



高等学校规划教材

计算方法

(第三版)

钱焕延 编著



西安电子科技大学出版社
<http://www.xduph.com>

1149222

面向 21 世纪高等学校规划教材

计算方法

(第三版)

钱焕延 编著



淮阴师院图书馆1149222

西安电子科技大学出版社

2007

0241/111

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/钱焕延编著. —3版. —西安:西安电子科技大学出版社, 2007. 6
面向 21 世纪高等学校规划教材

ISBN 978-7-5606-0294-3

I. 计… II. 钱… 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 (2007) 第 066845 号

责任编辑 张 梁 毛红兵

出版发行 西安电子科技大学出版社(西安市太白南路 2 号)

电 话 (029)88242885 88201467 邮 编 710071

http://www.xduph.com E-mail: xdupfb@pub.xaonline.com

经 销 新华书店

印刷单位 陕西天意印务有限责任公司

版 次 2007 年 6 月第 3 版, 2007 年 7 月第 16 次印刷

开 本 850 毫米×1163 毫米 1/16 印张 9.75

字 数 233 千字

印 数 94 001~98 000 册

定 价 14.00 元

ISBN 978-7-5606-0294-3/TP·0101

XDUP 0564043-16

*** 如有印装问题可调换 ***

本社图书封面为激光防伪覆膜, 谨防盗版。

— 785 —



第三版前言

本教材自 1994 年出版修订版以来,受到了广大师生和读者的厚爱与支持,在此表示衷心的感谢。

随着计算机应用技术的迅速发展,数值计算已被广泛应用于各个领域。在出版社的关心和支持下,我们根据高等学校相关专业课程的要求,结合多年的教学实践,对本教材作了进一步修订:

(1) 对各章的引言部分进行了修改,并对部分章节的内容进行了增删和调整;

(2) 对图、表和文中的错误进行了修正;

(3) 对各章节标题进行了重新编排以进一步规范。

本教材从实际出发,阐述了数值计算中的基本理论和基本方法。本教材共分七章,主要内容包括误差、一元非线性方程的解法、线性代数计算方法、插值法、数值积分、常微分方程数值解法和最优化方法等。本教材中对常用的方法给出了计算步骤和计算框图,便于读者编制计算程序和上机操作。此外,各章都配备有较丰富的例题和一定数量的习题,便于读者通过练习和实践,加深对相应章节内容的理解和掌握。

本教材注意到专业层次的特点,选材深浅适度,内容力求精选,文字通俗简练。本书适合各类高等学校本、专科相关专业选用,参考学时为 80 左右;而只开设 60 左右学时的有关专业,可略去教材中注有“*”的章节。

本书由南京理工大学钱焕延教授编写。限于编者的水平和经验,书中难免存在疏漏,恳请读者批评指正。

编者

2007 年 2 月于南京

第一版前言

本教材按机械电子工业部制定的工科电子类专业教材 1991 年~1995 年编审出版规划,由大专计算机教材编审委员会基础编审小组组织征稿、评选、推荐出版。

本教材由南京有线电厂职工大学赵晓彬同志主编,南京建筑工程学院金炳陶副教授主审。

在生产实践和科学技术领域中,要解决的计算问题非常广泛,使用的数值方法也多种多样。本书从实际出发,采用由简单到复杂,由特殊到一般的叙述方法,阐述了数值计算中的基本理论和基本方法,内容力求精选,文字通俗简练。教材共分为七章:第一章为误差,介绍了绝对误差、相对误差、有效数字和算法的数值稳定性等概念;第二章为一元非线性方程的解法;第三章为线性代数计算方法,该章着重叙述了求解线性方程组的一些数值方法;第四章为插值法,用代数多项式来近似地代替较复杂的函数(或由表格给出的函数);第五章为数值积分,介绍了几个常用的求定积分数值解的方法;第六章为常微分方程数值解法,主要讨论一阶常微分方程初值问题的几个数值方法;第七章为最优化方法,研究多元函数极小化问题。为适应现代电子计算机的高速发展,书中对常用的算法给出了计算步骤,并配有相应的计算框图,以便于读者编制程序和上机操作。此外,各章都配有较丰富的例题和一定数量的习题,通过练习,可以加深对各章内容的理解和掌握。全书参考学时为 80,而对只开设 60 学时的有关专业可略去教材中注有“*”的部分章节,或根据专业的需要自行删节。

