计算方法

秦林祥　杨泰敏　编

兵器工业出版社

计算方法

秦林祥 杨泰敏 编

兵器工业出版社

（京）新登字049号

内 容 简 介

本书着重介绍现代工程技术中常用的、计算机上行之有效的数值方法和原理，内容包括线性和非线性方程数值解、矩阵的特征值和特征向量计算、插值法、最佳逼近、数值积分与微分、常微分方程数值解等共九章，每章均配有适量的习题。

该书内容精练，由浅入深，循序渐进，易于教学。本书可作高等院校工科各专业高年级学生和工程类研究生开设计算方法课的教材或参考书，也可供工程技术人员自学计算方法用。

计 算 方 法
秦林祥 杨泰敏 编
*
兵器工业出版社 出版发行
（北京市海淀区车道沟10号）
各地新华书店 经销
北京市燕山联营印刷厂印装
*
开本：850×1163 1/32 印张：7.25 字数160.056千字
1992年3月第1版 1992年3月第1次印刷
印数：1—7000 定价：4.90元
ISBN 7-80038-365-2/O·19

前　　言

随着科学技术迅猛发展和计算机日益普及的需要，计算方法已是各理工科大学中普遍开设的一门课程，本书是为工科院校的高年级学生和工程类研究生学习计算方法而编写的教材。本教材着重介绍现代工程技术，科学研究和计算机上常用的数值方法和理论。它是在我院各专业使用多次的《计算方法讲义》的基础上并听取了我院计算方法教研室同志的建议后改写而成的，取材上力求精练、实用，编排上尽量由浅入深，循序渐进，并且每章均配有相关的习题，故便于施教，便于自学。读者只要具有高等数学和线性代数的知识，就能顺利地学习本书。

本教材共有九章，全部讲授大约需要72学时，如果删去第五章、第七章和第九章的全部或部分内容，就可作为36至54学时的教材。

本书的第一至第五章由秦林祥编写，第六至第九章由杨泰敏编写。在编写过程中，曾得到王璆教授的指教和蒋勇副教授的帮助，还得到华东工学院教材科的大力支持。在此谨向他们致谢。

因水平有限，本书中缺点乃至错误在所难免，望读者批评指正。

编　　者

1991年3月

目　　录

第一章 数值计算中的误差

用数值方法解决科学研究或工程技术中的实际问题，一般来说，产生误差是不可避免的。但是我们可以认识误差，从而控制误差，使之局限于最小（或尽量小）的范围内，这就是本章的宗旨。

§1 误差的来源

运用数学工具解决实际问题，可能产生的误差主要有如下几类。

1.1 描述误差

在将实际问题转化为数学模型的过程中，为了使数学模型尽量简单，以便于分析或计算，往往要忽略一些次要的因素，进行合理的简化。这样，实际问题与数学模型之间就产生了误差，这种误差称为描述误差。由于这类误差难于作定量分析，所以在计算方法中，总是假定所研究的数学模型是合理的，对描述误差不作深入的讨论。

1.2 观测误差

在数学模型中，一般都含有从观测（或实验）得到的数据，如温度、时间、速度、距离、电流、电压等等。但由于仪器本身的精度有限或某些偶然的客观因素会引入一定的误差，这类误差叫做观测误差。通常根据测量工具或仪器本身的精度，可以知道这类误差的上限值，所以无须在计算方法教材中，作过多的研究。

