

高等学校规划教材 · 数学

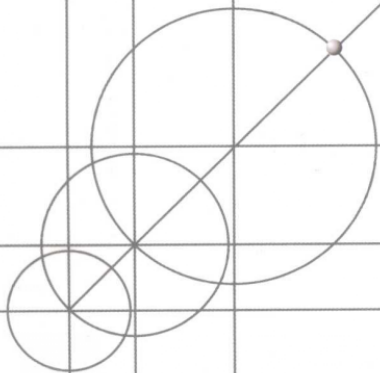
PROGRAMMING TEXTBOOKS FOR HIGHER EDUCATION



(第2版)

计算方法

李信真 车刚明 欧阳洁 封建湖 编

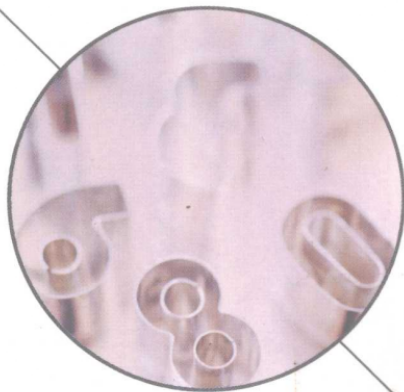


西北工业大学出版社

高等学校规划教材 · 数学

PROGRAMMING TEXTBOOKS FOR HIGHER EDUCATION

- 封面设计 / 扬帆
- 责任编辑 / 张友
- 策划编辑 / 何格夫



2B

ISBN 978-7-5612-2743-5



9 787561 227435 >

定价: 18.00元

高等学校规划教材·数学
基础课程系列

计算方法

(第2版)

西北工业大学出版社

【内容简介】 本书共分九章,内容包括误差知识,方程的近似解法,线性代数方程组的解法,矩阵的特征值与特征向量的计算方法,插值法与曲线拟合,数值积分与数值微分,常微分方程初值问题的数值解法,偏微分方程的差分解法.每章末配有适量习题,书末附有习题答案.

本书可作为高等工科院校教材,也可供有关方面工程技术人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/李信真等编. —2版. —西安:西北工业大学出版社,2010.1

ISBN 978-7-5612-2743-5

I. ①计… II. ①李… III. ①计算方法 IV. ①O241

中国版本图书馆CIP数据核字(2010)第023333号

出版发行:西北工业大学出版社

通信地址:西安市友谊西路127号 邮编:710072

电 话:(029)88493844

网 址:www.nwpup.com

印刷者:西安新华印刷厂

开 本:850 mm×1 168 mm 1/32

印 张:8.375

字 数:208千字

版 次:2010年1月第2版 2010年1月第13次印刷

定 价:18.00元

第 2 版前言

本教材自 2000 年出版以来,已经印刷了 12 次,得到了广大同仁和读者的支持和肯定,且被上海交通大学、中国石油大学、河南理工大学等院校选为博士生、硕士生入学考试的参考书目。

本次再版依然保持原书的特色,仅对个别章节作了修改,且增加了适量的例题和习题,以供读者参考。若书中有不妥之处,敬请读者不吝指正。

编 者

2010 年 1 月于西北工业大学

第 1 版前言

本书介绍了计算机上常用的数值计算方法,阐明了算法的基本思想和原理,讨论了算法的收敛性和稳定性。我们编写这本书时,采用由具体到一般,由直观到抽象,由浅入深的方法;力求做到概念准确,推理严谨,条理分明,通俗易懂,便于教学和阅读。

讲授本教材约需 50 学时。书中各章内容有一定的独立性,以便于根据不同的教学要求进行取舍。

本书第一、八章由封建湖编写,第二、六、九章由李信真编写,第三、四章由车刚明编写,第五、七章由欧阳洁编写。全书由李信真负责统稿。

在本书编写过程中,西北工业大学应用数学系的领导和同事给予了极大的关心和帮助,西北工业大学出版社给予了大力的支持。刘启海教授仔细审阅了书稿并提出了许多宝贵的意见。在此一并表示诚挚的感谢。

由于水平所限,书中难免有缺陷和疏漏,敬请广大读者批评指正。

编 者

2000 年 2 月于西北工业大学

目 录

第一章 绪论	1
1.1 计算方法的任务与特点	1
1.2 误差知识	2
一、误差的来源与分类	2
二、绝对误差、相对误差、有效数字	3
三、数值运算的误差估计	7
1.3 选用算法时应遵循的原则	8
习题一	12
第二章 方程的近似解法	14
2.1 二分法	16
2.2 迭代法	19
一、迭代法	19
二、迭代-加速公式	29
2.3 牛顿(Newton)迭代法	32
一、牛顿迭代法	32
二、迭代法的收敛阶	38
2.4 弦截法	39
一、单点弦截法	39
二、双点弦截法	42
习题二	44

