

计算方法引论

○ 徐萃薇 编 ○ 高等教育出版社



高等学校试用教材

高等学校试用教材

计算方法引论

徐萃薇 编

高等教育出版社

内 容 提 要

本书是作者在北京大学为非计算数学专业的学生讲授计算方法课程时所编写的教材。

全书共分十四章,内容主要包括:插值法、数值微分、数值积分、线性方程组和非线性方程组的解法、矩阵特征值和特征向量的计算、常微分方程和偏微分方程数值解法、有限元方法。本书选材深浅适度,文字通俗易懂,有较丰富的例题,便于自学。可作为高等学校非计算数学专业的教材或参考书,也可供科技人员以及其他人员自学或参考。

本书由清华大学李庆扬、蔡大用先生,吉林大学冯果忱先生审阅。

高等学校试用教材

计 算 方 法 引 论

徐 萃 薇 编

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

北京印刷一厂印装

开本850×1168 1/32 印张10.375 字数260,000

1985年1月第1版 1985年4月第1次印刷

印数 00,001—19,730

书号 13010·01037 定价 2.15元

序 言

本书是作者 1976 年—1980 年在北京大学为非计算数学专业的学生讲授计算方法课程时所写的教材。

由于电子计算机的迅速发展，国内外关于计算方法的教程和专著日益增多。对于非计算数学专业的学生来说，虽然他们需要学习计算方法，但并不需要在计算数学的理论问题上花费过多的时间。这样，写一本适合于物理系、计算机系、地球物理系、力学系等大学生和研究生的计算方法教材就成为十分必要的了。作者本人讲授这门课程四次，每讲完一次都对教材进行了修改。另外，北京的几个兄弟院校（北京工业大学、北京工业学院、北京化工学院、北京师范大学和北京师范学院等）从 1980 年起也采用此书作为教材，反映也比较好，并曾根据使用情况对此教材的内容提出了许多宝贵意见，本书就是在采纳了大家提出的修改意见后定稿的。

本书内容共分三部分。第一部分是数值分析，第二部分是数值代数，第三部分是常微分方程数值解法和偏微分方程数值解法。全书讲授学时为 72—80 学时。如果学时少于 72 学时，可少讲或不讲偏微分方程数值解法。如果学时多于 80 学时，可根据本书参考书目，增加所需的内容。

学习本书所必须的数学基础是微积分和线性代数，以及常微分方程和偏微分方程的基本概念。这是一般理工科大学的学生都具备的。对于自学过这些课程的青年，如果他们想进一步自学计算方法，以解决一些实际应用问题，本书对他们也是适宜的。本书每章都附有一定数量的习题，通过这些习题可以加深对各章内容的理解，掌握必要的解题技巧。

作者特别感谢北京大学计算数学教研室主任胡祖炘教授，他

仔细地审阅了原稿，提出了大量的宝贵意见和建议；还要感谢北京师范大学沈嘉骥同志和北京大学王莲芬同志，他们根据使用这本教材的情况，给作者提出了不少有价值的修改意见。

徐莘荪

1982年冬识于北

京大学燕东园

目 录

第一章 误差	1
§ 1 误差的来源	1
§ 2 误差、误差限、有效数字	2
§ 3 相对误差和相对误差限	5
§ 4 和、差、积、商的误差	8
§ 5 在近似计算中需要注意的一些现象	9
第二章 插值法与数值微分	13
§ 1 线性插值	14
§ 2 二次插值	18
§ 3 n 次插值	25
§ 4 分段线性插值	29
§ 5 Hermite 插值	35
§ 6 分段三次 Hermite 插值	39
§ 7 样条插值函数	42
§ 8 数值微分	47
第三章 数据拟合法	54
§ 1 问题的提出及最小二乘原理	54
§ 2 多变量的数据拟合	59
§ 3 非线性曲线的数据拟合	62
§ 4 较一般情形的数据拟合法	67
第四章 快速富氏变换	76
§ 1 三角函数插值或有限离散富里叶变换 (DFT)	76
§ 2 快速富氏变换 (FFT)	79
第五章 数值积分	88
§ 1 梯形求积公式、抛物线求积公式和牛顿-柯特斯 (Newton-Cotes)公式	88