1.3 截断误差

在数值计算中，常用收敛的无穷级数的前几项来代替无穷级

数进行计算。如

$$e^x=1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\cdots \tag{1.1}$$

当$|x|$很小时，可以取（1.1）的前两项来近似代替e^x的计算，即

$$e^x\approx 1+x \qquad (|x|\text{很小时})$$

由台劳（Taylor）定理可知，这时$E(x)=1+x$ 与e^x的误差是

$$e^x-E(x)=\frac{x^2}{2}e^{\theta x} \qquad (0<\theta<1)$$

在计算中被抛弃了，这类误差叫作截断误差。截断误差的大小，直接影响数值计算的精度，所以它是数值计算中必须十分重视的一类误差。

1.4 舍入误差

无论用电子计算机、计算器计算还是笔算，都只能用有限位小数来代替无穷小数或用位数较少的小数来代替位数较多的有限小数，如

$$\pi=3.1415926\cdots, \qquad \frac{1}{3}=0.3333\cdots,$$

$$x=8.123456。$$

经四舍五入后取含小数点后四位数字的数来表示它们时，便有误差

$$\varepsilon_1=\pi-3.1416=-0.0000074\cdots,$$

$$\varepsilon_2=\frac{1}{3}-0.3333=0.000033\cdots,$$

$$\varepsilon_3=x-8.1235=-0.000044\cdots。$$

这类误差叫作舍入误差。当然，计算过程中，这类误差往往是有舍有入的，而且单从一次的舍入误差来看也许不算大，但数值计算中，往往要进行成千上万次四则运算，因而就会有成千上万个舍入误差产生，这些误差一经叠加或传递，对精度可能有较大

的影响。所以，作数值计算时，对舍入误差应予以足够的重视。

显然，上述四类误差都会影响计算结果的准确性，但描述误差和观测误差往往是计算工作者不能独立解决的，是需要会同各有关学科的科学工作者共同研究的问题，因此在计算方法课程中，主要研究截断误差和舍入误差（包括初始数据的误差）对计算结果的影响。

§2 和、差、积、商的误差

虽然数值计算中误差的产生是不可避免的，但为了防止误差积累偏大，以致造成计算结果严重失真，我们应该选择科学的算法，使误差控制在尽量小的范围内。下面我们将通过对常用的四则运算中误差积累规律的分析，提出数值计算中必须引起注意的事项。

2.1 误差和误差限

1．绝对误差与绝对误差限

定义1 设x是准确值x^*的近似值

（1）称$e=x^*-x$是近似值x的误差

（2）称$|e|=|x^*-x|$是近似值x的绝对误差，有时也简称误差。

由于x^*一般不知道，所以$|e|$也不得而知，但由实际问题往往可以估计出$|e|$不超过某个正数ε，如

用刻有毫米的尺测量某物的长度时，得最接近的值567毫米，此即

$$x=567,$$

显然，这个近似数的误差应该不超过半毫米，所以

$$|e|=|x^*-567|\leqslant\frac{1}{2}=\varepsilon\quad。$$

定义2　设x是准确值x^*的近似值，若ε满足不等式

$$|x^*-x|\leqslant\varepsilon,$$

则称ε是x的绝对误差限。

2. 相对误差与相对误差限

定义3　设x是准确值x^*的近似值，称$\left|\dfrac{e}{x^*}\right|=\left|\dfrac{x^*-x}{x^*}\right|$为近似值$x$的相对误差。

因为x^*一般不知道，所以作为分母的x^*用其近似值x代替，实际中就用$|e_r|=\left|\dfrac{x^*-x}{x}\right|=\left|\dfrac{e}{x}\right|$代替相对误差。

定义4　设x是准确值x^*的近似值，若ε_r满足不等式

$$\frac{|x^*-x|}{|x|}\leqslant\varepsilon_r$$

则称ε_r是x的相对误差限。

2.2　和、差的误差估计

设x、y分别是准确值x^*、y^*的近似值，ε_x和ε_y分别是x和y的绝对误差限

1. 和、差的绝对误差

$$|(x^*\pm y^*)-(x\pm y)|\leqslant|x^*-x|+|y^*-y|\leqslant\varepsilon_x+\varepsilon_y,$$

所以，和或差的绝对误差限不超过各近似值绝对误差限之和。显然，这一结论对多个近似数的和或差也是成立的。因而加数很多时，绝对误差限将会很大，如设x_i是x_i^*的近似值，ε_i为x_i的绝对误差限，则有

$$|(x_0^*\pm x_1^*\pm\cdots\pm x_n^*)-(x_0\pm x_1\pm\cdots\pm x_n)|\leqslant$$

$$\left|x_0^*-x_0\right|+\cdots+\left|x_n^*-x_n\right|\leqslant\sum_{i=0}^{n}\varepsilon_i\quad。$$