第三章 线性代数方程组的解法	46
3.1 解线性方程组的直接法	46
一、高斯(Gauss)消去法	47
二、列主元素消去法	49
三、总体选主元素消去法	51
四、选主元素消去法的应用	53
五、矩阵三角分解法	54
六、解三对角方程组的追赶法	61
3.2 解线性方程组的迭代法	63
一、简单迭代法	63
二、赛德尔(Seidel)迭代法	70
三、逐次超松弛迭代法(SOR方法)	77
习题三	79
第四章 矩阵特征值和特征向量的计算	83
4.1 乘幂法与反幂法	83
一、乘幂法	83
二、反幂法	88
4.2 雅可比(Jacobi)方法	89
一、古典雅可比方法	90
二、雅可比过关法	94
习题四	95
第五章 插值法	97
5.1 拉格朗日(Lagrange)插值	99
一、插值基函数	100
二、拉格朗日插值多项式	101

三、拉格朗日插值多项式的余项	103
5.2 牛顿插值	106
一、差商的定义及性质	106
二、牛顿插值多项式及其余项	107
5.3 等距节点插值	112
一、差分的定义及性质	112
二、等距节点插值多项式及其余项	114
5.4 埃尔米特(Hermite)插值	116
一、一般情形的埃尔米特插值问题	116
二、特殊情形的埃尔米特插值问题	119
5.5 三次样条插值	121
一、分段插值法	121
二、三次样条插值	122
习题五	132
第六章 最小二乘法与曲线拟合	135
6.1 用最小二乘法求解矛盾方程组	135
6.2 多项式拟合	141
习题六	148
第七章 数值积分与数值微分	150
7.1 牛顿-柯特斯(Newton - Cotes)求积公式	150
一、牛顿-柯特斯求积公式	151
二、求积公式的代数精确度	154
三、求积公式的截断误差	155
四、牛顿-柯特斯公式的稳定性	157
五、待定系数法	158
7.2 复化求积公式	160

一、常用的复化梯形、复化辛浦生(Simpson)、复化柯特斯求积公式	160
二、常用的复化求积公式的截断误差	162
三、区间逐次分半求积法	164
7.3 龙贝格(Romberg)求积算法	167
7.4 高斯型求积公式	170
一、高斯型求积公式	170
二、勒让德(Legendre)多项式	172
三、高斯-勒让德求积公式	172
四、高斯型求积公式的截断误差	176
7.5 数值微分	177
习题七	180
第八章 常微分方程初值问题的数值解法	183
8.1 欧拉(Euler)法与梯形法	184
一、欧拉法	184
二、梯形法	186
三、欧拉预估-校正公式	186
四、数值方法的误差估计、收敛性和稳定性	188
8.2 泰勒(Taylor)展开法与龙格-库塔(Runge - Kutta)方法	195
一、泰勒展开法	195
二、龙格-库塔方法	197
8.3 线性多步法	204
一、用数值积分法构造线性多步法	204
二、用泰勒展开法构造线性多步公式	207
三、出发值的计算	209
* 8.4 一阶微分方程组的数值解法	211

一、欧拉公式	211
二、标准四阶龙格-库塔公式	211
三、四阶阿达姆斯(Adams)外推公式	212
习题八	213
第九章 偏微分方程的差分解法	216
9.1 抛物型方程的差分解法	217
一、古典差分格式的建立	219
二、差分格式的稳定性及收敛性	226
9.2 双曲型方程的差分解法	230
一、差分格式的建立	231
二、差分格式的稳定性及收敛性	236
9.3 椭圆型方程的差分解法	238
一、差分格式的建立	239
二、边界条件的处理	241
三、差分方程解的收敛性	245
习题九	246
习题答案	247
参考文献	256

第一章 绪 论

1.1 计算方法的任务与特点

电子数字计算机的高速发展,为用数值计算方法解决科学技术中的各种数学问题提供了有力的条件,因此,学习计算方法并用它解决实际问题已成为广大科技人员和工程技术人员的需要.在理工科高等院校,很多专业已将计算方法课程作为必修课程.