参加教材编审工作的还有苏州市职工大学俞咏薇副教授、本

校胡玉峰老师，他们对本书提出了许多宝贵意见和建议，在此谨向他们表示深切的谢意。

限于编者的水平和经验，书中定有不少缺点和错误，诚恳地希望读者批评指正。

编者

1993年8月

本，对卷幅着和命学大工理市批表音没的补工申编村修版参

录

第 1 章 误差	1
1.1 误差的基本概念	1
1.1.1 误差的来源	1
1.1.2 绝对误差和绝对误差限	3
1.1.3 相对误差和相对误差限	4
1.1.4 有效数字	7
1.2 数的表示及运算	11
1.2.1 浮点数	11
1.2.2 浮点数的运算	12
1.3 算术运算结果的误差	13
1.3.1 加减运算的误差	13
1.3.2 乘除运算的误差	14
1.4 算法的数值稳定性	16
1.4.1 提高算法的数值稳定性的若干原则	16
1.4.2 改善算法的例子	22
习题一	23
第 2 章 一元非线性方程的解法	26
2.1 方程求根数值计算步骤	26
2.2 初始近似根的确定	27
2.3 二分法	28
2.3.1 二分法的建立	28
2.3.2 计算步骤和计算框图	30
2.4 迭代法	33
2.4.1 迭代法的建立	33
2.4.2 迭代法的收敛性	34
2.4.3 迭代法的几何意义	37

2.4.4	计算步骤和计算框图	39
2.5	切线法	42
2.5.1	切线法(牛顿法)的建立	42
2.5.2	计算步骤和计算框图	43
2.5.3	切线法的收敛性	44
2.6	弦截法	45
2.6.1	弦截法的建立	45
2.6.2	计算步骤	46
2.7	加速迭代法	47
2.7.1	加速迭代法的建立	47
2.7.2	计算框图	49
2.7.3	埃特金迭代法	50
	习题二	52
第3章 线性代数计算方法		54
3.1	高斯消去法	55
3.1.1	顺序消去法	56
3.1.2	主元素消去法	60
3.2	高斯-约当消去法	69
3.2.1	高斯-约当消去法的建立	69
3.2.2	计算步骤和计算框图	71
3.3	解实三对角线性方程组的追赶法	71
3.3.1	追赶法的建立	71
3.3.2	计算步骤和计算框图	75
3.4	矩阵的三角分解	77
3.4.1	消去法与矩阵的初等变换	78
3.4.2	矩阵三角分解的唯一性	80
3.4.3	LU分解方法	85
3.4.4	乔累斯基(Cholesky)分解方法	91
3.5	行列式和逆矩阵的计算	98
3.5.1	行列式的计算	98
3.5.2	逆矩阵的计算	99

3.6	迭代法	100
3.6.1	简单迭代法	101
3.6.2	赛德尔(Seidel)迭代法	105
3.6.3	松弛法	108
3.7	迭代法的收敛性	109
3.7.1	向量范数	111
3.7.2	矩阵范数	112
3.7.3	迭代法的收敛性问题	115
* 3.8	矩阵的特征值与特征向量的计算	120
3.8.1	乘幂法	120
3.8.2	QR方法	127
	习题三	133
第4章	插值法	138
4.1	插值问题	138
4.2	线性插值与二次插值	140
4.2.1	线性插值	140
4.2.2	二次插值	141
4.3	代数多项式插值的存在唯一性	143
4.4	代数多项式的余项	144
4.5	拉格朗日插值多项式	146
4.6	牛顿均差插值多项式	149
4.6.1	均差	150
4.6.2	牛顿均差插值多项式的建立及其重要性质	150
4.7	牛顿前差和后差插值多项式	157
4.7.1	有限差	157
4.7.2	牛顿前差和后差插值多项式的建立	158
4.8	样条插值	163
4.8.1	三次样条插值函数的定义	163
4.8.2	三次样条插值法	164
* 4.9	数值微分	170
4.9.1	用插值法求数值微分	170

