deng yuan xiao jiao cai

JI SUAN FANG FA

计算方法

算方法

计 算 方 法

蔡锁章 编

北京理工大学出版社

（京）新登字 149 号

内 容 简 介

本书在高等工科院校的高等数学和线性代数知识的基础上介绍计算方法基本概念、方法和理论，着重介绍工程计算中的常用算法，包括方程的近似解法、线性方程组解法、特征值和特征向量的求法、插值法和曲线拟合、数值微分和数值积分、常微分方程数值解法等。各章配有适量习题，并附有习题答案。

本书可作为高等工科院校计算方法的教材，也可供工程技术人员自学参考。

计 算 方 法

蔡锁章编

*

北京理工大学出版社出版

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

清华大学印刷厂印刷

*

787×1092 毫米 32 开本 8.5 印张 188 千字

1987 年 12 月第一版 1992 年 4 月第三次印刷

ISBN 7-81013-359-4/O·70

印数：13501—20500 册 定价：3.40 元

前　　言

随着电子技术的发展和科学研究、生产实践的需要，电子计算机的使用日益广泛。作为电子计算机应用的一个重要方面——科学计算技术也日新月异地迅速发展。科学计算技术是以电子计算机为工具，以计算方法为理论依据的一门技术。这本书就是为高等工科院校开设计算方法课程而编写的。

学习本书需具备高等工科院校开设的高等数学、线性代数和算法语言的知识。

本书将介绍计算方法的基本概念、方法和理论，着重介绍工程计算中的常用算法，包括方程的近似解法、线性方程组数值解法、特征值和特征向量求法、插值法和曲线拟合、数值微分和数值积分、常微分方程的数值解法等。讲授时间大约为60学时。

每章习题中都有该章主要算法的编程上机题，完成这些习题有助于真正掌握这些算法。

限于水平，书中一定有不少不妥和错误之处，恳请读者批评指正。

编者

1987年3月

目　　录

第四章 插值与拟合

第五章 数值积分

第六章 常微分方程数值解法

第一章　误差理论

§1.1　引　言

利用数字去描述、研究、解决生产实践和科学研究中的问题时，都是近似的、有误差的。提起近似和有误差，往往会给人以不严格的、不完美的、甚至错误的预感。其实，这是一种误解，近似是正常的，误差是不可避免的，是始终客观存在的。问题在于我们能否将误差控制到所允许的范围。本节将讨论误差的种种来源及误差在数值计算中的作用。

1．误差的来源　用数值计算解决科学技术中的具体问题，首先必须建立这个具体问题的数学模型。由于数学模型总是具体问题的一种简化和近似，因此数学模型本身包含有误差，这种误差称为**模型误差**。

数学模型中的很多数字是通过测量得来的，测量的结果不可能绝对正确，由此产生的误差称为**测量误差**。

数值方法准确解与模型的准确解之间也有误差。例如，当 $|x|$ 很小时，用 x 代替 $\sin x$ 的误差近似为 $\frac{x^3}{6}$；用 x 代替 $\ln(1+x)$ 误差近似为 $\frac{x^2}{2}$。这种误差称为**截断误差**。

无理数，如 π、$\sqrt{2}$ 等以及只能用环循小数表示的有理数，如 $\frac{1}{3}$、$\frac{1}{7}$ 等，在具体计算时只能取有限位小数，这样引起的误差称为舍入误差。

