

计 算 方 法

沈克精 编著

海南国际新闻出版中心

计 算 方 法

沈克精 编著

海南国际新闻出版中心

琼新登字(05)号

责任编辑:薛奇一

封面设计:任 余

计 算 方 法

沈克精 编著

*

海南国际新闻出版中心出版发行

(570206 海口市南航路侨企大厦B座6楼)

总编辑:沈敏特

安徽杏花印刷厂印刷

新华书店经销

1995年6月第1版 1995年6月第1次印刷

开本 850×1168 毫米 1/32 印张 11

字数 260 千字 印数:0001—2000

ISBN7—80609—194—7/0·2

定价:10.50 元

前 言

本书是作者多年在安徽大学为数学系本科生以及理科有关专业的部分研究生讲授计算方法的内容，并结合作者近年来的研究成果编写而成的。全书包括微积分、线性代数、微分方程的数值方法等内容。着重介绍计算机上常用的计算方法，对算法的基本理论，都给予详细的推导，每一基本理论都配有相应的例题，每一章都附有相当数量的习题以便帮助读者加深理解各章的内容。

本书可作为大专院校理、工科的教材或参考书，也可供工程科技人员在数字计算机上解题的参考书。读者只要具备微积分和线性代数的基础知识，便能学好这门课程。

在编写过程中，安徽大学数学系郑祖麻教授以及数学系殷承元副主任，对本书提出了很多宝贵的意见，在此，谨向他们深切致谢！

由于水平有限，书中定有许多不妥乃至错误之处，敬请读者给予批评指正。

沈克精

1995年夏于安徽大学

内 容 简 介

本书是作者十多年来从事计算数学教学和科研的总结。全书分九章，着重介绍计算机上常用的计算方法，包括误差分析、插值方法、数值积分与微分、函数逼近、线性与非线性方程组的解法、迭代法、特征值与特征向量的计算及常微分方程数值解法等基础知识，还包含二重插值和二重积分的数值方法等新内容，对常用的数值方法，给出了算法的基本思想和算法的主要过程。

本书选材适当，系统性强，叙述由浅入深；通俗易懂，对重要的公式或定理都给予详细的推导与证明，有较丰富的例题，每章均配有相当数量的习题，便于自学与教学。

本书适合作高等院校的数学系（不包括计算数学专业）、计算机系、物理系、自动控制系等的大学生和研究生以及工科院校各有关专业的大学生和研究生开设计算方法课程的教材或参考书之用；也可作为业余科技大学和电视大学有关专业进修计算方法的用书以及工程科技人员在数字计算机上实际解题的参考书。

目 录

第一章	误 差	(1)
§ 1	引言	(1)
§ 2	误差的来源	(1)
§ 3	误差的基本概念	(3)
3-1	误差与误差限	(3)
3-2	相对误差与相对误差限	(5)
3-3	有效数字	(6)
3-4	有效数字与误差限的关系	(6)
§ 4	误差的运算	(9)
§ 5	数值计算中必须注意的问题	(10)
习题一		(14)
第二章	插值方法	(16)
§ 1	引言	(16)
§ 2	多项式插值问题的提法	(17)
2-1	多项式插值问题的提法	(17)
2-2	插值多项式的存在唯一性	(18)
§ 3	拉格朗日 (Lagrange) 插值多项式	(19)
3-1	基本插值多项式	(19)
3-2	拉格朗日插值多项式	(20)
§ 4	牛顿 (Neuton) 与埃特金 (Aitken) 逐次插值公式	(24)
4-1	差分	(24)
4-2	均差	(27)
4-3	牛顿插值多项式	(31)