4.9.2	用三次样条函数求数值微分	172
4.10	曲线拟合法	173
4.10.1	曲线拟合问题	173
4.10.2	线性最小二乘法	175
	习题四	181
第5章 数值积分		184
5.1	简单求积公式	185
5.2	牛顿-柯特斯公式	187
5.2.1	牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)公式的建立	187
5.2.2	误差估计	192
5.3	复合求积公式	194
5.3.1	复合梯形公式	195
5.3.2	复合抛物线公式	197
5.3.3	变步长公式	200
5.4	龙贝格(Romberg)积分方法	202
	习题五	209
第6章 常微分方程的数值解法		211
6.1	常微分方程数值解法的建立	211
6.2	欧拉法	213
6.2.1	欧拉法(折线法)的建立	213
6.2.2	改进的欧拉法	215
6.2.3	预估-校正法	217
6.2.4	误差估计	219
6.3	龙格-库塔法	222
6.3.1	泰勒级数展开法	222
6.3.2	龙格-库塔法的建立	223
*6.4	阿达姆斯方法	229
6.4.1	阿达姆斯(Adams)显式	229
6.4.2	阿达姆斯隐式	231
6.4.3	阿达姆斯预估-校正公式	233

6.5 常微分方程边值问题的数值解	236
习题六	240
* 第7章 最优化方法	242
7.1 函数极值	243
7.1.1 一元函数的极值	243
7.1.2 二元函数的极值	244
7.1.3 函数的最速上升方向和最速下降方向	246
7.1.4 求目标函数极值的迭代法	249
7.2 一维寻查	251
7.2.1 牛顿法	251
7.2.2 二分法	252
7.2.3 黄金分割法(0.618法)	255
7.2.4 二次插值法	262
7.3 非线性最小二乘法	264
7.3.1 最小二乘法	264
7.3.2 改进的最小二乘法	270
7.4 最速下降法	272
7.5 共轭斜量法	278
7.5.1 共轭方向	278
7.5.2 共轭斜量法的建立	279
7.6 变尺度方法	286
7.6.1 变尺度方法的建立	286
7.6.2 变尺度方法举例	288
7.7 单纯形方法	289
7.7.1 单纯形方法的建立	290
7.7.2 初始单纯形的构造	292
7.7.3 单纯形方法的计算步骤	294
习题七	296
参考资料	297

第1章 误差

在现代科学研究和工程设计中，许多实际问题最终都可以归结为数学问题。为了获得人们所需的结果，必须将实际问题转变为数学理论问题(一般为数学模型)，再将数学理论问题转化为数值计算问题。

数值计算必须依靠各类计算工具进行，现代化计算工具主要是电子计算机。但不管多高精度的计算机，都只能取有限位数值进行计算。在数值计算中，从实际问题到获得计算结果的过程，理想的准确值往往是得不到的，人们常常采用与准确值相近的近似值来代替，这样就产生了差异。我们将准确值与其近似值的这种差异称为误差。为了刻画近似结果的精度，我们要对此误差作必要的估计和分析。因此误差理论在数值计算中是很重要的。

本章主要介绍误差的基本概念(包括误差的来源、绝对误差和绝对误差限、相对误差和相对误差限、有效数字)、数的表示及运算、算术运算结果的误差、算法的数值稳定性等。

1.1 误差的基本概念

1.1.1 误差的来源

数值计算中，若不是因疏忽导致误写数字或误用公式等，一般来说，不可避免的误差大体有四种：模型误差、量测误差、截断误差和舍入误差。

1. 模型误差

用数值计算方法解决科学技术中的实际问题，必须首先建立数学模型。而数学模型总是在感性认识的基础上，抓住主要因素，忽略一些次要因素的情况下获得的，故只能近似地描述所给的实际问题，这样就会与实际问题之间存在一定的差异，从而出现了误差。这种误差通常称之为模型误差。