§ 2	梯形求积公式和抛物线求积公式的误差估计	92
§ 3	复化公式及其误差估计	96
§ 4	数值方法中的加速收敛技巧——Richardson 外推算法	105
§ 5	Romberg 求积法	106
§ 6	高斯(Gauss)型求积公式	109
§ 7	方法的评述	119
第六章	解线性代数方程组的直接法	122
§ 1	高斯消去法	122
§ 2	主元素消去法	129
§ 3	LU 分解	132
§ 4	对称正定矩阵的平方根法和 LDL^T 分解	136
第七章	解线性方程组的迭代法	141
§ 1	向量范数、矩阵范数、谱半径及有关性质	141
§ 2	几种常用的迭代格式	145
§ 3	迭代法的收敛性及误差估计	150
§ 4	判别收敛的几个常用条件	155
第八章	矩阵特征值和特征向量的计算	161
§ 1	幂法	161
§ 2	幂法的加速与降阶	167
§ 3	反幂法	169
§ 4	平行迭代法	170
§ 5	QR 算法	172
§ 6	Jacobi 方法	175
附录	Schmidt 正交化方法	182
第九章	非线性方程及非线性方程组解法	185
§ 1	求实根的对分区间法	186
§ 2	迭代法	188
§ 3	迭代收敛的加速	192
§ 4	牛顿(Newton)法	195
§ 5	弦位法	196

§ 6	抛物线法	198
§ 7	解非线性方程组的牛顿迭代法	200
§ 8	最速下降法	202
第十章	常微分方程初值问题的数值解法	207
§ 1	几种简单的数值解法	208
§ 2	R-K 方法	215
§ 3	线性多步法	220
§ 4	预估-校正公式	225
§ 5	常微分方程组和高阶微分方程的数值解法	227
§ 6	自动选取步长的需要和事后估计	230
§ 7	Stiff 方程	234
第十一章	双曲型方程的差分解法	239
§ 1	差分格式的建立	240
§ 2	差分格式的收敛性	244
§ 3	差分格式的稳定性	246
§ 4	利用特征线构造差分格式	251
附录	方程 $\frac{\partial u}{\partial t} + \alpha \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 的差分格式	254
第十二章	抛物型方程的差分解法	256
§ 1	微分方程的差分近似	257
§ 2	边界条件的差分近似	259
§ 3	几种常用的差分格式	261
§ 4	差分格式的稳定性	265
§ 5	二维热传导方程的交替方向法	270
附录	矩阵 A 的特征值和特征向量的求法	274
第十三章	椭圆型方程的差分解法	278
§ 1	差分方程的建立	278
§ 2	差分方程组解的存在唯一性问题	281
§ 3	差分方法的收敛性与误差估计	283
第十四章	有限元方法	288

§ 1 通过一个例子看有限元方法的计算过程	288
§ 2 一般二阶常微分方程边值问题的有限元解法	303
§ 3 平面有限元	310
§ 4 小结	321
参考书	323

第一章 误差

§ 1 误差的来源

用数学工具来解决实际问题在哪些地方会产生误差呢？首先是用数学模型来描述具体的物理现象要作许多简化，因此，数学模型本身就包含着误差，这种误差叫做“模型误差”。在数学模型中通常总要包含一些观测数据，这种观测结果不会是绝对准确的，因此还有“观测误差”。现举例说明。