4-4	用差分表示等距基点的插值公式	(32)
4-5	埃特金逐次插值公式	(41)
§ 5	插值多项式的余项	(43)
§ 6	分段线性插值	(47)
6-1	插值过程的收敛性	(47)
6-2	分段线性插值	(49)
6-3	分段线性插值多项式的余项	(52)
§ 7	厄米特 (Hermite) 插值	(53)
7-1	厄米特插值多项式的概念	(53)
7-2	厄米特插值多项式 $H_{2n+1}(x)$ 的求法	(54)
7-3	厄米特插值多项式的余项	(55)
§ 8	分段三次厄米特 (Hermite) 插值	(59)
8-1	分段三次厄米特插值的概念	(59)
8-2	分段三次厄米特插值的余项	(61)
§ 9	三次样条插值	(62)
9-1	三次样条插值函数的概念	(63)
9-2	三次样条插值函数的求法	(64)
§ 10	二重插值	(70)
10-1	二重差分	(71)
10-2	二重插值法的一般公式	(72)
	习题二	(79)
第三章	数值积分与数值微分	(82)
§ 1	引言	(82)
1-1	定积分数值计算的必要性	(82)
1-2	代数精度的概念	(83)
1-3	插值型的求积公式	(84)
§ 2	等距基点的求积公式	(85)
2-1	梯形求积公式	(85)
2-2	抛物线求积公式	(86)
2-3	牛顿-柯特斯 (Newton-cote)	(86)

2-4	偶阶求积公式的代数精度	(89)
2-5	差分求积公式	(90)
§ 3	牛顿—柯特斯公式的误差分析	(93)
3-1	余项估计	(93)
3-2	稳定性与收敛性分析	(95)
§ 4	复合求积公式	(97)
4-1	复合梯形公式	(97)
4-2	复合抛物线公式	(98)
4-3	复合梯形求积公式的余项估计	(98)
4-4	复合抛物线求积公式的余项估计	(99)
4-5	步长的自动选择	(101)
§ 5	龙贝格 (Romberg) 算法	(103)
5-1	里查逊 (Richardson) 推法	(103)
5-2	龙贝格求积公式	(104)
§ 6	高斯 (Gauss) 型求积公式	(107)
6-1	问题的提出	(107)
6-2	高斯型求积公式	(108)
6-3	正交多项式	(109)
6-4	高斯点与正交多项式的关系	(113)
6-5	高斯型求积公式的构造	(114)
6-6	高斯型求积公式的余项	(117)
6-7	高斯型求积公式的稳定性与收敛性	(118)
6-8	一般高斯型求积公式及其构造	(120)
§ 7	广义积分的数值方法	(125)
7-1	无穷区间上的广义积分	(125)
7-2	无界函数的广义积分	(127)
§ 8	二重积分的数值方法	(129)
§ 9	数值微分	(132)
9-1	插值型的微商公式	(132)
9-2	实用的五点公式	(136)

习题三	(138)
第四章 最小二乘拟合与函数逼近	(141)
§ 1 引言	(141)
§ 2 曲线拟合的最小二乘法	(141)
§ 3 多变量的数据拟合	(145)
§ 4 非线性曲线的数据拟合	(148)
§ 5 超定方程组及其最小二乘解	(154)
§ 6 最佳平方逼近	(156)
6-1 最佳平方逼近多项式的概念	(156)
6-2 最佳平方逼近多项式的求法	(157)
6-3 利用勒让德多项式的最佳平方逼近	(159)
§ 7 最佳一致逼近	(161)
7-1 最佳一致逼近多项式的概念	(161)
7-2 最佳一致逼近多项式的唯一性	(161)
7-3 最佳一致逼近多项式的近似求法	(163)
习题四	(168)
第五章 解线性代数方程组的直接方法	(170)
§ 1 高斯消去法	(170)
1-1 高斯消去法的计算过程	(170)
1-2 高斯消去法的运算量	(174)
1-3 高斯消去法的矩阵解释	(175)
§ 2 高斯主元素消去法	(178)
2-1 完全主元素消去法	(179)
2-2 列主元素消去法	(181)
2-3 主元素法与排列矩阵的关系	(182)
§ 3 矩阵的三角分解	(184)
3-1 矩阵的三角分解	(184)
3-2 矩阵的 Crout 分解	(185)

