计算方法与实习

薛毅
耿美英
诸梅芳
编著

北京工业大学出版社

计算方法与实习

薛　毅　耿美英　诸梅芳　编

北京工业大学出版社

（京）登95第212号

内 容 简 介

本书介绍了计算方法的基本理论、基本算法，全书共分为计算方法和计算实习两部分。计算方法部分内容包括误差分析、非线性方程的数值解、线性方程组的解法、多项式插值和多项拟合、数值积分和数值微分、微分方程初值问题的数值解、矩阵特征值计算等；计算实习部分包括计算实习演示软件和编程练习，书中各章后附有适量习题，旨在提高学生运用所学知识解决实际问题的能力。

本书可作为工科院校非数学专业本科生教材，也可供科技工作者和工程技术人员学习和参考。

计算方法与实习
薛 毅 耿美英 诸梅芳 编
※
北京工业大学出版社出版发行
各地新华书店经销
徐水宏远印刷厂印刷
※
1996年9月第1版 1996年9月第1次印刷
850×1168毫米 32开本 12.75印张 316千字
印刷：1～2000册
ISBN 7-5639-0522-7/O·28
定价：10.50元

前　言

随着电子计算机的迅速发展和广泛应用，计算方法已成为广大科技工作者不可缺少的工具。目前，越来越多的高校把“计算方法”列入工科学生的必修课程。为了适应这一发展，我们编写了这本教材。

北京工业大学开设计算方法课程已有10余年的历史，曾先后出版过两本教材，这次出版的教材是根据我们多年的教学经验，在原有教材的基础上改编而成的，同时根据近几年对内容的需求变化，增减了部分内容。

本书的目的在于直观、生动地向学生介绍计算方法的理论、算法以及相关的内容，并试图提高学生运用所学知识解决实际问题的能力。本书共分两篇：第一篇计算方法，其内容包括误差分析、非线性方程的数值解、线性方程组的解法、多项式插值和多项拟合、数值积分和数值微分、微分方程初值问题的数值解、矩阵特征值计算共七章。第二篇计算实习，其内容包括上机实习、算法概要，并配有演示例题和习题。上机实习由两部分组成：第一部分是计算实习演示软件，它运用计算机图象，形象地展示了各种方法的计算过程及计算中可能出现的问题，并提示解决问题的方法。该软件是用C语言编写的，图形功能强，窗口、菜单使用方便，从而使学生加深对第一篇知识的理解。第二部分是编程练习，由学生根据第一篇中介绍的算法进行编程，完成书中的练习。考虑到学生的实际水平，我们在这部分内容中，对每种算法都配有相应的FORTRAN程序。

完成本书第一篇的全部教学内容大约在40学时左右，教师可

根据本校的实际情况，对教材的内容进行删减，一般可在 30～40 学时之间。第二篇上机实习的内容可用 12～15 学时完成。本书的先修课程是高等数学和线性代数，如果要顺利的完成第二篇的内容，最好先修过算法语言。

本书第一篇由薛毅副教授、诸梅芳教授编写，第二篇由耿美英副教授编写。在编写过程中，得到了教研室其他同志的热情帮助。

本书可作为工科院校非数学专业的“计算方法”课程的教材或教学参考书，也可供科技工作者和工程技术人员学习和参考。

由于受编者水平限制，本书可能在内容的取材、结构的编排以及课程的讲法上存在着不妥之处，我们希望使用本书的老师、同学以及同行专家和其他读者提出宝贵的批评和建议。

在本书出版之际，我们谨向对本书提供过帮助的各位老师和专家，以及给予我们大力支持的北京工业大学教材建设委员会和北京工业大学出版社表示衷心的感谢。

编　者

1996 年 1 月

目　　录

第一篇　计算方法

第二篇 计算实习与 FORTRAN 程序

第一篇　计 算 方 法

第一章　绪　　论

§1.1　计算方法的主要内容和特点

随着电子计算机的普及与发展，计算方法已成为广大科技人员不可缺少的工具，因此，我们有必要掌握计算方法这一专门知识。故名思意，计算方法是研究各种数学问题求解的理论与方法，它是数学的一个重要分支。它并不是各种方法的简单罗列和堆积，而是一门内容丰富，研究方法深刻，又有自身理论体系的课程。计算方法除了有数学的抽象性与严格性的特点外，还有应用广泛性与实际试验的技术特点，它是一门与计算机密切结合的实用性很强的课程。

我们所讲授的计算方法课程主要包括以下三个方面：

(1) 数值分析——包括非线性方程求根、数值积分、数值微分、函数逼近与函数插值等。

例如：对于一元二次方程

$$ax^2 + bx + c = 0$$

当 $b^2 - 4ac > 0$ 时，我们可以得到方程解的解析表达式

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \qquad x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

