数学理论与应用系列

计算方法

李大美 李素贞 朱方生 编著

WUHAN UNIVERSITY PRESS
武汉大学出版社

数学理论与应用系列

计算方法

李大美 李素贞 朱方生 编著

WUHAN UNIVERSITY PRESS
武汉大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/李大美,李素贞,朱方生编著.—武汉：武汉大学出版社，2012.8

数学理论与应用系列

ISBN 978-7-307-10183-8

Ⅰ.计…　Ⅱ.①李…　②李…　③朱…　Ⅲ.计算方法—高等学校—教材　Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 204226 号

责任编辑:顾素萍　　责任校对:刘　欣　　版式设计：马　佳

出版发行：**武汉大学出版社**　(430072　武昌　珞珈山)

(电子邮件：cbs22@ whu. edu. cn　网址：www. wdp. com. cn)

印刷:通山金地印务有限公司

开本：720×1000　1/16　印张:15.75　字数:279 千字　插页:1

版次:2012 年 8 月第 1 版　2012 年 8 月第 1 次印刷

ISBN 978-7-307-10183-8/O·479　定价:26.00 元

前　言

随着计算机的广泛应用，工程和科学计算的重要性已人所共知。学习和掌握计算机上常用的数值计算方法及有关的基础理论知识已成为工科高等教育的一个重要内容，计算方法这门课程已被许多工科院系列为大学生的必修课。

本书是根据《高等工业学校数值计算方法课程教学基本要求》，在总结武汉大学工科专业多年教学实践的基础上，为高等工科院校大学生开设计算方法课程而重新编写的。

本书比较通俗地介绍了计算机上行之有效的常用数值计算方法的原理、结论及推导过程，并列举大量计算实例，以加深读者对这些方法的理解。对处理同一问题的几种不同的数值方法进行了比较和分析。本书介绍的方法都给出了在计算机上实现的详细步骤和程序框图，并附有用C语言编写的上机程序供参考。读者也可根据学过的某种计算机语言，独立地针对所提出的实际问题，选择合适的方法，按照书中所给出的框图编制程序上机计算。因此，本书也可作为本、专科与函授的计算机有关专业的教材，以及从事数值分析方面的科研和工程技术人员的参考书。

本书共分7章，为了适应不同程度读者的需要，有些内容加了星号“*”。若只安排36个学时的授课时间，加星号的内容可不讲授。全书的内容适用于54个学时的讲授。另外，应加上机实习12～18个学时。

本书第一、七章及附录由李素贞编写，第二、三、四章由朱方生编写，第五、六章由李大美编写，全书由李大美统稿。在编写过程中，得到了武汉大学数学与统计学院许多老师的关心和支持，在此深表感谢！

由于编写水平有限，书中错误和不妥之处，衷心希望读者提出宝贵意见。

编　者

2012年8月

于武汉大学

目　录

第一章 绪 论

1.1 计算方法研究的对象和特点

计算方法也称为**数值分析**，它是专门研究求解各种数学问题的数值计算方法. 众所周知，传统的科学研究方法有两种：理论分析和科学实验. 今天随着计算机技术的飞速发展和计算数学方法与理论的日益成熟，科学计算已成为第三种科学研究的方法和手段. 科学计算的物质基础是计算机，大家知道，计算机只能做加减乘除等算术运算和逻辑运算，而数学运算的范围极其广阔，既有数学运算，也有代数运算，还有各种各样的函数运算. 同时由于生产实践和科学实验中提出的各种问题，在建立了数学模型之后，并不能立刻用计算机直接求解，还必须研究解决适合于计算机上采用的计算这些数学模型的计算方法，将数学公式转化成一系列相应的算法步骤，并由此出发编制出一套正确的计算程序，然后上机计算才能得出有用的结果. 用计算机进行科学计算解决实际问题的基本过程如图 1-1 所示.