	3-3 矩阵的 Doolittle 分解	(187)
§ 4	正定矩阵的 Cholesky 分解	(189)
	4-1 正定矩阵的性质	(189)
	4-2 正定矩阵的 Cholesky 分解	(190)
§ 5	行列式和逆矩阵的计算	(192)
	5-1 行列式的计算	(193)
	5-2 逆矩阵的计算	(194)
	习题五	(197)
第六章	解线性方程组的迭代法	(199)
§ 1	引言	(199)
§ 2	向量和矩阵的范数	(199)
	2-1 向量范数的概念与性质	(199)
	2-2 向量范数的主要例子	(202)
	2-3 矩阵范数的概念和性质	(202)
	2-4 矩阵范数的主要例子	(203)
	2-5 向量范数和矩阵范数的收敛性	(204)
§ 3	几种常用的迭代格式	(207)
	3-1 雅可比 (Jacobi) 迭代法	(207)
	3-2 高斯-塞德尔 (Gauss-Seidel) 迭代法	(209)
	3-3 松弛 (SOR) 迭代法	(210)
§ 4	迭代法的收敛性	(211)
	4-1 迭代法的基本定理	(211)
	4-2 迭代收敛的充分判别法	(214)
§ 5	迭代法的误差估计	(217)
	习题六	(219)
第七章	矩阵特征值和特征向量的计算方法	(222)
§ 1	引言	(222)
§ 2	特征值的定域理论	(223)
§ 3	幂法与反幂法	(226)

3-1	幂法	(226)
3-2	幂法的加速与降阶	(229)
3-3	反幂法	(234)
§ 4	Jacobi 算法	(237)
4-1	矩阵的正交相似交换	(237)
4-2	求正交矩阵 V 的方法	(237)
4-3	Jacobi 方法的收敛性	(241)
§ 5	LU 和 QR 方法	(245)
5-1	LU 方法	(245)
5-2	QR 分解	(246)
5-3	QR 方法	(248)
5-4	加原点平移的 QR 方法	(249)
5-5	LU 和 QR 方法的收敛性	(250)
习题七		(252)
第八章 非线性方程求根		(254)
§ 1	引言	(254)
§ 2	几种特殊的方法	(255)
2-1	初始近似根的求法	(255)
2-2	区间对分法	(256)
2-3	比例求根法	(259)
§ 3	迭代法	(261)
§ 4	迭代收敛的加速	(264)
§ 5	牛顿 (Newton) 法	(268)
5-1	牛顿公式	(268)
5-2	牛顿法的收敛性	(269)
5-3	牛顿法应用举例	(271)
5-4	解非线性方程组的牛顿迭代法	(273)
§ 6	弦截法与抛物线法	(274)
6-1	弦截法	(275)
6-2	抛物线法	(279)

§ 7	秦九韶方法	(281)
§ 8	分离因子法	(284)
	习题八	(289)
第九章	常微分方程初值问题的数值解法	(291)
§ 1	引言	(291)
§ 2	几种简单的数值解法	(292)
	2-1 欧拉 (Euler) 方法	(292)
	2-2 向后欧拉方法	(296)
	2-3 梯形公式	(297)
	2-4 改进的欧拉公式	(298)
§ 3	龙格—库塔 (Runge—Kutta) 方法	(300)
	3-1 泰勒展开法	(300)
	3-2 龙格—库塔方法	(302)
	3-3 m 级显式龙格—库塔方法	(304)
§ 4	单步法的收敛性和稳定性	(307)
	4-1 单步法的收敛性	(307)
	4-2 单步法的稳定性	(310)
§ 5	线性多步法	(314)
	5-1 数值积分法	(315)
	5-2 亚当姆斯 (Adams) 显式公式	(316)
	5-3 亚当姆斯隐式公式	(318)
	5-4 亚当姆斯公式的误差估计	(319)
§ 6	预测—校正公式	(320)
§ 7	常微分方程组和高阶微分方程的数值解法	(325)
	7-1 两个未知函数的方程组	(325)
	7-2 化高阶方程为一阶方程组	(328)
	7-3 刚性 (Stiff) 方程组	(330)
	习题九	(335)

第一章 误差

§ 1 引言

由于应用数学在最后得到数值的结果，所以应用数学工作者便会遇到各种各样的数学公式，这就必须研究各种数学问题求解的数值计算方法，也就是近似计算方法，并希望在各情况下，以最省的时间获得最好的结果。本章的目的，在于阐述一些与近似计算有关的基本概念和方法，并且提出数值计算中的若干问题。

§ 2 误差的来源

用数学工具来解决实际问题，所得到的数值结果必然与实际问题存在一定的误差，通常在哪些地方可能产生误差呢？

例 1（数学摆问题）一个重质点 m 摆在一条长为 λ 的绳子的一端，假设绳子是无质量、无伸缩的，让它沿一个铅直平面上作圆周运动，试求出从最低点量起的偏角 φ 随时间 t 的变化规律。