例如，气体的体积 V 与压强 P 之间的关系式为

$$PV = C$$

其中， C 为常数。该数学模型就是忽略了自然现象中的一些次要因素而获得的，它与实际问题之间就存在模型误差。

2. 量测误差

数学模型常常包含了若干参变量，如长度、温度、重量、比重、加速度、阻力系数等。这些量一般是通过量测得来的，而量测的结果不可能绝对准确，这与量测器具和具体量测人员有关，因此量测的数据总是近似的，从而就产生了误差。这种误差通常称为量测误差。

例如，设某金属棒在温度 t 时的长度为 l_t (0°C 时金属棒的长度为 l_0)，模型长度为 L_t ，则

$$l_t \approx L_t = l_0(1 + \alpha t + \beta t^2)$$

其中， $l_0 \equiv 1$ ； α 、 β 为参数，可估计为

$$\alpha = 0.001\ 253 \pm 10^{-6}$$

$$\beta = 0.000\ 068 \pm 10^{-6}$$

于是知， $l_t - L_t$ 为模型误差； 10^{-6} 是量测 α 、 β 而产生的误差，因此为量测误差。

3. 截断误差

在计算过程中，我们常用收敛无穷级数的前 n 项代替无穷级数，即抛弃了无穷级数的后段。这样得到的误差称为截断误差。

例如

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots, \quad -\infty < x < +\infty$$

$$\ln x(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots, \quad -1 < x \leq 1$$

当 $|x|$ 很小时,常用 x 代替 $\sin x$ 和 $\ln(1+x)$,它们的截断误差大约分别为 $\frac{1}{6}x^3$ 和 $\frac{1}{2}x^2$ 。

4. 舍入误差

在具体运算时,还会经常用到一些无理数及循环小数,例如 π 、 e 、 $\sqrt{2}$ 、 $1/3$ 、 $1/7$ 等。在数值计算时,这些数只能近似地表示,这样就产生了误差。这种误差称为舍入误差。

舍入的方法较多,有收尾法(只入不舍)、去尾法(只舍不入)和四舍五入法等,本教材将主要采用人们熟知的四舍五入法。

其实,实际计算中总是按有限位数进行的,所以数值计算的每一步都不可避免地有舍入误差的影响。

综上所述,在数值计算中常会出现诸如模型、量测、截断、舍入等误差。一旦数学模型建立以后,我们只考虑后两种误差,即截断误差和舍入误差。因为数值计算方法的研究,主要是在已给数学模型的基础上进行的,所以本教材只考虑截断误差和舍入误差。

1.1.2 绝对误差和绝对误差限

1. 绝对误差

定义 1.1 假设某一量的准确值为 x ,近似值为 x^* ,则 x 与 x^* 之差叫做近似值 x^* 的绝对误差(简称误差),记为 $\epsilon(x)$,即

$$\epsilon(x) = x - x^* \quad (1-1)$$

$|\epsilon(x)|$ 的大小标志着 x^* 的精确度。一般地,在同一量的不同

近似值中, $|\epsilon(x)|$ 越小, x^* 的精确度越高。

2. 绝对误差限

由于准确值 x 一般不能得到, 于是误差 $\epsilon(x)$ 的准确值也无法求得, 但在实际测量或计算时, 可根据具体情况事先估计出它的大小范围。也就是指定一个适当小的正数 ξ , 使得