例 1 设一根铝棒在温度 t 时的实际长度为 L_t ，在 $t=0$ 时的实际长度为 L_0 ，用 l_t 来表示铝棒在温度为 t 时的长度计算值，并建立一个数学模型：

$$l_t = L_0(1 + \alpha t)$$

其中 α 是由实验观测到的常数：

$$\alpha = (0.0000238 \pm 0.0000001) 1/^\circ\text{C}$$

则称 $L_t - l_t$ 为“模型误差”。 $0.0000001/^\circ\text{C}$ 是 α 的“观测误差”。

例 2 我们用

$$s(t) = \frac{1}{2}gt^2, \quad g \approx 9.81 \text{ 米/秒}^2$$

来描述自由落体下落时距离和时间的关系。设自由落体在时间 t 的实际下落距离为 \tilde{s}_t ，则把 $\tilde{s}_t - s(t)$ 叫做“模型误差”。

在解实际问题时，数学模型往往很复杂，因而不易获得分析解，这就需要建立一套行之有效的近似方法或数值方法。模型的准确解与用数值方法求得的准确解之差称为“方法误差”，或者叫做“截断误差”。

例 3 一个无穷级数

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0)$$

在实际计算时,我们只能取前面有限项(例如 n 项)

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0)$$

来代替,这就抛弃了无穷级数的后半段,因而出现了误差,这种误差就是一种“截断误差”。对这个问题来说,截断误差是

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0) = \sum_{k=n}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0)$$

最后,还有一类误差是因为在计算时总是只能取有限位数字进行运算而引起的,这种误差称为“舍入误差”。

例 4 $\pi = 3.1415926 \dots$, $\sqrt{2} = 1.41421356 \dots$, $\frac{1}{3} = 0.3333 \dots$ 等等。在计算机上运算时只能用有限位小数,如我们取小数点后四位数字,则

$$\rho_1 = 3.1416 - \pi = +0.0000074 \dots$$

$$\rho_2 = 1.4142 - \sqrt{2} = -0.000013 \dots$$

$$\rho_3 = 0.3333 - \frac{1}{3} = -0.000033 \dots$$

就是“舍入误差”。

总括起来,误差一般有:模型误差;观测误差;截断误差;舍入误差。但在计算方法中主要讨论的是截断误差和舍入误差。

§ 2 误差、误差限、有效数字

如何来定义误差? 若用 x^* 来表示 x 准确值的一个近似值,

则此近似值 x^* 和 x 准确值的差称为误差,用 e^* 来表示:

$$e^* = x^* - x$$

这样定义后,就有 $x = x^* - e^*$,即近似值去掉(减去)它的误差就是准确值。因此,把误差的负数 $-e^*$ 叫做近似值 x^* 的“修正值”。

或者说,近似值加上它的修正值就是准确值。

误差可正可负,当误差为正时,近似值偏大,叫做“强近似”,当误差为负时,近似值偏小,叫做“弱近似”。

由于在一般情况下准确值 x 是不知道的,所以误差 e^* 的准确值也不可能求出,但根据具体测量或计算的情况,可以事先估计出误差的绝对值不能超过某个正数 e^* , 我们把 e^* 叫做误差绝对值的“上界”,或称“误差限”。

定义 如果

$$|e^*| = |x^* - x| \leq e^*$$

e^* 就叫做近似值 x^* 的“误差限”。误差限一定是一个正数。

因为在任何情况下都有

$$|x^* - x| \leq e^*$$

即

$$x^* - e^* \leq x \leq x^* + e^*$$

这就表明 x 在 $[x^* - e^*, x^* + e^*]$ 这个区间内,我们用

$$x = x^* \pm e^*$$

来表示近似值 x^* 的精确度,或准确值所在的范围。

例 5 用一把有毫米刻度的米尺,来测量桌子的长度,读出的长度 $x^* = 1235$ 毫米,是桌子实际长度 x 的一个近似值,由米尺的精度我们知道,这个近似值的误差不会超过半个毫米,则有

$$|x^* - x| = |1235 - x| \leq \frac{1}{2} \text{毫米}$$

即

$$1234.5 \leq x \leq 1235.5$$

这表明 x 在 $[1234.5, 1235.5]$ 这个区间内, 写成

$$x = 1235 \pm 0.5 \text{ 毫米}$$

例 6 光速 c 的近似值目前公认的是:

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

通常记为

$$c = (2.997925 \pm 0.000,001) \times 10^{10} \text{ 厘米/秒}$$

取 x 的近似值 x^* , 我们通常用四舍五入的方法取前面几位.