如图 1-1 所示，当 φ 甚小时， $\sin\varphi \approx \varphi$ 可归结为如下微分方程

$$\begin{cases} \frac{d^2\varphi}{dt^2} + \frac{g}{\lambda}\varphi = 0 \\ \varphi|_{t=0} = 0, \frac{d\varphi}{dt}\bigg|_{t=0} = \omega \end{cases}$$

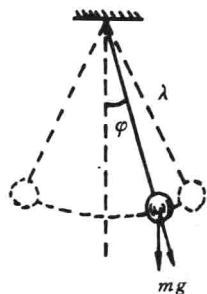


图 1-1

的解的问题. 其中 $g \approx 9.81$ 米/秒², λ 为摆绳长, ω 为初始时刻的角速度.

显然, 这种通过对实际问题进行抽象简化而得到的数学模型与实际问题的必然存在误差, 这种误差称为“模型误差”.

模型中出现的参数 ω 和 g 常常是通过观测实验得到, 它们和实际的大小之间有误差, 这种误差称为“观测误差”或“参数误差”.

根据实际问题得到数学模型, 多数情况下要想得到准确解往往是困难的, 因而常用数值方法, 求出它的近似解.

例2 计算积分 $\int_0^1 e^{-x^2} dx$

解 因 e^{-x^2} 的原函数不能用初等函数表示, 故应采用数值计算方法, 例如可利用幂级数展开

$$\begin{aligned}\int_0^1 e^{-x^2} dx &= \int_0^1 \left(1 - x^2 + \frac{x^4}{2!} - \frac{x^6}{3!} + \cdots \right) dx \\ &= \left(x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5 \cdot 2!} - \frac{x^7}{7 \cdot 3!} + \cdots \right) \Big|_0^1 \\ &= 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5 \cdot 2!} - \frac{1}{7 \cdot 3!} + \cdots\end{aligned}$$

若取前 6 项的和, 记为 S_6

$$\begin{aligned}\int_0^1 e^{-x^2} dx &\approx \\ S_6 &= 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5 \cdot 2!} - \frac{1}{7 \cdot 3!} + \frac{1}{9 \cdot 4!} - \frac{1}{11 \cdot 5!} \\ R_6 &= \frac{1}{13 \cdot 6!} - \frac{1}{15 \cdot 7!} + \frac{1}{17 \cdot 8!} - \frac{1}{19 \cdot 9!} + \cdots \\ &\leq \frac{1}{13 \cdot 6!} < 0.0002\end{aligned}$$

R_6 便是原积分值与前 6 项和 S_6 所产生的误差.

在一个无穷级数中, 用前面的有限项代替, 所产生的误差, 称

为“截断误差”或“方法误差”.

$$S_6 \approx 1.0000 - 2.0000 - 0.3333 + 0.1000 - 0.0238 + 0.0046 - 0.0008 \\ = 0.7467$$

上述计算 S_6 的过程中, 由于对数进行四舍五入而引起的误差, 称为“舍入误差”.

由于 S_6 中第一与第三项是精确值, 而其它四项每项不超过 5×10^{-5} 故 S_6 的舍入误差不超过 $5 \times 10^{-5} \times 4$ 因此, 截断误差与舍入误差的总和不超过 0.0004, 即

$$\left| \int_0^1 e^{-x^2} dx - 0.7467 \right| \leq 0.0004$$

例 3 $\pi = 3.1415926 \dots$, $\sqrt{2} = 1.41421356 \dots$, $\frac{1}{3} = 0.3333 \dots$, 等等, 在计算机上运算只能使用有限位小数, 如果取小数点后四位数字, 则

$$\delta_1 = 3.1416 - \pi = +0.0000074 \dots$$

$$\delta_2 = 1.4142 - \sqrt{2} = -0.000013 \dots$$

$$\delta_3 = 0.3333 - \frac{1}{3} = -0.000033 \dots$$

就是舍入误差.

除上述几种误差外, 初始数据有时也有误差这种误差称为“初值误差”.

总起来说, 误差一般有: 模型误差、观测误差、截断误差、舍入误差、初值误差. 各种误差都会影响计算结果的准确性, 因此, 需要研究和了解这些误差. 本书着重研究截断误差和舍入误差.