2. 误差理论在数值计算中的作用举例

例 1 建立$I_n=\int_0^1\frac{x^n}{x+5}dx$的递推公式，并求当$n=0$，1，2，…，20时，$I_n$的值。

〔解〕 $I_n+5I_{n-1}=\int_0^1\frac{x^n+5x^{n-1}}{x+5}dx$

$$=\int_0^1 x^{n-1}dx=\frac{1}{n}$$

$$I_0=\int_0^1\frac{dx}{x+5}=\ln 6-\ln 5$$

于是得递推公式（A）：

$$(A)\begin{cases}I_0=\ln 6-\ln 5\\ I_n=\frac{1}{n}-5I_{n-1}\end{cases}$$

按公式(A)计算的结果见表1-1第二列(箭头表示递推方向)。

另一方面，$I_n=\int_0^1\frac{x^n}{x+5}dx$具有下列特性：

（1）$I_n>0$。

（2）因为当$x\in(0,1)$时，有

$$\frac{x^n}{x+5}<\frac{x^{n-1}}{x+5}$$

所以 $I_n<I_{n-1}$。

（3）因为$I_n>0$，$I_{n-1}>0$，且当$n\to\infty$时，

$$I_n+5I_{n-1}=\frac{1}{n}\to 0$$

所以 当$n\to\infty$时，$I_n\to 0$。

表1-1

n	I_n 的值(A)	I_n 的值(B)
0	0.1823215568	0.1823215568
1	0.0883922160	0.0883922160
2	0.0580389200	0.0580389199
3	0.0431387333	0.0431387341
4	0.0343063334	0.0343063296
5	0.0284683333	0.0284683522
6	0.0243250004	0.0243249055
7	0.0212321408	0.0212326152
8	0.0188392962	0.0188369242
9	0.0169146301	0.0169264899
10	0.0154268495	0.0154675505
11	0.0137748437	0.0140713383
12	0.0144591150	0.0129766419
13	0.0046275018	0.0120398676
14	0.0482910626	0.0112292335
15	−0.0174788646	0.0105204991
16	0.9364432305	0.0098975045
17	−4.623392623	0.0093360067
18	23.17251867	0.0088755221
19	−115.8099618	0.0082539683
20	579.099809	0.0087301587

(4) 因为$I_{n-1}>I_n>0$

所以　$5I_{n-1}<I_n+5I_{n-1}<6I_{n-1}$

用$I_n+5I_{n-1}=1/n$　代入上式可得下面的不等式：

$$0<\frac{1}{6n}<I_{n-1}<\frac{1}{5n}$$

由(3)可见，I_n的值随n的不断增加而趋近于零。再由表1-1可见，$I_{15}<0$，从$n=15$开始，I_n的值正负相间且绝对值不是趋于零，而是不断递增。理论分析与计算结果严重不符。

根据（4）建立新的计算公式可得

$$\frac{1}{6\times 21}<I_{20}<\frac{1}{5\times 21}$$

所以可取

$$I_{20}\approx\left(\frac{1}{6\times 21}+\frac{1}{5\times 21}\right)\times\frac{1}{2}=0.0087301587$$

于是得新的递推公式（B）：

$$(\mathrm{B})\begin{cases}I_{20}=0.0087301587\\ I_{n-1}=-\frac{1}{5}I_n+\frac{1}{5n}\end{cases}$$

由I_{20}为起始值，按（B）中第二式逐次递推的计算结果见表1-1第三列。

比较(A)、(B) 计算结果，I_0是一样的。在（A）中，当 n越大时，I_n的值越不可靠；而在（B）中，尽管粗略地取$I_{20}=0.0087301587$，但按逆递推方向算下去，基本符合I_n的特性，最后求得的I_0又很准确。这是为什么呢？

在（A）中，设准确的理论递推公式为

$$I_1=-5I_0+1$$

实际的运算递推公式为

$$\widehat{I}_1=-5\widehat{I}_0+1$$

式中I_0是理论上的准确值，即$I_0=\ln 6-\ln 5$,由于电子计算机只能取有限位小数进行计算，故取用$\widehat{I}_0=0.1823215568$，它是带有舍入误差的$I_0$的近似值。记$I_0-\widehat{I}_0=\varepsilon$,则

$$I_1-\widehat{I}_1=-5\ (I_0-\widehat{I}_0)\ =-5\varepsilon$$

同理

$$\begin{aligned}I_n-\widehat{I}_n&=-5(I_{n-1}-\widehat{I}_{n-1})\\&=(-5)^2(I_{n-2}-\widehat{I}_{n-2})\\&=\cdots=(-5)^n(I_0-\widehat{I}_0)=(-5)^n\varepsilon\end{aligned}$$

尽管ε取得非常小，但误差的传播逐步扩大，$\widehat{I}_n$与I_n的误差为$(-5)^n\varepsilon$，当n较大时，其值就可能很大，因此计算的数值很不可靠。