$$|\epsilon(x)| = |x - x^*| \leq \xi \quad (1-2)$$

这时, ξ 就称为近似值 x^* 的绝对误差限。

有时也用

$x = x^* \pm \xi$ 表示近似值的精度或准确值的所在范围。

在实际问题中, 绝对误差一般是有量纲的量。例如, 测得某一物件的长度为 10 m, 其绝对误差限为 0.01 m, 通常将准确长度 s 记为

$s = (10 \pm 0.01)\text{m}$ 即准确值在 10 m 左右, 但不超过 0.01 m 的绝对误差限。上述这些量均具有长度的量纲(L)。

1.1.3 相对误差和相对误差限

1. 相对误差

绝对误差并不足以表示近似值的好坏。例如, 设

$$x_1 = 100 \pm 1$$

$$x_2 = 1000 \pm 1$$

显然, 近似值 $x_1^* = 100$ 的绝对误差限与 $x_2^* = 1000$ 的绝对误差限相同, 不过, 后者应比前者精确。

可见, 决定一个量的近似值的精确度, 除了要看绝对误差的大小之外, 还必须考虑到该量本身的大小, 也即误差相对于该量本身的情况。据此, 我们引进相对误差的概念。

定义 1.2 绝对误差与准确值之比

$$\epsilon_r(x) = \frac{\epsilon(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x}, \quad x \neq 0 \quad (1-4)$$

称为 x^* 的相对误差。

由于准确值 x 往往是不知道的，因此在实际问题中，常取

$$\frac{1}{x} \times \epsilon_r(x) = \frac{\epsilon(x)}{x^*}$$

很显然，上例 x_2^* 的相对误差为 $1/1000$ ，而 x_1^* 的相对误差为 $1/100$ 。一般地，在同一量或不同量的几个近似值中， $|\epsilon_r(x)|$ 值小者精确度高。由于相对误差是一个比值，因此它是无量纲的量。

由式(1-4)可知，相对误差可以由绝对误差求出；反之，绝对误差也可由相对误差求出，其关系是

$$\epsilon(x) = x\epsilon_r(x) \quad (1-5)$$

在对近似值运算结果的误差进行分析时，相对误差更能反映出误差的特征。因此，在误差分析中，相对误差比绝对误差显得更为重要。

2. 相对误差限

在实际计算中，由于 $\epsilon(x)$ 与 x 都不能准确地求得，因此相对误差 $\epsilon_r(x)$ 也不可能准确地得到，所以也像绝对误差那样，只能估计它的大小范围，即指定一个适当小的正数 η ，使

$$|\epsilon_r(x)| = \frac{|\epsilon(x)|}{|x|} \leq \eta \quad (1-6)$$

这时， η 就称为近似值 x^* 的相对误差限。

例 1.1 给定 $g(x) = 10^7 \times (1 - \cos x)$ ，试用四位数学用表求 $g(2^\circ)$ 的近似值。

解 可用两种方法进行计算，具体步骤如下：

(1) 方法一：

由于

$$\cos 2^\circ \approx 0.9994$$

故直接计算 $g(2^\circ)$, 有

$$g(2^\circ) = 10^7(1 - \cos 2^\circ) \approx 10^7(1 - 0.9994) = 6000$$

(2) 方法二:

应用三角函数公式, 有

$$g(x) = 10^7(1 - \cos x) \equiv 2 \times 10^7 \sin^2 \frac{x}{2}$$

由于, $\sin 1^\circ \approx 0.0175$, 故

$$g(2^\circ) = 2 \times 10^7 \sin^2 1^\circ \approx 2 \times 10^7 (0.0175)^2 = 6125$$

两种方法都用同一数学用表, 表的每一个数都准确到小数后第四位, 但答案为什么不一致? 哪个答案较正确?

下面我们来分析用这两种方法解题时各自产生的相对误差:
记

$$t_1 = (1 - A)10^7, \quad A = \cos x$$

$$t_2 = 2 \times 10^7 B^2, \quad B = \sin \frac{x}{2}$$

三角函数表给出了四位数字, 它准确到小数后第三位, 而第四位是经过“四舍五入”得到的, 即有

$$|A - A^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

$$|B - B^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

这里 A^* 、 B^* 分别为 A 、 B 的近似值。于是

$$|\epsilon_r^*(t_1)| = \frac{|(1 - A)10^7 - (1 - A^*)10^7|}{|(1 - A)10^7|}$$

$$= \frac{|A - A^*|}{|1 - A|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{-4}}{1 - A^*}$$

$$= \frac{\frac{1}{2} \times 10^{-4}}{1 - 0.9994} = \frac{1}{12} \approx 8.3\%$$