§ 3 误差的基本概念

3-1 误差与误差限

定义 1 设 x^* 表示准确值 x 的一个近似值, 则此近似值 x^* 和准确

值 x 的差称为绝对误差, 简称误差. 用 e^* 表示.

$$e^* = x^* - x \quad \text{或} \quad x = x^* - e^*$$

近似值去掉 (减去) 它的误差就是准确值. 因此, 误差的负数 $-e^*$ 称为近似值 x^* 的修正值. 或说, 近似值加上它的修正值就是准确值.

误差有正有负, 当误差为正时, 近似值偏大, 称为“强近似”, 当误差为负时, 近似值偏小, 称为“弱近似”.

由于在一般情况情况下, 准确值 x 是不知道的, 所以误差 e^* 的准确值也不能求出, 但根据具体测量或计算的情况, 可以估计误差的绝对值不能超出某个正数 ϵ^* , 也就是误差绝对值的一个上界. ϵ^* 称为近似值的“误差限”.

定义 2 如果 $|e^*| = |x^* - x| \leq \epsilon^*$ 则 ϵ^* 称为近似值 x^* 的误差限. 误差限 ϵ^* 一定是一个正数.

$$\text{由于 } |x^* - x| \leq \epsilon^* \quad \text{或} \quad |x - x^*| \leq \epsilon^* \quad \text{便有} \\ -\epsilon^* \leq x - x^* \leq \epsilon^*$$

$$\text{即 } x = x^* \pm \epsilon^* \quad \text{或} \quad x \in [x^* - \epsilon^*, x^* + \epsilon^*]$$

常用 $x = x^* \pm \epsilon^*$ 表示近似值的精度.

$$\text{例 4} \quad \left| \int_0^1 e^{-x^2} dx - 0.7467 \right| \leq 0.0004 \quad \text{可写成} \\ \int_0^1 e^{-x^2} dx = 0.7467 \pm 0.0004$$

因此, 0.0004 是积分 $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ 的近似值 0.7467 的一个误差限.

例 5 真空中光速 C 的最好近似值为

$$C^* = 2.997925 \times 10^{10} \text{ 厘米 / 秒}$$

其误差限为

$$\epsilon^* = 0.000001 \times 10^{10} \text{ 厘米 / 秒}$$

通常记为

$$C = (2.997925 \pm 0.000001) \times 10^{10} \text{ 厘米 / 秒.}$$

2-2 相对误差与相对误差限

上面引入的误差和误差限的概念常常不能说的近似值的好坏程度, 它是有量纲单位的.

例6 第一根轴的设计长为 120mm, 加工后测量长为 120.03mm, 第二轴的设计长为 12mm, 加工后测量长为 12.03mm, 试判定哪一根轴加工精度高?

$$e_1^* = 120.03 - 120 = 0.03(mm)$$

$$e_2^* = 12.03 - 12 = 0.03(mm)$$

显然, 两根轴加工的精度是不同的, 但 $e_1^* = e_2^*$. 因此, 误差 (绝对误差) 不能完全反映误差好坏的程度, 下面引入相对误差的概念.

定义3 近似值 x^* 的误差 e^* 与准确值 x 的比值 $\frac{e^*}{x} = \frac{x^* - x}{x}$ 称为近似值 x^* 的相对误差, 记为 e_r^* .

在实际计算中, 精确值往往是不知道的, 我们把 $e_r^* = \frac{e^*}{x} = \frac{x^* - x}{x^*}$ 作为近似值 x^* 的相对误差.

在例6中,
$$e_{1r}^* = \frac{120.03 - 120}{120.03} = 0.25\%$$

$$e_{2r}^* = \frac{12.03 - 12}{12.03} = 2.5\%$$

显然, 第一根轴加工精度比第二根轴加工精度高.

定义4, 相对误差绝对值的上界, 称为“相对误差限”.

记作
$$\epsilon_r^* = \frac{\epsilon^*}{|x^*|}$$

其中 ϵ^* 是近似值 x^* 的误差 (绝对误差) 限.

在例5中光速 $C = (2.997925 \pm 0.000001) \times 10^{10}$ 厘米/秒.

$$\epsilon^* = 0.000001 \times 10^{10}, \quad C^* = 2.997925 \times 10^{10}$$