所以，作大量加减运算后的绝对误差限是决不可以小视的。

在计算机上作数值计算时，如果参加运算的数其绝对值的数量级相差很大，在它们的加、减法运算中，绝对值很小的那个

数，往往会被绝对值较大的数“吃掉”，造成计算结果失真。例如用五位浮点十进制计算机计算

$$y=54321+0.5+0.7+0.8$$

其准确值应是 $y=54323$。但在计算机上进行加、减法运算时，总是先对阶后加减，于是

$$y=0.54321\times10^5+0.000005\times10^5+0.000007\times10^5$$

$+0.000008\times10^5$，后三个数在五位浮点十进制计算机上都在对阶过程中被当作零了，从而得含有较大绝对误差的结果

$$y=54321,$$

要避免这种大数“吃”小数的现象，可以调整计算顺序，采用先小数后大数的计算次序，即先将0.5、0.7、0.8加起来，然后再加上54321。

2. 和、差的相对误差

这里不妨假定x、y是两个同号的数。

对于和的相对误差

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

$$=\left|\frac{x^*-x}{x}\cdot\frac{x}{x+y}+\frac{y^*-y}{y}\cdot\frac{y}{x+y}\right|\leqslant\left|\frac{x^*-x}{x}\right|\left|\frac{x}{x+y}\right|$$

$$+\left|\frac{y^*-y}{y}\right|\left|\frac{y}{x+y}\right|$$

若设 $\max\left\{\left|\frac{x^*-x}{x}\right|,\left|\frac{y^*-y}{y}\right|\right\}=\left|\frac{x^*-x}{x}\right|$，则有

$$\left|\frac{(x^*+y^*)-(x+y)}{x+y}\right|\leqslant\left|\frac{x^*-x}{x}\right|。$$

这就是说，和的相对误差限不超过各数相对误差中的最大者。因而和的相对误差增长不快。

差的相对误差

因为

$$\left|\frac{(x^*-y^*)-(x-y)}{x-y}\right|\leqslant\left|\frac{x^*-x}{x}\right|\left|\frac{x}{x-y}\right|$$

$$+\left|\frac{y^*-y}{y}\right|\left|\frac{y}{x-y}\right| \tag{1.2}$$

当$|x|\gg|y|$时，$\left|\dfrac{y}{x-y}\right|$很小，而$\left|\dfrac{x}{x-y}\right|\approx 1$，所以（1.2）式成为

$$\left|\frac{(x^*-y^*)-(x-y)}{x-y}\right|\approx\left|\frac{x^*-x}{x}\right|,$$

同理，如果$|y|\gg|x|$时有

$$\left|\frac{(x^*-y^*)-(x-y)}{x-y}\right|\approx\left|\frac{y^*-y}{y}\right|。$$

综上可知，被减数和减数相差很大时，大数的相对误差起决定性作用。

在(1.2)式中，若$|x|$与$|y|$很接近，由于$\left|\dfrac{x}{x-y}\right|$和$\left|\dfrac{y}{x-y}\right|$都将很大，所以相近两数之差的相对误差将很大。如：

用四位有效数计算$y=\sqrt{1001}-\sqrt{1000}$的值。

如果直接计算，则$y=\sqrt{1001}-\sqrt{1000}=31.64-31.62=0.02$，由于$y$的准确值是0.0158074374…，可见直接计算所得的近似值仅有一位有效数字，其相对误差大于26%。有时若作适当变形后计算，可以避免相近两数相减的计算，如