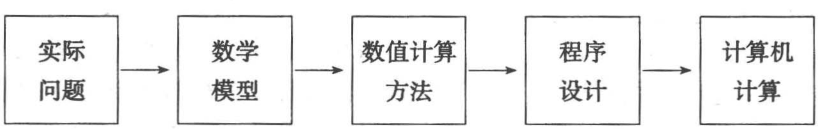

图 1-1

根据数学模型提出的问题，建立求解问题的数值计算方法并进行方法的理论分析，直到编出算法程序上机算出结果，以及对结果进行分析的过程，便是计算数学要完成的任务. 因此，计算方法就是研究用计算机解决数学问题的方法及其理论. 它作为数学的一个分支，是以纯数学为基础，把理论和实际计算结合起来，着重研究面向计算机的、能够解决实际问题的数值方法和理论. 具体地说，它首先要构造可计算出各种问题解的数值计算方法；然后分析方法的收敛性、稳定性和误差. 由于是面向计算机的，它还要分析方

法的时间复杂度和空间复杂度(即计算时间和存储空间的问题)，这些都是必不可少的.

对于给定的数学问题，常常可以提出很多种不同的数值计算方法. 如何评价这些方法的优劣呢？一般来说，一个好的方法应具有如下特点：

(1) 面向计算机，要根据计算机的特点，构造实际可行的有效算法，使之易于上机实现.

(2) 有可靠的理论分析，从理论上能够保证方法的收敛性和稳定性.

(3) 要有好的计算复杂度，即时间复杂度和空间复杂度.

(4) 要经得起数值实验的检验. 也就是说，算法除了理论上要满足上述三点外，还要通过数值实验来证明其是行之有效的方法.

作为一个例子，我们来看一个简单的算法问题. 设要对给定的 x 求多项式

$$P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 \tag{1.1}$$

的值. 一种计算过程是直接计算 $P(x)$ 的每一项后逐项求和，这样要做 $\dfrac{n(n-1)}{2}$ 次乘法和 n 次加法. 另一种就是先将 $P(x)$ 变形为如下形式：

$$P(x) = (((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \cdots + a_1)x + a_0, \tag{1.2}$$

再由内层向外层计算. 如设 $u_0 = a_n$，

$$u_k = (((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \cdots + a_{n-k+1})x + a_{n-k},$$

就可以得到一个递推公式

$$u_k = u_{k-1}x + a_{n-k}, \quad k = 1,2,\cdots,n. \tag{1.3}$$

这样的计算过程只需要计算 n 次乘法和 n 次加法. 这种算法和上一种算法相比，不仅逻辑结构简单，而且计算量也明显减少了. 多项式求值的这种算法称为**秦九韶算法**，它是我国宋朝数学家秦九韶最先提出的.

对于秦九韶算法的实现，只要依次计算 u_k，最后返回 u_n 的值即可. 又因为中间的 u_k 不需要，就没有保存的价值，于是只需一个变量 u 进行计算就可以了，具体如图 1-2 所描述.

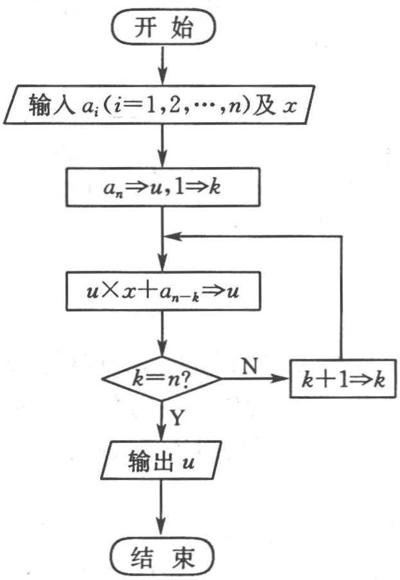

图 1-2 秦九韶算法框图

1.2 误差的来源及基本概念

1.2.1 误差的来源

计算方法着重研究如何将一个数学问题的求解转化为一个可以在计算机上进行的计算问题. 在这个转化过程中通常会采用将实际问题简化近似、连续问题离散化、四舍五入等手段. 而这些会导致数值计算结果和原问题的结果间存在差异. 这种差异被称为误差，其定义在后面会详细介绍. 误差就其来源而言可以分为 4 类.

1. 模型误差

用数值计算方法解决科学技术问题时，首先必须建立数学模型. 由于不可能把所有的因素都考虑进去，往往只是抓住主要因素而忽略次要因素，因此实际问题的数学模型都是近似的，它与实际问题之间总存在着误差. 由此产生的数学模型的解与实际问题的解之间的误差称为**模型误差**.

2. 观测误差

数学模型中往往含有一些物理量，它们的值通常是由观测或实验得到的，与实际数据本身总存在有误差，这种误差称为**观测误差**.