例 7 $x = \pi = 3.14159265 \dots$

按四舍五入的原则

$$\text{取一位: } x_1^* = 3, \quad e_1^* \approx -0.14.$$

$$\text{取三位: } x_3^* = 3.14, \quad e_3^* \approx -0.0016.$$

$$\text{取五位: } x_5^* = 3.1416, \quad e_5^* \approx +0.000007.$$

$$\text{取六位: } x_6^* = 3.14159, \quad e_6^* \approx -0.000003.$$

如果近似值 x^* 的误差限是某一位上的半个单位, 该位到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位, 我们就说 x^* 有“ n 位有效数字”. 或者说 x^* 准确到该位. 用四舍五入法取准确值的前 n 位作为近似值 x^* , 则 x^* 有 n 位有效数字. 上面例子中的 $x_3^* = 3.14$ 是以三位有效数字来表示 π , 它的误差限为

$$|x_3^* - \pi| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

$x_5^* = 3.1416$ 是以五位有效数字来表示 π , 它的误差限为

$$|x_5^* - \pi| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

下面我们再来说明有效数字位和误差限之间的关系.

定义 若用 x^* 表示 x 的近似值, 并将 x^* 表示成

$$x^* = \pm 0. \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n \times 10^p \quad (1-1)$$

若其误差限

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{p-n}$$

便说近似值 x^* 具有 n 位有效数字, 这里 p 是一个整数, $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$, 每个都是从 $0 \sim 9$ 中的一个数字, 而且假定 $\alpha_1 \neq 0$.

从这里可以看出误差限和有效数字位之间的关系, 并可以通过有效数字位来刻划误差限.

例 8 若 $x^* = 3587.64$ 是 x 的具有六位有效数字的近似值, 那么它的误差限是:

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{4-6} = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

若 $x^* = 0.0023156$ 是 x 的具有五位有效数字的近似值, 则误差限是:

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2-5} \leq \frac{1}{2} \times 10^{-7}$$

§ 3 相对误差和相对误差限

上节引入的误差和误差限的概念, 不能说明近似的好坏程度, 它是有量纲单位的. 譬如, 工人甲平均每生产一百个零件有一个次品, 而工人乙则平均生产五百个零件有一个次品. 他们的次品都是一个, 但显然乙的技术水平要比甲高. 这就启发我们除了要看次品的多少外, 还必须注意到产品的合格率, 甲的次品是百分之一, 而乙的次品是五百分之一. 我们把近似数的误差与准确值的比值定义为“相对误差”, 记作 e_r^* .

定义 记

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

为近似数 x^* 的相对误差. 在实际计算中, 由于准确值 x 总是不知道的, 所以我们也把

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

记为近似值 x^* 的相对误差,条件是 e_r^* 比较小.

与前面引入的误差一样,相对误差可正可负,我们把相对误差绝对值的上界叫做“相对误差限”,记作

$$e_r^* = \frac{e^*}{|x^*|}$$

其中 e^* 是 x^* 的误差限.

为了区别相对误差与 § 2 中讲的误差,我们把 § 2 中讲的误差叫做“绝对误差”.注意,绝对误差不是误差的绝对值.