计算方法(也称数值计算方法,数值方法)的研究对象是从科学与工程问题中归纳出来的数学问题,它是研究用计算工具(现代主要指电子数字计算机,简称计算机)得出数学问题数值解答的方法与算法的学问.由于计算机只能完成加、减、乘、除等算术运算和一些逻辑运算,因此,要用计算机求解各种数学问题,就必须把所求解的数学问题转化为按一定规则进行的一系列四则算术运算.计算机只能机械地执行人们所给定的指令,交给计算机执行的解题方法的每一步,都必须加以准确地规定.我们把对数学问题的解法归结为只有加、减、乘、除等基本运算,并有确定运算次序的完整而准确的描述,称为数值算法或简称算法.但也不能把计算方法课程简单地理解为各种数值算法的简单罗列和堆积.同数学分析一样,它也是一门内容丰富、研究方法深刻、有自身理论体系的课程,既有纯数学的高度抽象性与严密科学性的特点,又有应用的广泛性和实际试验的高度技术性的特点,是一门与计算机使用紧密结合的实用性很强的数学课程.

计算方法所处理的问题都是科学与工程计算中最基本的内

容,具有广泛的物理背景与适用性.

1.2 误差知识

一、误差的来源与分类

在科学与工程计算中,估计计算结果的精确度是十分重要的工作,而影响精确度的因素是各种各样的误差.按照它们的来源,误差可以分为以下4种.

1. 模型误差

反映实际问题有关量之间的计算公式,即数学模型,通常只是近似的.数学模型与实际问题之间的误差称为模型误差或描述误差.

2. 观测误差

数学模型中包含的某些参数,往往是通过观测而得来的.由观测得到的数据与实际数据之间的误差,称为观测误差.

3. 截断误差

在数值求解某个数学问题时,常常用有限过程逼近无限过程,用能计算的问题代替不能计算的问题,这种代替引起的误差称为截断误差或方法误差.例如 $e^{\frac{1}{2}} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2!} \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{1}{2}\right)^3 + \dots + \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2}\right)^n + \dots$, 用有限项 $1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2!} \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \dots + \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2}\right)^n$ 近似代替 $e^{\frac{1}{2}}$ 时,截去的 $\frac{1}{(n+1)!} \left(\frac{1}{2}\right)^{n+1} + \dots$ 就是截断误差.

4. 舍入误差

由于计算机的字长有限,参加运算的数据以及运算结果在计算机上存放会产生误差,这种误差称为舍入误差或计算误差.如

在 10 位十进制数的限制下,会出现

$$1 \div 3 = 0.333\ 333\ 333\ 3$$

$$(1.000\ 002)^2 - 1.000\ 004 = 0$$

这两个结果都不是准确的,后者的准确结果应为 4×10^{-12} . 这里所产生的误差就是舍入误差.

观测误差和原始数据的来源虽然不同,但二者对计算结果的影响是一样的. 至于模型误差和观测误差,往往不是计算工作者能独立解决的,因此,本书主要研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响.

二、绝对误差、相对误差、有效数字

设某一量的准确值为 x , 近似值为 x^* , 定义

$$e(x^*) = x - x^* \quad (1.1)$$

为近似值 x^* 的绝对误差.

通常准确值是不知道的,所以误差 $e(x^*)$ 的准确值也不可能求出. 但根据测量工具或计算情况,可以估计出误差的绝对值不超过某个正数 ϵ , 即

$$|e(x^*)| = |x - x^*| \leq \epsilon \quad (1.2)$$

称正数 ϵ 为近似数 x^* 的绝对误差限,简称误差限或精度. ϵ 越小,表示近似数 x^* 的精度越高. 显然有

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

有时也用

$$x = x^* \pm \epsilon \quad (1.3)$$

来表示近似值 x^* 的精度或准确值 x 所在的范围.

例如测得某一物体长为 5 m, 其误差限为 0.01 m, 通常将准确长度记为

$$s = 5 \pm 0.01$$

即准确长度在 5 m 左右,但不超过 0.01 m 的误差限. 由这个例子

可以看出,绝对误差是有量纲的.

绝对误差并不足以表示近似值的好坏. 例如, 设

$$x_1 = 100 \pm 1$$

$$x_2 = 1\,000 \pm 1$$

近似值 $x_1^* = 100$ 的绝对误差限与 $x_2^* = 1\,000$ 的绝对误差限相同. 不过在 100 之内差 1 和 1 000 之内差 1 比较, 后者比前者精确. 可见决定一个量的近似值的精确度除了要看绝对误差的大小之外, 还必须考虑到该量本身的大小. 这就有必要引入相对误差的概念.

$$e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*} \quad (1.4)$$

为 x^* 的相对误差.