$$y=\sqrt{1001}-\sqrt{1000}=\frac{1}{\sqrt{1001}+\sqrt{1000}}=\frac{1}{63.26}$$

$$\approx 0.01581。$$

所得结果与准确值比较可知具有四位有效数字，其相对误差不超过0.02%。所以在数值计算中，必须避免相近两数相减，以免损失有效数字的位数。

2.3 积、商的误差估计

1. 积、商的绝对误差

以下我们不失一般性地设x，$y>0$，且x的绝对误差为$x^*-x=\Delta x$，由微分和增量的关系知x的绝对误差

$|x^*-x|\approx|dx|$，

所以x的相对误差为

$$\left|\frac{x^*-x}{x}\right|=\left|\frac{\Delta x}{x}\right|\approx\left|\frac{dx}{x}\right|=\left|d(\ln x)\right| \tag{1.3}$$

这样，乘积的绝对误差近似地为

$$|d(xy)|=|xdy+ydx|,$$

若设$|dx|\geqslant|dy|$，则

$$|d(xy)|\leqslant(x+y)|dx|。$$

商的绝对误差是

$$\left|d\left(\frac{x}{y}\right)\right|=\frac{|ydx-xdy|}{y^2} \tag{1.4}$$

在(1.4)中，当y很小时，$|ydx|$、y^2更小，这时商的绝对误差就可能很大。因此在数值计算中要尽量避免作大数除小数的计算。避免的方法是变形或改变计算顺序，如计算

$y=\dfrac{1000}{\sqrt{1001}-\sqrt{1000}}$，可以作如下变形后计算：

$$y=\frac{1000}{\sqrt{1001}-\sqrt{1000}}=1000(\sqrt{1001}+\sqrt{1000})$$

$$\approx63261.36664$$

该结果直到最末一位都是有效数字，而按原顺序计算得63261.35836，这仅有六位有效数字。

2. 积、商的相对误差

积的相对误差可由(1.3)得

$$|d\ln(xy)|=|d(\ln x+\ln y)|\leqslant\left|\frac{dx}{x}\right|+\left|\frac{dy}{y}\right|$$

同理可得商的相对误差的近似表达式为

$$\left|d\left(\ln\frac{x}{y}\right)\right|=\left|d(\ln x-\ln y)\right|\leqslant\left|\frac{dx}{x}\right|+\left|\frac{dy}{y}\right|。$$

综上可知，积或商的相对误差均近似地等于各近似数的相对误差之和。

以上所述的误差积累规律，对多个近似数的运算也是成立的。

例如设

$$u=\frac{AB}{CD},$$

则u的相对误差近似地为

$$\begin{aligned}|d\ln u|&=|d\ln A+d\ln B-d\ln C-d\ln D|\\&\leqslant|d\ln A|+|d\ln B|+|d\ln C|+|d\ln D|\end{aligned}$$

上述所有的误差估计都是十分保守的，实际计算中未必都有那种最坏的情况出现，然而在大量的数值运算中，有效位数的损失是难免的，为了弥补可能的损失，通常对参与运算的数和中间结果都尽量多取几位有效数字，而最后结果仍舍入到所要求的位数。

