

计算方法

东北师范大学



计 算 方 法

数学系计算方法教研室编

东 北 师 范 大 学

1 9 8 1 . 1 1 .

序 言

计算方法是当今数学中一个很重要的分支，它与生产和科学技术的联系极为密切，已成为人们探求自然规律，处理各学科的计算问题不可缺少的有力工具。作为计算方法它本身已形成一个完整的体系，是与现代数字电子计算机紧密相连的。

本教材是在我系 1959 年以来所使用《计算方法讲义》的基础上，参照高等师范院校《计算方法与算法语言教学大纲（试用）*》修改而成。

考虑到师范院校主要是培养中学教师的，所以在内容选择上注意常用的基础理论和方法，并联系一些中学实际，又由于是数学专业的基础课，为此对现代的一些理论与方法也作了些介绍。

为了使學生掌握和了解所学方法，在每节后面备有一定数量的习题。这些题目有的是巩固已学知识；有的是介绍给学生一种方法；有的是带有启发性的引导学生自己去推导新的计算公式。

为了便于学生自学，力求叙述简明，通俗易懂。某些式子的推导，也适当地多写了一两步。

本教材共分六章，讲授时数，在 85 学时左右，如果讲授时数偏紧，根据实际情况，灵活取舍，浮点数和算法语

1980年5月上海教材编审委员会扩大会议上审订的高等师范院校《计算方法与算法语言教学大纲》（试用）

言，本教材未涉及，准备单独开课。

由于我们理论水平和实践经验很肤浅，编写时间又紧，讲义中缺点和错误一定不少，我们衷心希望读者提出宝贵意见。

计算方法教研室

1981.11.

目 录

第一章 误差	(1)
§ 1.1 引言	(1)
§ 1.2 误差来源	(1)
§ 1.3 表示近似数精确度的方法	(3)
§ 1.4 误差的传播	(13)
第二章 代数(或超越)方程的数值解法	(26)
§ 2.1 引言	(26)
§ 2.2 区间二分法	(27)
§ 2.3 弦截法	(31)
§ 2.4 平行弦法	(41)
§ 2.5 切线法	(46)
§ 2.6 一般迭代法	(52)
§ 2.7 林士谔法	(62)
第三章 线性代数算法	(68)
§ 3.1 引言	(68)
§ 3.2 消元法	(69)
§ 3.3 矩阵的三角分解	(80)
§ 3.4 紧凑格式与改进平方根法	(94)
§ 3.5 解三对角线性方程组的追赶法	(102)
§ 3.6 逆矩阵算法	(108)
§ 3.7 向量和矩阵的范数	(119)

§ 3.8	简单迭代法	(131)
§ 3.9	采德尔迭代法	(138)
§ 3.10	超松弛迭代法	(147)
§ 3.11	共轭斜量法	(150)
§ 3.12	求矩阵特征值的幂方法	(160)
§ 3.13	求实对称矩阵的特征值的二分法	(170)
§ 3.14	QR 方法	(183)
第四章	插值与平方逼近	(189)
§ 4.1	引言	(189)
§ 4.2	线性插值	(191)
§ 4.3	抛物插值	(195)
§ 4.4	拉格朗日内插公式	(200)
§ 4.5	张遂——牛顿基本插值公式	(205)
§ 4.6	等距节点插值多项式	(212)
§ 4.7	爱尔米特插值多项式	(222)
§ 4.8	三次样条插值	(229)
§ 4.9	数值微分	(239)
§ 4.10	最小二乘法	(243)
§ 4.11	正交多项式	(254)
§ 4.12	最小平方逼近	(270)
第五章	数值积分	(275)
§ 5.1	引言	(275)
§ 5.2	内插求积公式	(276)
§ 5.3	等距节点求积公式	(283)
§ 5.4	复化公式	(293)
§ 5.5	龙贝格公式	(300)

§ 5.6 高斯求积公式.....	(310)
第六章 常微分方程数值解法.....	(320)
§ 6.1 引言.....	(320)
§ 6.2 尤拉法与改进尤拉法.....	(321)
§ 6.3 收敛性与稳定性.....	(328)
§ 6.4 台劳级数法与尤拉-库塔法.....	(335)
§ 6.5 线性多步法.....	(344)
§ 6.6 解线性二阶常微分方程边值 问题的差分法.....	(350)