3. 截断误差

当实际问题的数学模型很复杂，因而不能获得其精确解时，只能用数值计算方法求出它的近似解. 数学模型的精确解与数值计算方法的近似解之间的误差称为**截断误差**. 例如，利用泰勒公式可以将函数 e^x 表示为

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \frac{x^{n+1}}{(n+1)!}e^{\theta x}, \quad 0 < \theta < 1.$$

对给定的 x 要计算函数值 e^x 时，可以采用近似公式

$$e^x \approx I = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!},$$

则此近似公式的截断误差为

$$R = e^x - I = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!}e^{\theta x}, \quad 0 < \theta < 1.$$

4. 舍入误差

由于计算机的字长有限，对超过位数的数字要进行舍入，由此产生的误差称为**舍入误差**. 例如，用 2.718 28 作为无理数 e 的近似值产生的误差就是

舍入误差.

截断误差和舍入误差(包括原始数据的误差)将是数值近似方法误差分析的主要研究对象，讨论它们在计算过程中的传播对计算结果的影响，并找出误差的范围，对研究误差的渐进特性和改进算法近似程度具有重大的实际意义.

1.2.2 误差的概念和有效数字

定义 1.1 设某数的精确值为 x^*，其近似值为 x，那么 x^* 与 x 之差

$$E = x^* - x$$

称为近似值 x 的**绝对误差**，简称**误差**. 显然误差是可正可负的.

一般地，某数的精确值 x^* 是不知道的，因而 E 不能求出. 但往往可以估计出它的大小范围，也即可以确定一个正数 ε，使得

$$|E(x)| = |x - x^*| \leqslant \varepsilon.$$

此时，称 ε 为 x 的**绝对误差限**. 有时也用

$$x^* = x \pm \varepsilon$$

表示近似值 x 的精确值 x^* 或精确值 x^* 的所在范围. 绝对误差是有单位的. 例如，用有毫米刻度的米尺去测量一长度为 x^* 的物体，得其近似值为 x，那么 x^* 与 x 之差的绝对误差限为 0.5 mm，即

$$|x^* - x| \leqslant 0.5 \text{ mm}.$$

由于对各种不同的问题进行测量后所得的结果，其数值相差很大，用绝对误差去衡量这个结果的好坏是不客观的. 例如，甲用米尺测量 10 m 长的物体，所产生的绝对误差为 2 cm，乙用同一米尺测量 1 m 长的物体，所产生的绝对误差为 1 cm，单凭绝对误差的大小就说明乙测量的精确度比甲好，显然是不对的. 很明显，测量 1 m 时绝对误差为 1 cm 比测量 10 m 时绝对误差为 2 cm 的精确度要差. 这说明一个近似值的精确度除了要看绝对误差的大小外，还与精确值本身的大小有关. 因此引入相对误差这一概念. 记

$$E_r(x) = \frac{E(x)}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*},$$

称 $E_r(x)$ 为近似值 x 的**相对误差**.

由于精确值 x^* 一般不知道，通常将

$$E_r(x) = \frac{x^* - x}{x}$$

作为近似值 x 的相对误差.

若能求出一个正数 ε_r，使得

$$|E_r(x)| \leqslant \varepsilon_r,$$

则ε_r称为近似值x的**相对误差限**. 相对误差是无量纲的数，通常用百分比表示.

根据上述定义可知，甲测量时的相对误差

$$|E_r(x)| = \frac{2}{1000} = 0.2\%;$$

乙测量时的相对误差

$$|E_r(x)| = \frac{1}{100} = 1\%.$$

可见甲测量结果比乙精确. 所以，在分析误差时，相对误差更能刻画误差的特性.

大家知道，当数值x有很多位数时，由于计算机字长的限制，常常按“四舍五入”原则得到x^*的近似值x. 例如，$\mathrm{e}=2.718\,281\,8\cdots$，按四舍五入取三位小数，得e的近似值2.72；取6位小数，得近似值为2.718 28. 不管取几位小数，所得到的近似值，其绝对误差都不会超过其末位数的半个单位，即

$$|\mathrm{e}-2.72| \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{-2}, \quad |\mathrm{e}-2.718\,28| \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{-6}.$$

下面我们将四舍五入抽象成数学语言，并引入一个新的名词“有效数字”来描述它.

定义 1.2 如果近似值x的误差限是某一位的半个单位，该位到x的第一位非零数字共有n位，则称x**有**n**位有效数字**.

