}\frac{1}{i!}=\sum_{i=0}^{n}\frac{1}{i!}+\sum_{i=n+1}^{\infty}\frac{1}{i!}.$$

实际计算时，只能用

$$e \approx \sum_{i=0}^{n} \frac{1}{i!}.$$

$\sum_{i=n+1}^{\infty} \frac{1}{i!}$ 就是截断误差.

1.1.2　误差表示法和误差限

1．误差表示法

误差大小可用绝对误差和相对误差两种形式表示.

【定义 1】 若 x^* 为理论值或真实值，x 为计算值或测量值，则

$$\varepsilon(x) = \Delta x = x^* - x \tag{1.1-3}$$

称为绝对误差.

人们使用绝对误差时，通常用其绝对值．只有少数领域要考虑符号．例如在机械设计时，对于活塞和汽缸的加工，若以汽缸为准，则活塞的直径只能比汽缸直径小，误差（公差）只能为负.

单有绝对误差还不够，还须定义相对误差.

【定义 2】 若 x^* 为理论值或真实值，x 为计算值或测量值，则

$$\varepsilon_r(x) = \frac{\varepsilon(x)}{x^*} = \frac{\Delta x}{x^*} \tag{1.1-4}$$

为相对误差．由于 x^* 是不知道的，所以式（1.1-4）常表述成 $\frac{\Delta x}{x}$，相对误差的具体值也是不知道的，也是算不出来的，只能给出一个范围或量级.

2．误差限

误差限也有绝对误差限和相对误差限之分.

所谓绝对误差限，是指计算某一问题时，用户所允许的（绝对值）最大绝对误差．绝对误差限可用 η 表示：

$$\eta = \max|\varepsilon(x)| = \max|x^* - x| \tag{1.1-5}$$

所谓相对误差限，是指计算某一问题时，用户所允许的（绝对值）最大相对误差．相对误差限可用 η_r 表示：

$$\eta_r = \max|\varepsilon_r(x)| \tag{1.1-6}$$

数学模型确定后，选择算法的第一依据就是误差限．软件人员选择算法时，该算法若有截断误差，那么截断误差不能超过误差限．对于用仪器仪表所测得的各数据，不仅开始时不允许超过用户所给定的误差限，同时由测试误差而引起的计算误差也不能超过误差限．为此须选择足够精度的仪器仪表，程序中也应根据误差限确定是否使用双精度数或 4 倍精度数.

前面介绍的四类误差通常称为先天误差，而算法和计算过程因原有初始误差而派生出的计算误差属于后天误差．后天误差的大小由算法稳定性决定.

1.1.3 误差运算

由于绝对误差和相对误差的具体值都是不知道的，故误差运算只能是近似计算．可以将 Δx 作为 $\mathrm{d}x$ 处理．计算方法里没有专门介绍误差运算的算法．但是在算法选择中要用到误差运算知识．

将 $\varepsilon_r(x)$ 近似表示成

$$\varepsilon_r(x)=\frac{\Delta x}{x^*}\approx\frac{\mathrm{d}x}{x}=\mathrm{d}\ln x \tag{1.1-7}$$

当 $x<0$ 时，$\dfrac{\mathrm{d}x}{x}=\dfrac{\mathrm{d}x'}{x'}=\mathrm{d}\ln x'$（$x'=-x$），将 x' 换名为 x，则又变成了式（1.1-7）．为了叙述方便，计算时式（1.1-7）中“≈”用“=”代替．书中大多数“=”实际上都是“≈”号，这点以后不再提及．

1．乘积的相对误差

乘积的相对误差为

$$\varepsilon_r(x_1x_2)=\mathrm{d}\ln x_1x_2=\mathrm{d}(\ln x_1+\ln x_2)=\varepsilon_r(x_1)+\varepsilon_r(x_2) \tag{1.1-8}$$

2．商的相对误差

由式（1.1-8）可直接得出

$$\varepsilon_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right)=\varepsilon_r(x_1)-\varepsilon_r(x_2) \tag{1.1-9}$$

3．和的相对误差

和的相对误差为

$$\begin{aligned}\varepsilon_r(x_1+x_2)&=\frac{\mathrm{d}(x_1+x_2)}{x_1+x_2}=\frac{\mathrm{d}x_1}{x_1+x_2}+\frac{\mathrm{d}x_2}{x_1+x_2}\\&=\frac{x_1}{x_1+x_2}\frac{\mathrm{d}x_1}{x_1}+\frac{x_2}{x_1+x_2}\frac{\mathrm{d}x_2}{x_2}\\&=\frac{x_1}{x_1+x_2}\varepsilon_r(x_1)+\frac{x_2}{x_1+x_2}\varepsilon_r(x_2)\end{aligned} \tag{1.1-10}$$

由式（1.1-10）可以看出，当 $x_1\approx -x_2$ 时，$\varepsilon_r(x_1+x_2)$ 会相当大．因此要避免两个相近数相减．另外，当 $x_1\gg x_2$ 时，$\varepsilon_r(x_1+x_2)\approx\varepsilon_r(x_1)$．

1.1.4 有效数字

在计算机中数字只有整型数（含长整型与短整型）和实型数两种，整型数都是整数，整数中的所有数字都是有效数字．有效数字只针对实型数．计算机算出的数和输出的数的数字不一定都是有效数字．有效数字通常与测试误差和误差限有关．

【定义3】 近似值 x 准确到小数点后第 n 位，或者称从小数点后第 n 位数字到 x 最左边的