

310014

计算方法

JISHUANFANGFA

易大义 沈云宝 李有法 编



出版社

浙江大

高等学校教学用书

计 算 方 法

易大义 沈云宝 李有法 编

浙江大学出版社

内 容 简 介

本书介绍了近代计算机常用的计算方法及其基础理论。内容包括插值法、曲线拟合、数值微积分、方程求根、线性与非线性方程组的解法、常微分方程数值解法等。

本书取材适当,由浅入深,易于教学。每章主要的算法除有框图外,还配有较多的实例,着重培养学生的工程计算能力。每章附有适量的习题。

本书可作为工科院校各专业知识学习计算方法的教材,也可作为业余科技大学、电视大学有关专业和工程技术人员的参考书。

计 算 方 法

易大义 沈云宝 李有法 编

责任编辑 贾吉柱

浙江大学出版社出版

上虞汤浦印刷厂排版

萧山东湘印刷厂印刷

浙江省新华书店发行

787×1092 32开本 9.375印张 210千字

1989年11月第1版 1989年11月第1次印刷

印数: 0001—2500

ISBN 7—308—00329—9

O·051 定价: 1.85元

前 言

计算机在科学和工程设计中应用日益广泛,它已经成为工程师、大学生和各类管理人员极为有用的工具。因此培养学生的科学和工程计算能力,学习计算机常用的数值方法(计算方法)已受到许多院校的重视,使“计算方法”成为必修的基础课。

本书是在浙江大学1986年以来全面开设“计算方法”课程讲义基础上编写而成。内容力求介绍计算机中基本的、有效的各类数值问题的计算方法。同时,重视培养学生应用计算方法解决工程计算问题的能力。

在学习本课程之前应预修微积分、算法语言、常微分方程、工程线性代数等课程。

本课程为学期课(周学时为3),并应安排一定的计算实习。

本书由浙江大学应用数学系易大义编写第5、6章,李有法编写第2、3、4章,电机系沈云宝编写第1、7章。

限于作者水平,书中错误和不足之处 敬请读者批评指正。

编者于浙大

1989年4月

目 录

第一章 数值计算中的误差	1
§ 1 引言	1
§ 2 误差的种类及其来源	4
2.1 模型误差	4
2.2 观测误差	5
2.3 截断误差	5
2.4 舍入误差	6
§ 3 绝对误差和相对误差	7
3.1 绝对误差和绝对误差限	7
3.2 相对误差和相对误差限	8
§ 4 有效数字及其与误差的关系	10
4.1 有效数字	10
4.2 有效数字与误差的关系	12
§ 5 误差的传播与估计	14
5.1 误差估计的一般公式	14
5.2 误差在算术运算中的传播	18
5.3 对 § 1 算例的误差分析	21
§ 6 算法的数值稳定性	23
小结	29
习题一	30
第二章 插值法	33
§ 1 引言	33
1.1 插值问题的提法	33

1.2 插值多项式的存在唯一性	35
§ 2 拉格朗日插值多项式	35
2.1 插值基函数	36
2.2 拉格朗日插值多项式	36
2.3 插值余项	41
2.4 插值误差的事后估计法	43
§ 3 牛顿插值多项式	44
3.1 向前差分与牛顿向前插值公式	45
3.2 向后差分与牛顿向后插值公式	49
3.3 差商与牛顿基本插值多项式	51
§ 4 分段低次插值	55
§ 5 三次样条插值	58
5.1 三次样条插值函数的定义	59
5.2 边界条件问题的提出与类型	59
5.3 三次样条插值函数的求法	60
§ 6 数值微分	69
6.1 利用插值多项式求导数的原理与常用公式	70
6.2 利用三次样条插值函数求导数的原理与公式	72
小结	74
习题二	74
第三章 曲线拟合的最小二乘法	77
§ 1 引言	77
§ 2 什么是最小二乘法	78
§ 3 最小二乘解的求法	79
§ 4 加权最小二乘法	90
§ 5 利用正交函数作最小二乘拟合	93
5.1 利用正交函数作最小二乘拟合的原理	93
5.2 利用正交多项式作多项式拟合	94
小结	96

习题三	97
第四章 数值积分	98
§ 1 引言	98
1.1 讨论数值求积的必要性	98
1.2 构造数值求积公式的基本方法	98
1.3 求积公式的余项	99
1.4 求积公式的代数精度*	100
§ 2 牛顿-柯特斯公式	101
2.1 牛顿-柯特斯公式	102
2.2 复合牛顿-柯特斯公式	106
2.3 误差的事后估计与步长的自动选择	112
2.4 复合梯形法的递推算式	114
§ 3 龙贝格算法	118
3.1 龙贝格算法的基本原理	118
3.2 龙贝格算法计算公式的简化	122
§ 4 高斯型求积公式*	124
4.1 高斯型求积公式的定义	124
4.2 高斯型求积公式的构造与应用	125
小结	130
习题四	131
第五章 非线性方程的数值解法	133
§ 1 引言	133
§ 2 二分法	136
§ 3 迭代法	141
§ 4 牛顿-雷扶生方法	151
4.1 牛顿法公式及误差分析	151
4.2 牛顿法的局部收敛性	154
4.3 牛顿法例子及框图	157
§ 5 正割法	162