在（B）中，

$$I_0-\widehat{I}_0=\frac{1}{-5}(I_1-\widehat{I}_1)=\frac{1}{(-5)^2}(I_2-\widehat{I}_2)$$

$$=\cdots=\frac{1}{(-5)^n}(I_n-\widehat{I}_n)$$

尽管$\widehat{I}_{20}$粗略地取$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{6\times21}+\frac{1}{5\times21}\right)$，但因误差的传播逐步缩小，故计算的数值可靠。

例2 求方程$\lambda^2+(\alpha+\beta)\lambda+10^9=0$的根，其中$\alpha=-10^9$，$\beta=-1$。

［解］ 显然

$$\lambda_{1,2}=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

其中

$$-b=-(\alpha+\beta)=10^9+1$$

$$=0.1\times10^{10}+0.0000000001\times10^{10}$$

式中0.1×10^{10}为10^9的浮点表示；$0.0000000001\times10^{10}$为按$10^{10}$对阶后的1的浮点表示。

若用一般的电子计算机计算，取数只能取到小数点后第八位，这时β在计算中不起作用，于是有

$$-b\approx-\alpha=10^9$$

类似地有

$$b^2-4ac\approx b^2$$

$$\sqrt{b^2-4ac}\approx|b|=10^9$$

结果得

$$\lambda_1 = \frac{10^9 + 10^9}{2} = 10^9$$

$$\lambda_2 = \frac{10^9 - 10^9}{2} = 0$$

由初等数学可知

$$\lambda^2 + (\alpha + \beta)\lambda + 10^9 = \lambda^2 - (10^9 + 1)\lambda + 10^9 = (\lambda - 1)(\lambda - 10^9)$$

因此$\lambda_1 = 10^9$，$\lambda_2 = 1$。

为什么第一种算法会出错呢？这是因为忽略了一次项系数（$\alpha + \beta$）中的β和整个常数项c，实际是求解了方程

$$\lambda^2 + \alpha\lambda = 0$$

结果当然是错的。电子计算机在运算过程中，由于加减法运算时要对阶，在小数的阶数向大数的阶数对齐的过程中，大数"吃掉"了小数，α"吃掉"了β，使$b = a$，b^2"吃掉"了$4ac$，使常数项c的作用被忽略，导致计算λ_2时失败。在计算中大数"吃掉"了小数，在某种情况下是允许的，如本例中计算λ_1；在某种情况下又不允许，如本例中计算λ_2。

为了避免以上情况，并考虑到在分子部分有可能出现二个相近数相减而导致有效数位严重损失的不利情况，在电子计算机上求

$$a\lambda^2 + b\lambda + c = 0$$

的根，是按下列步骤进行的（退化情况$a = 0$，$b = 0$另考虑）：

$$\begin{cases} \lambda_1 = \dfrac{-b - \mathrm{sign}(b)\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \\ \lambda_2 = \dfrac{c}{a\lambda_1} \end{cases}$$

式中sign(b)为符号函数，其定义为

$$\mathrm{sign}(b)=\begin{cases}1, & 当b>0时\\ 0, & 当b=0时\\ -1, & 当b<0时\end{cases}$$

例3 给定$g(x)=10^7(1-\cos x)$，试用四位数学用表求$g(2^\circ)$的近似值。

[解] 以下给出两种解法。

(1)因为$\cos 2^\circ\approx 0.9994$，所以

$$g(2^\circ)=10^7(1-\cos 2^\circ)\approx 10^7(1-0.9994)$$
$$=6000$$

(2)因为$\sin 1^\circ\approx 0.0175$，利用$\cos 2^\circ=1-2\sin^2 1^\circ$计算

$$g(2^\circ)=10^7(1-\cos 2^\circ)=2\times 10^7(\sin 1^\circ)^2$$
$$\approx 2\times 10^7(0.0175)^2=6125$$

