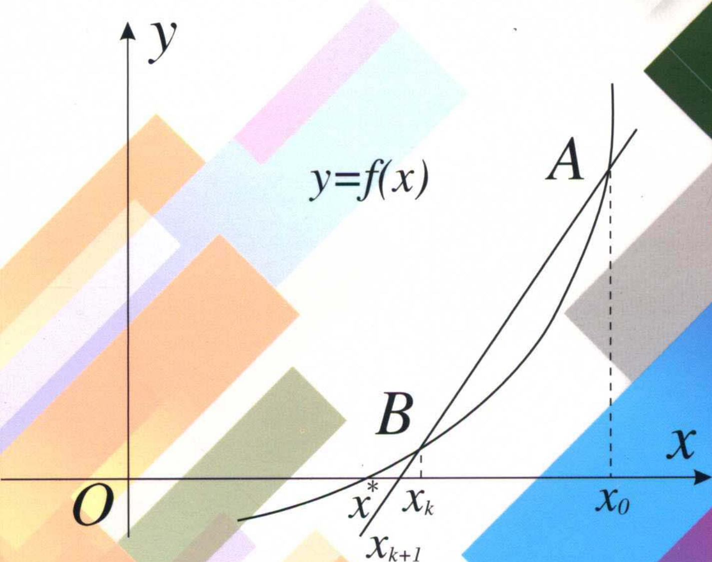
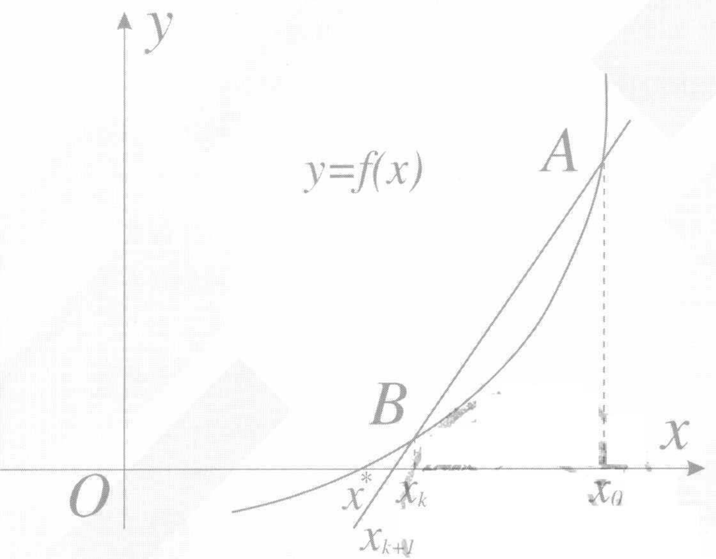


21世纪本科生教材

计算方法（第二版）

主编　贺俐

WUHAN UNIVERSITY PRESS
武汉大学出版社



21世纪本科生教材

计算方法（第二版）

■ 主编 贺俐

WUHAN UNIVERSITY PRESS
武汉大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/贺俐主编.—2版.—武汉：武汉大学出版社，2018.9.
21世纪本科生教材
ISBN 978-7-307-15698-2

Ⅰ.计…　Ⅱ.贺…　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(2015)第093561号

责任编辑:谢文涛　　责任校对:汪欣怡　　版式设计:马　佳

出版发行：**武汉大学出版社**　(430072　武昌　珞珈山)
(电子邮件：cbs22@whu.edu.cn　网址：www.wdp.com.cn)
印刷:武汉中科兴业印务有限公司
开本:720×1000　1/16　印张:12.75　字数:229千字　插页:1
版次:1998年8月第1版　　2018年9月第2版
2018年9月第2版第1次印刷
ISBN 978-7-307-15698-2　　定价:28.00元

第二版前言

随着电子计算机应用的日益普及，科学计算的重要性已被愈来愈多的人所认识。特别是理工科大学的学生，应当具备这方面的知识和能力，因此计算方法在许多工科院校已被列为大学生的必修课。

本书是在武汉大学（原武汉水利电力大学）原有《数值计算方法》讲义及教材的基础上，根据理工科教学《计算方法课程教学基本要求》和总结多年该课程教学实践经验后重新编写成的。

计算科学与技术的发展，对这门课程的教学提出了新的要求，为更好地适应计算方法课程的教学，根据我国大学计算方法教材的变化，本书编者对《计算方法》（第一版）进行了修改：