例 9 $c = (2.997,925 \pm 0.000,001) \times 10^{10}$ 厘米/秒,这时 $c^* = 2.997,925 \times 10^{10}$ 厘米/秒的相对误差限是:

$$e_r^* = \frac{0.000,001}{2.997,925} \approx 0.000,000,3$$

c^* 是 c 的很好的近似值.如果我们取

$$c^{**} = 3 \times 10^{10} \text{ 厘米/秒}$$

作为光速的近似值,则有

$$e_r^{**} = \frac{0.0021}{3} = 0.0007$$

相对误差限不到千分之一. $c^{**} = 3.00 \times 10^{10}$ 厘米/秒是用四舍五入法取 c 的前三位数的近似值,它有三位有效数字.

同样可以给出相对误差限和有效数字位的关系.

设形如(1-1)的近似数 x^* 具有 n 位有效数字,则其相对误差限为

$$e_r^* = \frac{e^*}{|x^*|} \leq \frac{1}{2\alpha_1} 10^{-(n-1)}$$

要说明这一点并不困难,由定义知 x^* 是具有 n 位有效数字的近似值,因此

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{p-n}$$

相对误差限

$$e_r^* = \frac{|x^* - x|}{|x^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{p-n}}{|x^*|}$$

而 $|x^*| \geq \alpha_1 \times 10^{p-1}$, 所以

$$e_r^* \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{p-n}}{\alpha_1 \times 10^{p-1}} = \frac{1}{2\alpha_1} 10^{-(n-1)}$$

要注意的是, 用相对误差限来得到有效数字位时, 其关系略有不同。

形如(1-1)的近似数 x^* , 相对误差限满足关系式

$$e_r^* \leq \frac{1}{2(\alpha_1 + 1)} 10^{-(n-1)}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字位。

和前面关系不同的是分母为 $2(\alpha_1 + 1)$ 。这是因为若要 x^* 具有 n 位有效数字, 则只要能证明

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{p-n}$$

即可。而

$$|x^* - x| = |x^*| e_r^* \leq |x^*| \frac{1}{2(\alpha_1 + 1)} 10^{-(n-1)}$$

因为 $|x^*| \leq (\alpha_1 + 1) \times 10^{p-1}$, 所以

$$\begin{aligned} |x^* - x| &\leq (\alpha_1 + 1) \times 10^{p-1} \frac{1}{2(\alpha_1 + 1)} 10^{-(n-1)} \\ &= \frac{1}{2} \times 10^{p-n} \end{aligned}$$

例 10 用 $x^* = 2.72$ 来表示 e 具有三位有效数字的近似值, 则相对误差限是:

$$e_r^* \leq \frac{1}{2 \times 2} \times 10^{-2}$$

§ 4 和、差、积、商的误差

设 x^* 是 x 的近似值, y^* 是 y 的近似值, 用 $x^* \pm y^*$ 来表示 $x \pm y$ 的近似值, 则它的误差为:

$$(x^* \pm y^*) - (x \pm y) = (x^* - x) \pm (y^* - y) \quad (1-2)$$

式(1-2)说明和的误差是误差之和, 差的误差是误差之差。但是因为

$$|(x^* \pm y^*) - (x \pm y)| \leq |x^* - x| + |y^* - y|$$

所以误差限之和是和或差的误差限。以上的结论适用于任意多个近似数的和或差。任意多个数的和或差的误差限等于各数的误差限之和。

若我们把 x^* 的误差 $e^* = x^* - x$ 看作是 x 的微分

$$dx = x^* - x$$

x^* 的相对误差是

$$e_r^* = \frac{x^* - x}{x} = \frac{dx}{x} = d \ln x$$

它是对数函数的微分。

设 $u = xy$, 则 $\ln u = \ln x + \ln y$, 因而

$$d \ln u = d \ln x + d \ln y$$

这就是说, 乘积的相对误差是各乘数的相对误差之和。同样可证, 商的相对误差是被除数与除数的相对误差之差。这是因为, 若

$$u = x/y$$

则

$$\ln u = \ln x - \ln y$$

因此

$$d \ln u = d \ln x - d \ln y$$