显然, 上例中 x_2^* 的相对误差为 $1/1\,000$, 而 x_1^* 的相对误差为 $1/100$.

类似于绝对误差的情况, 如果存在正数 ϵ_r , 使得

$$|e_r(x^*)| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \epsilon_r \quad (1.5)$$

则把 ϵ_r 称为 x^* 的相对误差限, 或简称相对误差. 可以看出, 相对误差是没有量纲的.

为了能给出一种数的表示法, 使之既能表示其大小, 又能表示其精确程度, 下面引进有效数字的概念. 在实际计算中, 常按四舍五入的原则得到数 x^* 的前几位近似值, 例如设

$$x = \pi = 3.141\,592\,653\,5\dots$$

按四舍五入法, 若取 3 位, 得

$$x^* = 3.14, \quad \epsilon = 0.002 < 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

若取 5 位, 得

$$x^* = 3.141\,6, \quad \epsilon = 0.000\,008 < 0.000\,05 = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

它们的绝对误差限都不超过末位数的半个单位, 即

$$|\pi - 3.14| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

$$|\pi - 3.1416| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

若近似数 x^* 的绝对误差限是某一位的半个单位,从该位到 x^* 的左边第一位非零数字共有几位,就说 x^* 有几位有效数字,或说 x^* 准确到该位. 如上述 $\pi^* = 3.14$ 作为 π 的近似值, π^* 就有 3 位有效数字,而当 $\pi^* = 3.1416$ 时, π^* 具有 5 位有效数字. 一般来说,若 x^* 有 n 位有效数字,则写成标准形式为

$$x^* = \pm 10^m (a_1 \times 10^{-1} + a_2 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n}) \quad (1.6)$$

其中 a_1 是 1 到 9 中的一个数字, a_2, a_3, \dots, a_n 均为 0 到 9 中的一个数字, m 为整数, n 为正整数,且

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \quad (1.7)$$

如果一个近似数的每一位都是有效数字,则称该近似数为有效数.

注意,在有效数字的记法中, 0.156×10^{-3} 和 0.1560×10^{-3} 是有区别的,前者只有 3 位有效数字,而后者有 4 位有效数字. 同样,如果只知道 $x^* = 300\,000$ 的绝对误差限不超过 $500 = \frac{1}{2} \times 10^3$,则应把它写成 300×10^3 或 3.00×10^5 . 如果仍记为 $300\,000$,则表示它的误差限不超过 0.5. 这是因为

$$|x - 300 \times 10^3| = |x - 3.00 \times 10^5| \leq 500 = \frac{1}{2} \times 10^{6-3}$$

即 $m = 6, n = 3$, 而

$$300\,000 = 10^6 \times (3 \times 10^{-1} + 0 \times 10^{-2} + \cdots + 0 \times 10^{-6})$$

且 $|x - 300\,000| \leq \frac{1}{2} \times 10^{6-6}$

即 $m = 6, n = 6$, 所以前者有 3 位有效数字,后者有 6 位有效数字.

需要指出的是,一个准确数字的有效位数,应当说有无穷多位. 例如 $1/4 = 0.25$ 不能说只有两位有效数字.

根据有效数字的概念可以推知,当 m 一定时,有效数字位数越多,其绝对误差越小. 关于有效数字与相对误差的关系,有如下结论.

定理 1.1 用式(1.6)表示的近似数 x^* , 如果它具有 n 位有效数字, 则其相对误差限为

$$|e_r(x^*)| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} \quad (1.8)$$

反之,若 x^* 的相对误差限满足

$$|e_r(x^*)| \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)} \quad (1.9)$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

事实上,由式(1.6)知

$$a_1 \times 10^{m-1} \leq |x^*| \leq (a_1 + 1) \times 10^{m-1}$$

所以

$$|e_r(x^*)| = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{a_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

反之,由

$$|x - x^*| = |x^*| \times |e_r(x^*)| \leq (a_1 + 1) \times 10^{m-1} \times \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

知, x^* 具有 n 位有效数字.

该定理表明,有效数字的位数越多,相对误差越小.

例 1.1 为使 $\sqrt{20}$ 的近似值的相对误差小于 1%, 问至少应取几位有效数字?

解 $\sqrt{20}$ 的近似值的首位非零数字是 $a_1 = 4$, 由式(1.8)有

$$|e_r(x^*)| \leq \frac{1}{2 \times 4} \times 10^{-(n-1)} < 1\%$$