而对于一般的代数方程

$$a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_{n-1}x + a_n = 0$$

当 $n > 4$ 时，求出方程的解析解就几乎是不可能的。

对于超越方程，如

$$\cos x = x, \quad e^{-x} - \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right) = 0$$

我们只能给出数值解法。

(2) 数值代数——求解线性方程组的数值方法。

该部分的内容主要考虑线性方程组的数值解法，要注意它与"线性代数"中处理线性方程组的方法的不同。在"线性代数"中，主要考虑线性方程组解的存在性与唯一性及相应的有关理论与精确解法。用这些方法无法在计算机上解上百个未知数的方程组，更不用说求解十几万个未知数的方程组了。而计算方法这门课则介绍适合计算机特点的、满足一定精度要求的、有效的算法和相关的理论。

(3) 微分方程的数值解法——求解常微分方程的数值方法。

学过"高等数学"的人都知道，用高等数学知识求出任一微分方程的解析解是非常困难的，有时几乎是不可能的。在计算方法中我们将介绍求该问题的数值解法。

本书主要是供工科各专业学生或工程技术人员使用的，因此，我们重点放在计算方法最基本的内容的介绍、推导及相应的几何意义上。在讲法上注重方法的直观性、实用性，讲明基本概念，略去冗长的定理证明。

§1.2 误差的来源与误差的基本概念

1.2.1 误差的来源

一个物理量的真实值与我们计算出的值往往不相等，我们称其差为误差。引起误差的原因是多方面的，为了具体说明误差的

来源，我们先考察一下解决实际问题的过程：

$\boxed{\text{实际问题}} \to \boxed{\text{数学模型}} \to \boxed{\text{数值方法}} \to \boxed{\text{程序设计}} \to \boxed{\text{计算结果}}$

从以上过程我们可以看出，实际问题与计算结果存在着以下几种误差：

1．模型误差

数学模型是从实际问题经抽象和简化，并忽略一些次要因素得到的。例如用

$$s = \frac{1}{2}gt^2 \tag{1.1}$$

（其中 g 是重力加速度）描述地球上某一质点自由落体运动规律时会出现误差（这里忽略了空气阻力等一些次要因素），我们把这种数学模型与实际问题之间出现的误差称为模型误差。

若用 $s=f(t)$ 表示自由落体的真实运动规律，那么 $f(t)-\frac{1}{2}gt^2$ 即为数学模型（1.1）的模型误差。

2．参数误差

在给出的数学模型中往往涉及一些根据观测得到的物理量，如电压、电流、温度、长度等，而观测难免不带来误差，观测值与真实值之间的误差称为参数误差或观测误差。

例如，在(1.1)中取重力加速度为 $g\approx 9.8$ 米/秒^2，则 $g-9.8$ 就是参数误差。

3．截断误差

在计算中常常遇到只有通过无限计算过程才能得到结果的情况，但实际计算时，只能用有限过程来计算。这种用有限过程代替无限过程的误差称为截断误差，而这种误差是由计算方法本身引起的，因此也称为方法误差。

例如，考虑用 Taylor 级数求定积分 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$ 的近似值。由 $\sin x$ 的 Taylor 展开式得

$$\frac{\sin x}{x}=\frac{1}{x}\left(x-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^5}{5!}-\frac{x^7}{7!}+\cdots\right)$$

若从第二项后“截断”，则有

$$\int_0^1\frac{\sin x}{x}\approx\int_0^1\frac{1}{x}\left(x-\frac{x^3}{3!}\right)\mathrm{d}x=\int_0^1\left(1-\frac{x^2}{6}\right)\mathrm{d}x=1-\frac{1}{18}=\frac{17}{18}$$

这时 $\int_0^1\frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x-\frac{17}{18}$ 即为截断误差。

4. 舍入误差

在计算中遇到的数据可能位数很多，也可能是无穷小数，如 $\sqrt{2}$、$\frac{1}{3}$ 等，但计算时只能对有限位数进行计算，因此往往进行四舍五入，这样产生的误差称为舍入误差。