§ 6 迭代法的收敛阶和 Aitken 加速方法	164
小结	167
习题五	168
第六章 解方程组的数值方法	170
§ 1 引言	170
§ 2 高斯消去法	170
§ 3 选主元素的高斯消去法	177
3.1 完全主元素消去法	179
3.2 列主元素消去法	181
§ 4 矩阵的三角分解	184
§ 5 解三对角线方程组的追赶法	188
§ 6 解对称正定矩阵方程组的平方根法	191
§ 7 向量和矩阵的范数	196
§ 8 解线性方程组的迭代法	200
8.1 雅可比迭代法	203
8.2 高斯-塞德尔迭代法	204
8.3 解线性方程组的超松弛迭代法	206
8.4 迭代法的收敛性	211
§ 9 解非线性方程组的迭代法	217
9.1 解非线性方程组的迭代法	218
9.2 解非线性方程组的牛顿法	221
§ 10 病态方程组和迭代改善法	224
10.1 病态方程组	224
10.2 迭代改善法	229
小结	231
习题六	232
第七章 常微分方程的数值解法	235
§ 1 引言	235

§ 2 欧拉方法	237
2.1 欧拉格式	237
2.2 改进的欧拉格式	244
§ 3 龙格-库塔方法	247
3.1 龙格-库塔公式的导出	247
3.2 高阶龙格-库塔格式	250
3.3 步长的自动选择*	255
§ 4 阿达姆斯方法	257
4.1 线性多步方法	257
4.2 显式和隐式阿达姆斯格式	258
4.3 阿达姆斯预测-校正方法	265
4.4 阿达姆斯预测-校正方法的改进*	268
§ 5 算法的稳定性及收敛性	270
5.1 稳定性	270
5.2 收敛性	275
§ 6 方程组及高阶方程的数值解法	277
6.1 一阶方程组	277
6.2 高阶方程	279
§ 7 边值问题的数值解法*	282
7.1 差分方程组的建立	283
7.2 差分方程组的求解	285
小结	286
习题七	287
参考文献	289

第一章 数值计算中的误差

§ 1 引言

利用计算尺、电子计算机等计算工具来求出数学问题的数值解的全过程,称为数值计算。

随着科学技术的突飞猛进,无论是工农业生产还是国防尖端技术,例如机电产品的设计、建筑工程项目的设计、气象预报和新型尖端武器的研制、火箭的发射等,都有大量复杂的数值计算问题急待解决。它们的复杂程度已达到远非人工手算(包括使用计算器等简单的计算工具)所能解决的地步。数字式电子计算机的出现和飞速发展大大推动了数值计算方法的进展,许多复杂的数值计算问题现在都可以通过电算(即用电子计算机进行数值计算)得到妥善解决。

用数值计算的方法来解决工程实际和科学技术中的具体技术问题,首先必须将具体问题抽象为数学问题,即建立起能描述并等价代替该实际问题的数学模型,例如各种微分方程、积分方程、代数方程……等等,然后选择合适的计算方法(算法),编制出计算机程序,最后上机调试并进行运算,以得出所欲求解的结果来。

所谓数值计算方法,是指将所欲求解的数学模型(数学问题)简化成一系列算术运算和逻辑运算,以便在计算机上求出问题的数值解,并对算法的收敛性、稳定性和误差进行分析、计算。这里所说的“算法”,不只是单纯的数学公式,而且是

指由基本运算和运算顺序的规定所组成的整个解题方案和步骤。一般可以通过框图(流程图)来较直观地描述算法的全貌。

选定合适的算法是整个数值计算中非常重要的一环。例如,当计算多项式

$$P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

的值时,若直接计算 $a_i x^i (i = 0, 1, 2, \cdots, n)$, 再逐项相加, 共需做

$$1 + 2 + \cdots + (n-1) + n = \frac{n(n+1)}{2}$$

次乘法和 n 次加法。 $n = 10$ 时需做 55 次乘法和 10 次加法。若用著名的秦九韶(我国宋朝数学家)算法, 将多项式 $P(x)$ 改写成

$$P(x) = ((\cdots((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \cdots + a_2)x + a_1)x + a_0$$