(1)对一些章节的标题重新作了编排及进一步的规范。

(2)对文中的图、表及阐述过程中的不完整部分及错误进行了补充和认真地修正。

(3)在内容安排上增加了数值微分，对不常用的算法进行了删减，使本教材更具有实用性。

(4)补充了部分章节的一些例题及习题。

(5)由于第一版中的第 8 章内容已老化，故将其删除，改为将一些常用经典算法的 MATLAB 程序与算例附在各章后面，供读者使用，从而达到培养学生具有科学计算的能力。并在介绍常用计算方法的同时，尽可能地阐述算法的误差、稳定性及所研究问题的性态等理论。

MATLAB 在科学计算中应用非常广泛，它可以像 Basic、C、Fortran 等计算高级语言一样进行程序设计、编写 M 文件。通常 MATLAB 也称为第四代编程语言，成为最受用户喜爱的数学软件之一。目前有大量的 MATLAB 书籍出版，因此关于 MATLAB 的简介部分不在此给出，读者可以参阅任何关于 MAT-

LAB 操作的书籍。

本书共分七章，即误差理论、插值法与曲线拟合、数值积分与数值微分、线性方程组的直接解法、线性方程组的迭代解法、非线性方程的数值解法以及常微分方程初值问题的数值解法。本书在选材方面突出基本概念、基本方法和基本理论，体现“重概念、重方法、重应用、重能力培养”的精神。在文字叙述方面力求做到由浅入深，通俗易懂，易于教学。每章都配有较多例题和习题并附有小结，以便自学，书末给出每章所有习题的参考答案。书内打“ * ”号的内容可以根据专业及学时进行取舍。本书在内容上着重介绍计算机中基本的、有效的各类数值问题的计算方法。读者只要具备本科高等数学（微积分）及线性代数的知识，就可以学习该书的内容。

感谢参加第一版编写的程桂兴教授、石岗教授及主审的高西玲教授。感谢使用原《数值计算方法》教材的老师们提供的建设性的建议。感谢武汉大学出版社的大力支持和帮助。由于编者水平有限，缺点和错误在所难免，恳请读者批评指正。

本书是为大学理工科专业及工科院校大学生开设“计算方法”课程编写的，也可作为要求较高的独立院校、成教学院、民办大学等本科院校的教材，还可用于业余科技学院及工程人员自学与进修使用。

编　者

2018 年 4 月

序 言

使用计算工具(如电子计算机等)求解数学问题数值解的全过程,称为数值计算。

随着科学技术的不断发展,数值计算越来越显示出其重要作用。从家用电器到航天技术都有大量复杂的数值问题亟待解决,计算这些复杂的数值问题已不可能由手工计算来完成,计算机技术的飞速发展极大地促进了数值计算方法的改进,很多复杂的数值问题现状都可以通过计算机的计算得到解决。

计算机成为数值计算的主要工具以来,计算方法这门学科成为科学计算中的重要一环。计算方法这门学科的主要内容是什么?它具有哪些特点?以及数值计算得到的解是近似值,必然会产生各种误差。如何控制和减少这些误差造成的危害,成为我们学习计算方法所要关心的问题。因此,首先要明确计算方法在科学计算中所处的地位。

现代科技领域中的三个重要方法是科学实验、科学计算及理论研究。由于计算机在科研与工程实际中越来越显示出它的优越性,如在计算机上修改一个设计方案比起在实地作修改要容易得多。因此,人们往往就用科学计算来取代某些实验。何况有些科研题目根本无法通过实验来进行,只能通过科学计算来解决。这种由实验向计算的巨大转变,也促进了一些边缘学科的相继出现,例如计算物理、计算化学、计算力学、计算生物学以及计算经济学等学科应运而生。

既然科学计算如此重要,那么计算方法又在其中处于什么地位呢?我们用框图来表明电子计算机解决实际问题,大体上要经历如下过程:

实际问题 ⟶ 建立数学模型 ⟶ 选定计算方法 ⟶

编写程序 ⟶ 上机计算出结果 ⟶ 分析结果

由此可见,计算方法处于一种承上启下的位置,它在整个计算中是重要的不可缺少的一环。

计算方法以数学问题为研究对象,但它不是研究数学本身的理论,而是着重研究求解数学问题的计算方法及其相关理论,包括误差分析、收敛性和稳定性等内容,它的任务是面向计算机,提供计算机上实际可行,达到精度要求,理论分析可靠,计算复杂性好的各种数值方法。