任何一个实数x^*，经四舍五入后得到的近似值x都可以表示为如下标准形式：

$$\begin{aligned} x &= \pm(a_1\cdot 10^{-1}+a_2\cdot 10^{-2}+\cdots+a_n\cdot 10^{-n})\cdot 10^m \\ &= \pm 0.a_1a_2\cdots a_n\cdot 10^m. \end{aligned} \tag{1.4}$$

如果其绝对误差限满足

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

则称近似值x**具有**n**位有效数字**，其中m为整数，$a_i\in\{0,1,\cdots,9\}$，$i=1,2,\cdots,n$，且$a_1\neq 0$.

根据有效数字的定义，容易验证e的近似值2.718 28具有6位有效数字. 事实上，

$$\begin{aligned} 2.718\,28 = (&2\times 10^{-1}+7\times 10^{-2}+1\times 10^{-3}+8\times 10^{-4} \\ &+2\times 10^{-5}+8\times 10^{-6})\times 10. \end{aligned}$$

这里$m=1$，$n=6$，而

$$|\mathrm{e}-2.718\,28| = 0.000\,001\,828\cdots < \frac{1}{2}\times 10^{-5},$$

所以它具有 6 位有效数字. 有效数字不但给出了近似值的大小，而且还给出了它的绝对误差限. 例如，近似值 2 537.48, 0.342×10^{-2}, 0.3420×10^{-2} 的绝对误差限分别为 $\frac{1}{2}\times10^{-2}$, $\frac{1}{2}\times10^{-5}$, $\frac{1}{2}\times10^{-6}$. 特别要注意有效数字的指数记法，0.342×10^{-2} 与 0.3420×10^{-2} 是有区别的两个近似数，前者具有 3 位有效数字，而后者则具有 4 位有效数字.

有效数字与绝对误差、相对误差有如下性质：

性质1 若某数 x^* 的近似值 x 有 n 位有效数字，那么，这个近似值 x 的绝对误差限为

$$|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\cdot10^{m-n}.$$

由此看出，当 m 相同时，n 越大，则 $m-n$ 越小，从而有效位数越多，其绝对误差限越小.

性质2 用(1.4)表示的近似数 x，若具有 n 位有效数字，则其相对误差限为

$$|E_r(x)|\leqslant\frac{1}{2a_1}\cdot10^{-(n-1)}.$$

反之，若 x 的相对误差限为

$$|E_r(x)|\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\cdot10^{-(n-1)},$$

则 x 至少具有 n 位有效数字.

证 由性质 1 知，若 x 具有 n 位有效数字，则

$$|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\cdot10^{m-n}.$$

从而

$$|E_r(x)|=\left|\frac{x^*-x}{x}\right|\leqslant\frac{1}{2|x|}\cdot10^{m-n}\leqslant\frac{10^{m-n}}{2a_1\cdot10^{m-1}}$$
$$=\frac{1}{2a_1}\cdot10^{-(n-1)}.$$

反之，若 x 的相对误差限为

$$|E_r(x)|\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\cdot10^{-(n-1)},$$

由于

$$|E(x)|=|x|\cdot|E_r(x)|,\quad |x|<(a_1+1)\cdot10^{m-1},$$

故

$$|E(x)| \leqslant (a_1+1) \cdot 10^{m-1} \cdot \frac{1}{2(a_1+1)} \cdot 10^{-(n-1)} = \frac{1}{2} \cdot 10^{m-n},$$

所以 x 至少具有 n 位有效数字. ∎

由性质 2 可以看出，有效位数越多，相对误差限就越小. 这就是说，若近似数的有效位数越多，用这个近似数去近似代替准确值，其精度越高.

1.2.3 数值运算的误差估计

近似数参加运算后所得到的值也是近似值，存在误差，将这一现象称为**误差传播**. 数值运算中误差的传播情况比较复杂，主要表现在：算法本身可能有截断误差；初始数据在计算机内的浮点表示一般有舍入误差；每次运算一般又会产生新的误差，并且传播以前已经引入的误差；考虑到误差有正有负，误差的积累过程一般包括增长和相消的过程，并非简单的单调增长. 这些因素注定了对误差进行准确分析是困难的. 下面介绍一种常用的误差分析方法 —— 利用泰勒(Taylor) 公式分析函数计算中的误差传播情况.