来计算时, 只要做 n 次乘法和 n 次加法即可。如当 $n = 10$ 时, 只要做 10 次乘法和 10 次加法。可见算法的优劣直接影响计算的速度和效率。

对于小型问题, 计算的速度和占用计算机内存的多寡似乎意义不大。但对复杂的大型问题而言, 却是起着决定性作用。

算法选得不恰当, 不仅影响到计算的速度和效率, 还会由于计算机计算的近似性和误差的传播、积累直接影响到计算结果的精度, 有时甚至直接影响到计算的成败。不合适的算法会导致计算误差达到不能容许的地步, 而使计算最终失败, 这就是算法的数值稳定性问题。

数值计算过程中会出现各种误差, 它们可分为两大类: 一类是由于算题者在工作中的粗心大意而产生的, 例如笔误

将 886 误写成 868, 以及误用公式等, 这类误差称为“过失误差”或“疏忽误差”。它完全是人为造成的, 只要工作中仔细、谨慎, 是完全可以避免的, 我们就不再讨论它; 而另一类为“非过失误差”, 在数值计算中则往往是无法避免的, 例如近似值带来的误差, 还有模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差等。对于它们, 应该设法尽量降低其数值, 尤其要控制住经多次运算后误差的积累, 以确保计算结果的精度。

下面通过一个简单的算例, 可以看出近似值带来的误差和算法的选择对计算结果的精度所产生的巨大影响。例如, 要计算

$$x = \left(\frac{\sqrt{2} - 1}{\sqrt{2} + 1} \right)^3$$

可用下列四种算式算出:

$$x = (\sqrt{2} - 1)^6$$

$$x = 99 - 70\sqrt{2}$$

$$x = \left(\frac{1}{\sqrt{2} + 1} \right)^6$$

$$x = \frac{1}{99 + 70\sqrt{2}}$$

如分别用近似值 $\sqrt{2} \approx 7/5 = 1.4$ 和 $\sqrt{2} \approx 17/12 = 1.4166\cdots$, 按上列四种算法计算 x 值, 其结果如表 1-1 所示。

由表 1-1 可见, 按不同算式和近似值所算出的结果五花八门, 各不相同。有的甚至相差至巨, 还出现了负值, 这真是差之毫厘, 谬以千里。可见近似值和算法的选定对计算结果的精确度影响很大。当然, 此刻我们还不能说出表 1-1 中哪个计算结果更接近于 x 的真值, 这要在 § 5 中经过误差估

表 1-1

序 号	算 式	计 算 结 果	
		$\sqrt{2} \approx 7/5$	$\sqrt{2} \approx 17/12$
1	$(\sqrt{2} - 1)^6$	$\left(\frac{2}{5}\right)^6 = 0.0040960$	$\left(\frac{5}{12}\right)^6 = 0.00523278$
2	$99 - 70\sqrt{2}$	1	$-\frac{1}{6} = -0.16666667$
3	$\left(\frac{1}{\sqrt{2} + 1}\right)^6$	$\left(\frac{5}{12}\right)^6 = 0.00523278$	$\left(\frac{12}{29}\right)^6 = 0.00501995$
4	$\frac{1}{99 + 70\sqrt{2}}$	$\frac{1}{197} = 0.00507614$	$\frac{12}{2378} = 0.00504626$

计和分析后才能得到正确的结论。

因此,在研究算法的同时,还必须正确掌握误差的基本概念,误差在近似值运算中的传播规律,误差分析、估计的基本方法和算法的数值稳定性概念,否则,一个合理的算法也可能会得出一个错误的结果来。

§ 2 误差的种类及其来源

如上节所述,除了可以避免的过失误差外,还有不少无法避免的非过失误差存在于数值计算过程中,按照它们来源的不同,分述如后。

2.1 模型误差

在建模(建立数学模型)过程中,欲将复杂的物理现象抽象、归结为数学模型,往往只得忽略一些次要因素的影响,而

对问题作某些必要的简化。这样建立起来的数学模型实际上必定只是所研究的复杂客观现象的一种近似的描述，它与真正客观存在的实际问题之间有一定的差别，这种误差称为“**模型误差**”。

2.2 观测误差

在建模和具体运算过程中所用到的一些初始数据往往都是通过人们实际观察、测量得来的，由于受到所用观测仪器、设备精度的限制，这些测得的数据都只能是近似的，即存在着误差，这种误差称为“**观测误差**”或“**初值误差**”。

2.3 截断误差

在不少数值运算中常遇到超越计算，如微分、积分和无穷级数求和等，它们需用极限或无穷过程来求得。然而计算机却只能完成有限次算术运算和逻辑运算，因此需将解题过程化为一系列有限的算术运算和逻辑运算。这样就要对某种无穷过程进行“截断”，即仅保留无穷过程的前段有限序列而舍弃它的后段。这就带来了误差，称它为“**截断误差**”或“**方法误差**”。例如，函数 $\sin x$ 和 $\ln(1+x)$ 可分别展开为无穷幂级数：

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots \quad (2.1)$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots \quad (-1 < x \leq 1) \quad (2.2)$$