根据“计算方法”的特点,学习本课程时,我们应首先注意掌握计算方法的基本原理和思想,注意方法处理的技巧及其与计算机的密切结合,重视误差分析、收敛性及稳定性的基本理论。其次还要注意方法的使用条件,通过各种方法的比较,了解各种方法的异同及优缺点。同时,通过一定数量的计算练习,培养和提高我们使用各种数值计算方法解决实际计算问题的能力。

目　录

第1章 误差理论

由于计算机是数值计算的主要工具，所以计算方法的主要内容是研究适合于计算机上使用的数值计算方法的构造及与此相关的理论分析，并包括讨论方法的收敛性、稳定性以及误差分析。

1.1 误差的来源与分类

在生产实践和科学研究中，我们在解决问题时往往是将连续变量离散化，然后用离散点上的近似值代替其精确值，这样就要求讨论这两个数值的差别。另外，由于在每一步计算时对于数都很难作出精确的运算，而在进行这种大量的运算之后，会给问题的精确解带来一定的差别，这些差别在数学上称为误差。必须注重这些误差的分析，其中包括对误差的来源和对误差传递造成危害的分析，以及对计算结果给出合理的误差估计。

误差的来源是多方面的，但主要有如下几个方面。

1. 模型误差

用计算机解决实际问题时，由于实际问题往往很复杂，因而首先对实际问题要进行抽象，忽略一些次要因素，简化条件，从而建立数学模型。实际问题与数学模型之间必然存在误差，这种误差就称作**模型误差**。

2. 观测误差

在数学模型中通常包括一些由观测或实验得来的数据，由于测量工具精度和测量手段的限制，得到的数据与实际大小必然有误差，这种误差称为**观测误差**。

3. 截断误差

由实际问题建立起来的数学模型，在很多情况下要得到精确解是困难的，通常要用数值方法求它的近似解，例如常把无限的计算过程用有限的计算过程代替。这种模型的准确解和由数值方法求出的近似解之间的误差称为**截断误差**，因为截断误差是数值计算方法固有的，又称为**方法误差**。如用

$$P(x)=x-\frac{1}{3!}x^3$$

近似代替函数

$$f(x)=\sin x$$

作近似计算时，截断误差 $R(x)$ 为

$$R(x)=f(x)-P(x)=\frac{\cos\xi}{5!}x^5,\quad \xi\text{ 在 } 0 \text{ 与 } x \text{ 之间。}$$

4. 舍入误差

由于计算工具(如电子计算机等)字长所限制，参加计算的数只能保留有限位小数参加运算，有限位小数以后的尾数部分作四舍五入处理。这种由四舍五入所产生的误差就是**舍入误差**。如用 3.1416 作为 π 的近似值产生的误差就是舍入误差。这里要请读者注意的是，少量运算的舍入误差一般是微不足道的，但是，在计算机上完成千百万次运算之后舍入误差的积累就可能是很惊人的、是不可忽视的。

上述几种误差，都会影响计算结果的准确性，因而了解和研究这些误差对数值计算是有帮助的。但是，研究前两种误差(模型误差、观察误差)对计算结果的影响，往往不是计算工作者所能独立完成的。所以，我们一般只研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响。这两种误差在数值计算中产生什么样的影响？这是学习本课程时所需重视的问题，下面先介绍几个概念。

1.2　绝对误差与相对误差

通常用绝对误差、相对误差或有效数字来说明一个近似值的精确度。

1.2.1　绝对误差与绝对误差限

定义 1.1　设某量的准确值为 x^*，x 为 x^* 的近似值，则称

$$\Delta x=x^*-x \tag{1-1}$$

为近似值 x 的**绝对误差**，简称**误差**。

例如 e 取 2.718，其绝对误差为

$$\Delta x=\mathrm{e}-2.718=0.0002818\cdots$$

$|\Delta x|$ 的大小显示出近似值 x 的准确程度，在同一量的不同近似值中，$|\Delta x|$ 越小，x 的准确度越高。

由此定义的绝对误差 Δx 可正可负，不要认为绝对误差是误差的绝对值。

通常在实际中无法得到准确值 x^*，从而也不能算出绝对误差 Δx 的准确值。但是，可以根据问题的实际背景或计算的情况给出 Δx 的估计范围，即给出一个正数 ε，使得