用同一本数学用表，都计算到小数点后四位，为什么答案不一致？这是由于在算法（1）中，两个相近数“1”和“0.9994”相减因有效数位减少所致。

以上三例，都是由于在误差处理不恰当而造成种种谬误。因此，学习计算方法之前，首先学习误差理论是必不可少的。

§1.2 绝对误差与相对误差·有效数字

1. 绝对误差与相对误差 设x为原来的数或要测量的真值，x^*为x的近似值或是测得的数值，记

$$E(x)=x-x^*$$

称$E(x)$为近似数x^*的**绝对误差**。

由于x的准确值无法得到，因此$E(x)$也是无法得到的，如果能估计其绝对值的范围为

$$|E(x)|=|x-x^*|\leqslant\Delta$$

则称Δ为近似数x^*的**绝对误差限**。

例 1 $\pi=3.14159265358\cdots$，若取 $\pi^*=3.14159$，于是

$$|E(x)|\leqslant 0.000003$$

则 $\Delta=0.000003$就可以作为用3.14159近似表示π的绝对误差限。

例 2 用毫米刻度的米尺测量不超过1米的长度 x，如果长度接近于某毫米刻度x^*（x^*就作为x的近似值），显然有

$$|E(x)|\leqslant\frac{1}{2}\times 1\text{毫米}=0.5\text{毫米}$$

则近似值x^*的绝对误差限可取为0.5毫米。

当然，我们在估计绝对误差限Δ时总希望尽可能定得小些，估计得越精密越好。

有了绝对误差限就可以知道x（准确值）的范围

$$x^*-\Delta\leqslant x\leqslant x^*+\Delta$$

即x落在区间$[x^*-\Delta,\ x^*+\Delta]$内。在应用上，常采用如下写法来刻画$x^*$的精度

$$x=x^*\pm\Delta$$

例如 $\pi=3.14159\pm 0.000003$。

绝对误差限不能完全表示近似值近似程度的好坏。例如

$$x=10\pm 1$$

$$y=1000\pm 5$$

虽然x的绝对误差限比y的小，但显然1000作为y的近似值要比10作为x的近似值近似程度好。

记 $$R(x)=\frac{E(x)}{x^*}=\frac{x-x^*}{x^*}$$

称$R(x)$为近似数x^*的**相对误差**。

显然，$R(x)$的准确值也是无法得到的。若

$$|R(x)|=\left|\frac{E(x)}{x^*}\right|\leqslant\delta$$

则称δ为近似数x^*的**相对误差限**。

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。

2．有效数字 设有一数x，经过四舍五入得其近似值

$$x^*=\pm(x_1+x_2\times10^{-1}+x_3\times10^{-2}+\cdots+x_n\times10^{-n+1})\times10^m \tag{1.2.1}$$

或写成

$$x^*=\pm(x_1.x_2x_3\cdots x_n)\times10^m$$

其中m为整数，x_1，x_2，x_3，…，x_n分别是0，1，2，…，9中的一个数字，但$x_1\neq0$。由四舍五入的规则知x^*的绝对误差满足不等式

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n+1}$$

绝对误差限取

$$\Delta=\frac{1}{2}\times10^{m-n+1}$$

此时，我们称x^*作为x的近似值具有n位**有效数字**（或准确数字）。例如

$$\pi=3.14159265\cdots$$

则近似值3.14159的绝对误差限为

$$\Delta=\frac{1}{2}\times10^{-5}$$

它有六位有效数字；近似值3.1416的绝对误差限为

$$\Delta=\frac{1}{2}\times10^{-4}$$

它有五位有效数字；近似值3.14的绝对误差限为

$$\Delta=\frac{1}{2}\times10^{-2}$$

它有三位有效数字。

通常对写出的具有有限位数字的数，从其左面第一个不为零的数字起，到它最右边的一位数字，都认为是有效数字。

如近似数0.0053、0.123、123.4，依次有2、3、4位有效数字，它们的绝对误差限依次取0.00005、0.0005、0.05，当0.0053的绝对误差限为0.000005时，就把它记成0.00530，以示区别。

下面讨论有效数字与相对误差之间的关系。

定理1 若x^*具有n位有效数字，则其相对误差满足不等式

$$|R(x)|\leqslant\frac{1}{2x_1}\times10^{-(n-1)}$$

其中x_1是x^*的第一位有效数字。

［证明］ 因为$|x^*|\geqslant x_1\times10^m$，所以

$$|R(x)|=\left|\frac{E(x)}{x^*}\right|\leqslant\frac{\frac{1}{2}\times10^{m-n+1}}{x_1\times10^m}$$

$$=\frac{1}{2x_1}\times10^{-(n-1)}.$$

［证毕］

由定理1可知，有效数字位越多，相对误差限就越小。

定理2 形如（1.2.1）的数x^*，若其相对误差$R(x)$满