若取级数的起始若干项的部分和作为 $x < 1$ 时函数值的近似计算公式，例如取

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} \quad (2.3)$$

$$\ln(1+x) \approx x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} \quad (2.4)$$

则由于它们的第四项和以后各项都舍弃了,自然产生了误差。这就是由于截断了无穷级数自第四项起的后段而产生的截断误差。

(2.3)和(2.4)的截断误差是很容易估算的,因为幂级数(2.1)和(2.2)都是交错级数,当 $x < 1$ 时各项的绝对值又都是递减的,因此,这时它们的截断误差 $R_k(x)$ 可分别估计为

$$|R_4(x)| \leq \frac{x^7}{7!}$$

和 $|R_4(x)| \leq \frac{x^4}{4}$

2.4 舍入误差

在数值计算过程中还会用到一些无穷小数,例如无理数和有理数中某些分数化出的无限循环小数,如

$$\pi = 3.14159265 \dots$$

$$\sqrt{2} = 1.41421356 \dots$$

$$\frac{1}{3!} = \frac{1}{6} = 0.166666 \dots$$

等。而计算机受机器字长的限制,它所能表示的数据只能有一定的有限位数,这时就需把数据按四舍五入舍入成一定位数的近似的有理数来代替。由此引起的误差称为“舍入误差”或“凑整误差”。

综上所述,数值计算中除了可以完全避免的过失误差外,还存在难以回避的模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差。数学模型一旦建立,进入具体计算时所要考虑和分析的就是截断误差和舍入误差了。在计算机上经过千百万次运算

后所积累起来的总误差不容忽视,有时可能会大得惊人,甚至到达“淹没”所欲求解的真值的地步,而使计算结果失去根本的意义。因此,本书在以后各章讲解各种算法时,将对其截断误差的估算和舍入误差的控制作适当的介绍。

§ 3 绝对误差和相对误差

3.1 绝对误差和绝对误差限

设某一个量的准确值(称为真值)为 x , 其近似值为 x^* , 则 x 与 x^* 的差

$$e(x) = x - x^* \quad (3.1)$$

称为近似值 x^* 的“绝对误差”,简称“误差”。当 $e(x) > 0$ 时,称 x^* 为亏近似值或弱近似值,反之则称为盈近似值或强近似值。

由于真值 x 往往是未知或无法知道的,因此 $e(x)$ 的准确值(真值)也就无法求出。但一般可估计出此绝对误差 $e(x)$ 的上限,也即可以求出一个正数 η ,使

$$|e(x)| = |x - x^*| \leq \eta \quad (3.2)$$

此 η 称为近似值 x^* 的“绝对误差限”,简称“误差限”,或称“精度”。有时也用

$$x = x^* \pm \eta \quad (3.3)$$

来表示(3.2)。这时等式右端的两个数值 $x^* + \eta$ 和 $x^* - \eta$ 代表了 x 所在范围的上、下限。 η 越小,表示该近似值 x^* 的精度越高。

例如,用有毫米刻度的尺寸测量不超过一米的长度 l 。读数方法如下:如果长度 l 接近于毫米刻度 l^* ,就读出那个刻度数 l^* 作为长度 l 的近似值。显然,这个近似值的绝对误

差限就是半个毫米,则有

$$|e(l)| = |l - l^*| \leq \frac{1}{2} \text{ 毫米}$$

如果读出的长度是 513 毫米,则有

$$|l - 513| \leq 0.5 \text{ 毫米}$$

这样,我们虽仍不知准确长度 l 是多少, 但由(3.3)可得到不等式

$$512.5 \leq l \leq 513.5 \quad (\text{毫米})$$

这说明 l 必在 $[512.5, 513.5]$ 毫米区间内。

再例如,真空中光速 c 的最好近似值为

$$c^* = 2.997902 \times 10^{10} \text{ 厘米/秒}$$

又其绝对误差限为

$$\eta = 0.000009 \times 10^{10} \text{ 厘米/秒}$$

则通常把 c 写成

$$c = (2.997902 \pm 0.000009) \times 10^{10} \text{ 厘米/秒}$$

它表示了光速 c 的准确值所在的范围。

3.2 相对误差和相对误差限

用绝对误差还不能完全评价近似值的精确度,例如测量 10 米的长度时产生的 1 厘米的误差与测量 1 米的长度时产生的 1 厘米的误差是大有区别的。虽然两者的绝对误差相同,都是 1 厘米,但是由于所测量的长度要差十倍,显然前一种测量比后一种要精确得多。这说明要评价一个近似值的精确度,除了要看其绝对误差的大小外,还必须考虑该量本身的大小,这就需要引进相对误差的概念。

绝对误差与真值之比,即

$$\varepsilon_r(x) = \frac{e(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x} \quad (3.4)$$