$$|\Delta x| = |x^* - x| \leqslant \varepsilon \tag{1-2}$$

成立，ε 通常叫做近似值 x **的绝对误差限**，简称**误差限**，或称“**精度**”。有了误差限 ε，就可以知道准确值 x^* 的范围。

$$x - \varepsilon \leqslant x^* \leqslant x + \varepsilon \tag{1-3}$$

这范围有时也表示为

$$x^* = x \pm \varepsilon \tag{1-4}$$

如用皮尺测量某一构件长度，结果 x 总是在 1.01m 和 0.99m 之间取值，由(1-4)式知，这时

$$x^* = x \pm 0.01$$

用绝对误差来刻画一个近似值的准确程度是有局限性的。如测量 100m 和 1m 两个长度，若它们的绝对误差都是 1cm，显然前者的测量结果比后者的准确。由此可见，决定一个量的近似值的准确程度，除了要考虑绝对误差的大小外，还需要考虑该量本身的大小，为此引入相对误差的概念。

1.2.2 相对误差与相对误差限

定义 1.2 设 x^* 为准确值，x 是 x^* 的一个近似值，则称

$$e_x = \frac{\Delta x}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$$

为近似值 x 的**相对误差**。

从定义 1.2 看出，上面所述前者 100m 测量的相对误差为 1/10000，而后者 1m 测量的相对误差为 1/100，可见后者测量的相对误差是前者测量的相对误差的 100 倍。一般地说，在同一个量或不同量的几个近似值中，$|e_x|$ 小者为精度高者。由此可见，相对误差比绝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更为重要。由于 Δx 与 x^* 都不能准确地求得，那么相对误差 e_x 也不能准确地求出，但也像绝对误差那样可以估计出它的大小范围。即给定一个正数 δ，使

$$|e_x| = \left|\frac{x^* - x}{x^*}\right| \leqslant \delta \tag{1-5}$$

称 δ 为近似值 x 的**相对误差限**。在实际中，由于准确值 x^* 总是无法得到，因此往往取

$$e_x=\frac{\Delta x}{x}=\frac{x^*-x}{x} \tag{1-6}$$

则称 e_x 为 x 的**相对误差**，同样

$$|e_x|=\left|\frac{x^*-x}{x}\right|\leqslant\delta \tag{1-7}$$

则称 δ 为 x 的**相对误差限**。

注意：绝对误差和绝对误差限是有量纲的量，而相对误差和相对误差限是没有量纲的量，通常用百分数表示。

例 1.1　设 $a=-2.18$ 和 $b=2.1200$ 分别是由准确值 a^* 和 b^* 经过四舍五入而得到的近似值，问 $|\Delta a|$，$|\Delta b|$，$|e_x(a)|$，$|e_x(b)|$ 各是多少？

解　凡是由准确值经过四舍五入而得到的近似值，其绝对误差限不超过该近似值末位的半个单位。于是

$|\Delta a|=|a^*-a|=0.005$，$|\Delta b|=|b^*-b|=0.00005$

由(1-7)式得

$|e_x(a)|=\left|\frac{0.005}{-2.18}\right|\approx 0.23\%$，$|e_x(b)|=\left|\frac{0.00005}{2.1200}\right|\approx 0.0024\%$

1.3　有效数字与误差的关系

1.3.1　有效数字

用 $x\pm\varepsilon$ 表示一个近似值时，可以反映出它的准确程度，但计算时很不方便。为了使所表示的数本身能显示出它的准确程度，需要引进有效数字的概念。

例如当准确数 x^* 的位数很多时，可用四舍五入的办法来减少位数得到它的近似数。$\pi=3.1415926\cdots$若按四舍五入原则分别取四位和五位小数时，则得

$$\pi\approx 3.1416,\quad \pi\approx 3.14159$$

其绝对误差限不超过末位数的半个单位，即

$$|\pi-3.1416|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-4},\quad |\pi-3.14159|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-5}$$

若近似值 x 的误差限是其某一位上的半个单位时，就称其“精确”到这一位，且从该位起直到左起第一位非零数字为止的所有数字都称为 x 的**有效数字**。如图 1-1 所示。

$$x=\overbrace{x_1x_2x_3\cdots x_{n-1}x_n}^{n\text{位}}$$

误差不超过该位的半个单位.

自左向右看，第一个非零数.