少量的舍入误差是微不足道的，但在电子计算机上完成了千百万次运算之后，舍入误差的累积有时可能是十分惊人的。

在上述讨论的误差来源中，前两种误差是客观存在的，后两种误差是由计算方法所引起的。本课程是研究数学问题的数值方法，因此只涉及后两种误差。

1.2.2 绝对误差与绝对误差限

定义 1.2.1 设 x 是准确值，x^* 是它的一个近似值，则 $x-x^*$ 为 x^* 的绝对误差，简称误差，记作 e^*，即

$$e^*=x-x^* \tag{1.2}$$

例如，用 1.414 近似 $\sqrt{2}$，其绝对误差为：

$$\sqrt{2}-1.414=1.414213\cdots-1.414=0.000213\cdots$$

通常我们无法知道准确值 x，因而也不可能知道误差 e^* 的准确值。但我们很容易得到 e^* 的取值范围。例如用 1.414 作为 $\sqrt{2}$ 的近似值，其绝对误差不会超过 0.0003，因此我们可以给出绝对误差的上限。

定义 1.2.2 设 x 为准确值，x^* 是它的一个近似值，称 x^* 的

绝对误差的绝对值的上限 ε^* 为 x^* 的绝对误差限，简称误差限，即

$$|e^*| = |x - x^*| \leqslant \varepsilon^* \tag{1.3}$$

显然，如果 ε^* 是 x 的近似值 x^* 的绝对误差限，那么 x 仅位于区间 $[x^*-\varepsilon^*, x+\varepsilon^*]$ 之间，在工程技术上常用

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

表示。例如用毫米刻度的直尺测量某一长度为 x 的物体，测得其长度的近似值为 $x^*=52\text{mm}$，由于直尺以毫米为刻度，其误差不超过 0.5mm，故 $x=52\pm0.5$。

1.2.3 相对误差与相对误差限

在许多情形下，绝对误差限并不能完全刻划一个数的近似精确程度。例如，比较 $x=10\pm1$ 和 $y=10000\pm10$ 两种情形。从绝对误差限来看，y^* 的绝对误差限是 x^* 的绝对误差限的十倍；但从实际情况来看，y^* 的精确程度要高于 x^* 的精确程度。因此，一个近似值的精确程度不仅与绝对误差限有关，而且还与其本身的大小有关。由此我们给出以下定义。

定义 1.2.3 设 x 为准确值，x^* 是它的一个近似值，称比值 $\frac{e^*}{x^*}$ 为近似值 x^* 的相对误差，记作 e_r^*，即

$$e_r^* = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*} \tag{1.4}$$

与绝对误差限的概念类似，我们引入相对误差限的概念。

定义 1.2.4 设 x 为准确值，x^* 是它的一个近似值，称 x^* 的相对误差 e_r^* 的绝对值的上界 ε_r^* 为 x^* 的相对误差限，即

$$|e_r^*| \leqslant \varepsilon_r^* \tag{1.5}$$

相对误差和相对误差限都是无量纲的，常用百分数表示。例如，$x=10\pm1$ 与 $y=10000\pm10$ 的近似值 $x^*=10$ 和 $y^*=10000$

的相对误差分别为

$$\varepsilon_r^*(x)=\frac{1}{10}=10\%,\qquad \varepsilon_r^*(y)=\frac{10}{10000}=0.1\%$$

x^* 的相对误差限是 y^* 的相对误差限的 100 倍，在这种意义上说，y^* 的精度比 x^* 的精度高得多，这是符合实际情况的。

由定义 1.2.2 与定义 1.2.4，可以得到绝对误差与相对误差限之间的关系为

$$\varepsilon_r^*=\frac{\varepsilon^*}{|x^*|}$$

1.2.4 有效数字

在实际计算中，经常按四舍五入原则取近似数。例如：

$$\sqrt{200}=14.142\cdots\approx 14.1,\qquad \varepsilon_1^*<0.05$$
$$\lg 2=0.30102\cdots\approx 0.301,\qquad \varepsilon_2^*<0.0001$$
$$e^{-5}=0.0067379\cdots\approx 0.00674,\qquad \varepsilon_3^*<0.000003$$

它们的误差都不会超过末位数字的一半，即

$$\left|\sqrt{200}-14.1\right|<\frac{1}{2}\times 10^{-1}=\frac{1}{2}\times 10^{2-3}$$

$$\left|\lg 2-0.301\right|<\frac{1}{2}\times 10^{-3}=\frac{1}{2}\times 10^{0-3}$$

$$\left|e^{-5}-0.00674\right|<\frac{1}{2}\times 10^{-5}=\frac{1}{2}\times 10^{-2-3}$$

定义 1.2.5 设 x 为准确值，x^* 是它的一个近似值，若将 x^* 表示成

$$x^*=\pm 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n\times 10^m \tag{1.6}$$