设可微函数 $y=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 中的 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 是相互独立的. 精确值记为 $y^*=f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$，用它们的近似值进行计算，得到函数值的近似值记为 $y=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$. 利用多元函数的泰勒(Taylor) 公式可求得 y^* 的绝对误差和相对误差分别为

$$\begin{aligned} E(y) = y^* - y &\approx \sum_{i=1}^{n} f'_i(x_1,x_2,\cdots,x_n)(x_i^* - x_i) \\ &= \sum_{i=1}^{n} f'_i(x_1,x_2,\cdots,x_n)E(x_i), \end{aligned} \tag{1.5}$$

$$\begin{aligned} E_r(y) = \frac{E(y)}{y} &\approx \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{y} f'_i(x_1,x_2,\cdots,x_n) \frac{E(x_i)}{x_i} \\ &= \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{y} f'_i(x_1,x_2,\cdots,x_n)E_r(x_i). \end{aligned} \tag{1.6}$$

故有

$$\varepsilon(y) \approx \sum_{i=1}^{n} |f'_i(x_1,x_2,\cdots,x_n)|\varepsilon(x_i), \tag{1.7}$$

$$\varepsilon_r(y) \approx \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{x_i}{y} f'_i(x_1,x_2,\cdots,x_n)\right| \varepsilon_r(x_i). \tag{1.8}$$

由(1.7) 可得二元函数算术运算的误差限传播公式：

$$\varepsilon(x_1 \pm x_2) \approx \varepsilon(x_1) + \varepsilon(x_2), \tag{1.9}$$

$$\varepsilon(x_1 x_2) \approx |x_2|\varepsilon(x_1) + |x_1|\varepsilon(x_2), \tag{1.10}$$

$$\varepsilon\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \frac{|x_2|\varepsilon(x_1) + |x_1|\varepsilon(x_2)}{{x_2}^2} \quad (x_2 \neq 0). \tag{1.11}$$

由(1.8)可得二元函数算术运算的相对误差限传播公式：

$$\varepsilon_r(x_1 + x_2) \approx \max\{\varepsilon_r(x_1), \varepsilon_r(x_2)\} \quad (x_1x_2 > 0), \tag{1.12}$$

$$\varepsilon_r(x_1x_2) \approx \varepsilon_r(x_1) + \varepsilon_r(x_2) \quad (x_1x_2 \neq 0), \tag{1.13}$$

$$\varepsilon_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \varepsilon_r(x_1) + \varepsilon_r(x_2) \quad (x_1x_2 \neq 0). \tag{1.14}$$

这里需要说明的是，对于具体的一组数据，上面给出的误差限传播公式是实际误差的偏大估计. 如估计式(1.9)，它包括了误差 $E(x_1)$ 和 $E(x_2)$ 同号且同时达到误差限这一最坏的情况，实际情况往往并非这么坏.

1.3 选用和设计算法应注意的问题

利用计算机求数学模型的数值解，必须先设计算法，而算法的好坏，直接影响到计算机的使用效率，也影响到数值结果是否真实. 一般衡量算法的标准有：算法是否稳定，算法的运算次数和算法的存储量是否尽量少，同时还要考虑误差的传播等. 当这些要求不能兼备时，应根据需要，权衡利弊而作抉择. 一般地，选用和设计算法应注意如下几个问题.

1.3.1 选用数值稳定的计算公式

如果数值算法的计算舍入误差积累是可以控制的，则称其为**数值稳定的**；反之，称为**数值不稳定的**. 一个算法是否稳定，是十分重要的. 如果算法不稳定，那么数值计算的结果就会严重背离数学模型的真实结果. 下面我们通过一个例子加以说明.

计算定积分

$$I_n^* = \mathrm{e}^{-1}\int_0^1 x^n \mathrm{e}^x \mathrm{d}x, \quad n = 0,1,2,\cdots. \tag{1.15}$$

利用分部积分法不难求得递推关系式为

$$\begin{cases} I_n^* = 1 - nI_{n-1}^*, \\ I_0^* = 1 - \mathrm{e}^{-1} \approx 0.632\,1 = I_0. \end{cases} \tag{1.16}$$

由(1.16)可依次算出如下结果：

$$I_1 = 0.367\,9, \quad I_2 = 0.264\,2, \quad I_3 = 0.207\,4,$$
$$I_4 = 0.178\,4, \quad I_5 = 0.148\,0, \quad I_6 = 0.112\,0,$$