图 1-1　有效位数

将四舍五入原则抽象为数学语言,有效数字可以如下定义:

定义 1.3　设 x 为 x^* 的近似数,将 x 写成

$$x=\pm(x_1\cdot 10^{-1}+x_2\cdot 10^{-2}+\cdots+x_n\cdot 10^{-n})\cdot 10^m \tag{1-8}$$

式中:x_1 是 1 到 9 中的一个数,$x_2,x_3,\cdots,x_n$ 是 0 到 9 中的一个数;m 是整数,且 x 的绝对误差限满足不等式

$$|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{m-n} \tag{1-9}$$

时,则称近似数 x 具有 n 位**有效数字**。或称 x 精确到 10^{m-n} 位,其中 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 都是 x 的有效数字。

例如 e 的近似值 2.718 写成(1-8)式的形式是

$$2.718=(2\times10^{-1}+7\times10^{-2}+1\times10^{-3}+8\times10^{-4})\times10^1$$

可见,$n=4,m=1$,由有效数字的定义知 2.718 具有 4 位有效数字,其绝对误差限为

$$|\mathrm{e}-2.718|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n}=\frac{1}{2}\times10^{-3}$$

例 1.2　按四舍五入原则写出下列各数具有五位有效数字的近似值

187.9325,　0.03785551,　8.000033,　2.7182818,　0.0002816651

解　对每一个数,从左到右第一个非零数字算起取五位数,第六位即按四舍五入原则或舍去或进位,便可得到具有五位有效数字的近似值,它们分别是

187.93,　0.037856,　8.0000,　2.7183,　0.00028167

注意:8.000033 具有五位有效数字的近似值应为 8.0000,而不是 8,因为 8 只有一位有效数字。可见,小数点后面的零,不能任意去掉,以免损失精度。

例 1.3　指出下列各数具有几位有效数字及其绝对误差限。

$$a=2.0004,\quad b=-0.00200,\quad c=9000$$

解　将 $a=2.0004$ 写成(1-8)式的形式

$$a=(2\times10^{-1}+0\times10^{-2}+0\times10^{-3}+0\times10^{-4}+4\times10^{-5})\times10^1$$

可见 $m=1,n=5$,故 2.0004 具有 5 位有效数字,其绝对误差限为

$$|\Delta a|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n}=\frac{1}{2}\times10^{-4}$$

也可以用图 1-1 的方法得出，a 有 5 位有效数字。

同样可得

$b=-0.00200$ 具有 3 位有效数字，其绝对误差限是 $|\Delta b|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-5}$

$c=9\ 000$ 具有 4 位有效数字，其绝对误差限是 $|\Delta c|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{0}$

例如用 3.14 与 3.1416 分别近似 π，将 3.14 与 3.1416 写成(1-8)式的形式。

$$3.14=(3\times10^{-1}+1\times10^{-2}+4\times10^{-3})\times10^{1}$$

可见 $m_1=1, n_1=3$，故 3.14 具有 3 位有效数字。

$$3.1416=(3\times10^{-1}+1\times10^{-2}+4\times10^{-3}+1\times10^{-4}+6\times10^{-5})\times10^{1}$$

可见 $m_2=1$，　$n_2=5$，故 3.1416 具有 5 位有效数字。

它们的绝对误差限分别是

$$|\pi-3.14|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{1-3}=\frac{1}{2}\times10^{-2}$$

$$|\pi-3.1416|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{1-5}=\frac{1}{2}\times10^{-4}$$

可见 3.1416 比 3.14 的绝对误差限小。在 m 相同的情况下，3.1416 比 3.14 的有效数字位数多($n_2>n_1$)，所以 3.1416 比 3.14 近似 π 的精度要高。因此，可以断言，在 m 相同的情况下，n 越大，则 10^{m-n} 越小，故有效数字的位数就越多，绝对误差限就越小。

另一方面，也用相对误差来衡量各数间的准确程度，有效数字位数越多的数，其相对误差越小，准确度越高。因此在进行数值计算时，应尽量避免参加运算的数的有效数字的损失，以免影响计算精度，同时准确值的有效数字可看作有无限多位。

1.3.2　有效数字与绝对误差和相对误差的关系

对于准确值 x^* 的一个近似值 x 而言，有效数字越多，它的绝对误差和相对误差就越小，而且知道了有效数字位数，由(1-9)式就可写出近似值 x 的绝对误差限。对于有效数字与相对误差限的关系，有下面定理。

定理 1-1　若用(1-8)式表示的近似值 x 具有 n 位有效数字，则其相对误差限为 $\frac{1}{2x_1}\times10^{-n+1}$，即

$$|e_x|\leqslant\frac{1}{2x_1}\times10^{-n+1} \tag{1-10}$$