习 题 一

1. 下列各数都是经过五舍六入得到的近似数，即误差限不超过最后一位的半个单位：

$x_1=1.1021$； $x_2=0.031$； $x_3=385.6$； $x_4=56.430$；

$x_5=7\times10^5$；

求上列各近似值的绝对误差限和相对误差限。

2. 利用第1题所给的近似数对下列运算

1） $u=x_1+x_2+x_3$； 2） $u=x_1+x_2-x_3-x_4$；

3） $u=x_2/x_3/x_4$， 4） $u=x_2x_3/x_1$

估计u的绝对误差限和相对误差限。

3. 下列函数如何计算为好？

(1) $\mathrm{tg}\,x_1 - \mathrm{tg}\,x_2$，当$x_1$与$x_2$很接近时；

(2) $\dfrac{1-\cos x}{\sin x}$， 当$x=2°$时；

(3) $\mathrm{arctg}(x+1)-\mathrm{arctg}\,x$，当$x$充分大时；

(4) $10^7(1-\cos x)$，$x=2°$时用四位数学表。

4. 为减少近似计算中的舍入误差，应注意哪些问题？

第二章　非线性方程的求根

在科学技术或生产实践中，常常会遇到求解高次代数方程或超越方程的问题，例如方程

$$x^5 - 3x + 7 = 0$$

$$x - 10^x + 2 = 0$$

前者为高次代数方程，后者是超越方程。这些方程看似简单，实际高于四次的代数方程不存在一般的求根公式，超越方程通常也不能求出其准确解。而在实际中，只要能获得满足一定精确度的近似解就可以了，所以研究适用于实际计算的求方程近似解的数值方法,具有重要的现实意义。

§1　引　　言

若有数x^*使$f(x^*)=0$成立，则称x^*为方程$f(x)=0$的根，或称x^*为函数$f(x)$的零点。

求方程$f(x)=0$的根时，一般要先确定其根的大概位置，也就是要确定一个区间$[a, b]$，使该区间仅含$f(x)=0$的一个根，称这样的区间$[a, b]$为隔根区间。求隔根区间除代数方程有较完整的理论外，一般的可用试探的办法寻找。

求方程$f(x)=0$的根的问题，就几何意义来说，就是求曲线$y=f(x)$与x轴的交点的横坐标。所以找隔根区间，常常依据下列定理：

定理1　设实函数$f(x)$在区间$[a, b]$上连续，且$f(a)f(b)<0$，则方程$f(x)=0$在$[a, b]$上至少有一个实根。

这一定理是连续函数的介值定理，其几何意义是十分明显的

（见图2-1）。而且，如果$f(x)$在$[a,b]$上还是单调递增（或递减）时，方程$f(x)=0$在$[a,b]$上有且仅有一个实根。

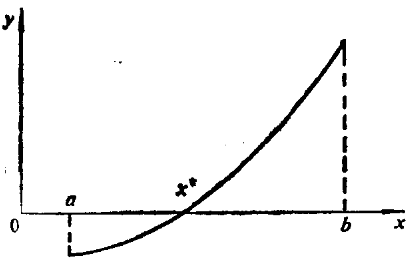

图 2-1

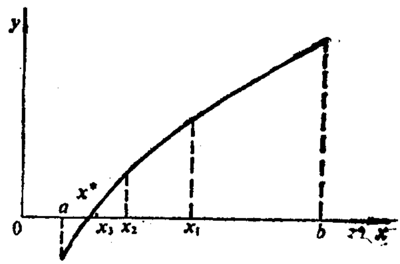

图 2-2

运用定理1及下述两个方法中的一个办法，可以大体确定根的范围。

1. 画出$y=f(x)$的略图，从而看出曲线$y=f(x)$与x轴交点的大致位置。

2. 适当地取一些数x_i来试算$f(x_i)$的值，可以确定根的范围。如有某两个点x_i和x_{i-1}，当$f(x_i)f(x_{i-1})<0$时，方程$f(x)=0$在$[x_{i-1}, x_i]$上至少有一个实根。若$f(x)$在$[x_{i-1}, x_i]$上又是单调时，则$[x_{i-1}, x_i]$就是一个隔根区间。

确定了根的大致范围后，可以用各种方法将近似根逐步精确化。其中最简单的方法就是二分法。

二分法：这种方法的基本思想是将含方程根的区间平分为两个小区间，然后判断根在哪个小区间，舍去无根的区间，而把有根的区间再一分为二，再判断根所在哪个更小的区间，如此周而复始，直到求出满足精度要求的近似根（如图2-2所示）。

设方程$f(x)=0$的实函数$f(x)$在区间$[a,b]$上单调连续，且$f(a)<0$，$f(b)>0$，故必有根$x^*\in[a,b]$，取$x_1=\frac{1}{2}(a+b)$并计算$f(x_1)$的值时，必有下列三种情况之一成立：

(1) 若$f(x_1)=0$，则$x_1=x^*$，这时可以停止计算。