其中 m、n 为整数，$\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n$ 为 0～9 之间的数，且 $\alpha_1\neq 0$，并满足关系式

$$|x-x^*|<\frac{1}{2}\times 10^{m-n} \tag{1.7}$$

则称 x^* 具有 n 位有效数字。

【例 1】 写出$\frac{1}{27}$的具有一位、两位、三位和四位有效数字的近似值。

解 由于

$$\frac{1}{27} = 0.037037037\cdots$$

则按照定义得到一位、两位、三位和四位有效数字的近似值分别为 0.04， 0.037， 0.0370， 0.03704。

注意：0.037 与 0.0370 两者之间是有差别的，前者具有两位有效数字，其误差不超过$\frac{1}{2}\times10^{-3}$，而后者具有三位有效数字，其误差不超过$\frac{1}{2}\times10^{-4}$。

定义 1.2.5 给出了绝对误差限与有效数字之间的关系，下面我们给出相对误差限与有效数字之间的关系。

定理 1.2.1 设形如（1.6）式的近似值 x^* 具有 n 位有效数字，则其相对误差限为

$$|e_r^*| \leqslant \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{-(n-1)} \tag{1.8}$$

其中 α_1 是 x^* 的第一位有效数字。

证明 由(1.6)式知

$$|x^*| = 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n \times 10^m \geqslant 0.\alpha_1 \times 10^m$$

因此有

$$|e_r^*| = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leqslant \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{0.\alpha_1 \times 10^m} = \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{-(n-1)}$$

定理证毕。

由定理 1.2.1 可以看出，有效数字越多，相对误差限越小。

由定理 1.2.1，我们很容易得到例 1 的相对误差限分别为

$$\varepsilon_r^* = \frac{1}{2 \times 4} \times 10^{-(1-1)} = 12.5\%$$

$$\varepsilon_r^* = \frac{1}{2 \times 3} \times 10^{-(2-1)} = 1.7\%$$

$$\varepsilon_r^* = \frac{1}{2 \times 3} \times 10^{-(3-1)} = 0.17\%$$

$$\varepsilon_r^* = \frac{1}{2 \times 3} \times 10^{-(4-1)} = 0.017\%$$

【例 2】 为使 $\sqrt{200}$的近似值的相对误差不超过 0.1%，问要取几位有效数字？

解 由(1.8)式，只需求出满足

$$\frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{-(n-1)} \leqslant 0.1\%$$

的 n 即可。显然，近似值的第一位有效数字为 $\alpha_1=1$。因此，由

$$\frac{1}{2} \times 10^{-(n-1)} \leqslant 0.1\%$$

可得 $n \geqslant 4$，于是 $\sqrt{200} \approx 14.14$。

§1.3 数值计算中需要注意的问题

1.3.1 避免两个相近的数相减

在数值计算中，两个相近的数相减，有时会严重损失有效数字，因而导致很大的相对误差。

例如，$x=1.5846$，$y=1.5839$ 都具有 5 位有效数字，但 $x-y=0.0007$ 只有一位有效数字。

为了更清楚的了解相近数相减的危害，我们看一个例子。

【例 1】 设 $x=18.496$，$y=18.493$，取四位有效数字计算 x

$-y$ 的近似值，并估计其相对误差。

解 取 $x^*=18.50$，$y^*=18.49$，则

$$x^*-y^*=18.50-18.49=0.01$$

而

$$x-y=18.496-18.493=0.003$$

其相对误差为

$$|e_r^*|=\left|\frac{(x-y)-(x^*-y^*)}{x^*-y^*}\right|=\left|\frac{0.003-0.01}{0.01}\right|=70\%$$

由此例可以看出相对误差变得很大。

现在从理论上分析一下两数之差的相对误差。设 x^* 和 y^* 分别为 x 和 y 的近似值，因而 x^*-y^* 是 $x-y$ 的近似值，其相对误差应满足

$$|e_r^*|=\frac{|(x-y)-(x^*-y^*)|}{|x^*-y^*|}\leqslant\frac{|x-x^*|}{|x^*-y^*|}+\frac{|y-y^*|}{|x^*-y^*|}$$

$$=\frac{|x^*|}{|x^*-y^*|}|e_r^*(x)|+\frac{|y^*|}{|x^*-y^*|}|e_r^*(y)|$$

当 x^* 和 y^* 非常接近时，$|x^*-y^*|$ 很小，使得相对误差 $|e_r^*|$ 变得很大。

为避免上述情况的发生，最好是利用恒等式改变计算方法，减少有效数字的损失。例如，当 x 和 y 是很接近的正数时，则

$$\lg x-\lg y=\lg\frac{x}{y}$$

当 x 很大时，则

$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$$

在无恒等式可用的情况下，可选用 Taylor 展开式，如当 $f(x)\approx f(x^*)$ 时，有