第一章 误差

§ 1.1 引言

在实现社会主义的四化过程中，或日常生活中遇到的数量分为两类，一类是精确地反映实际情况的，称为精确数（或称准确数，真值）；另一类则不是这样，称为近似数（或称准确数的近似值），如测量长度、重量、面积、体积，用3.14代替圆周率 π 等等，得到的数值，一般都是近似的，是有误差的。误差的大小往往是标志着工作的质量，在工作中对近似数的问题若处理不当，不是浪费时间，就是给工作带来损失。

另外，我们熟知在计算方法里，是求一些数学问题的数值结果，此数值结果一般是近似的，是有误差的，总之近似数是大量存在的，本章里主要讨论一个近似数的误差（或其精确度）；如何表示原始数据的误差对计算结果的影响等等。

§ 1.2 误差来源

在生产斗争和科学实验中，总要对客观事物和现象作定量分析。要这样做，就要抓住其中的主要因素，忽略其中的

次要因素，建立起已知量和未知量的数学模型 $S = \frac{1}{2}gt^2$ 、

$V = \frac{1}{P}$ 。这种数学模型与实际现象，一定有一些差距，这

种差距，就称之为模型误差。(根本误差)

在数学模型中，往往有若干参数，它们是通过观测得来的，如重力加速度，比重，阻力系数等等。因此必然有误差，称之为观测误差。

当对数学模型，不能简单地求出其精确解时，就要采用某种有效的数值解法，以简单的数学问题代替原数学模型。这样所产生的误差称为截断误差或方法误差。

例如，用收敛的无穷级数的前 n 项和，

$$R(x) = e^x - 1 - x - \frac{1}{2!}x^2 - \frac{1}{3!}x^3 - \dots - \frac{1}{n!}x^n$$

作为该级数和的逼近，其余项就是截断误差。

在实际计算中，不管用何种计算工具，只能对有限位数进行运算，如有的计算机只能对八位数进行运算，超过八位的，它就会把它舍入成八位的数。这样出现的误差称为舍入误差。

舍入的办法有四舍五入法，收尾法（只入不舍），还有去尾法（只舍不入）。

例如对 $\pi = 3.14159\dots$ 截取到四位小数：

用四舍五入法： $\pi \doteq 3.1416$ ；

用收尾法： $\pi \doteq 3.1416$ ；

用去尾法： $\pi \doteq 3.1415$ ；

最后，对四舍五入还作如下规定：当要舍去的部分的首

位数字刚好是5时，若保留部分的末位是偶数，则将5舍去，奇数时，则舍5进1。

例如， $\pi = 3.14159265\dots$ 若取到 10^{-3} 位，则有 $\pi \approx 3.142$ ；若取到 10^{-7} 位，则有 $\pi \approx 3.1415926$ ，这样所得的近似数的末位数字为偶数。

实践表明，进行大量运算时，按四舍五入法进行舍入，整个计算过程的误差积累较小。

§ 1.3 表示近似数精确度的方法

在不同的场合下，表示近似数的精确度的方法各有不同。在本节我们将介绍几种常用的方法及其间的联系。

(一) 绝对误差

定义 1 设 x^* 是某量的精确值， x 是其近似值。我们称差

$$e_x = x^* - x$$

为 x 对 x^* 的绝对误差，或 x 的绝对误差，或 x 的误差。

由定义 1 可知， e_x 可正可负。当 $e_x > 0$ 时，称 x 为 x^* 的不足近似值；当 $e_x < 0$ 时，称 x 为 x^* 的过剩近似值。

$|e_x|$ 的大小，标志着 x 的精确度。一般地，在同一量的不同近似值中， $|e_x|$ 越小， x 的精确度越高。

但 e_x 并不是永远能求出来的。

例如，若用以寸为最小刻度的尺去量桌子的长大约为 3.45 尺。求 3.45 尺的绝对误差。

此例中桌子长的精确值 x^* 是未知的。因此绝对误差就

不可能知道。在实际中这类问题很多，于是定义1就失去了实际意义。为解决这一问题，我们通常用一个不小于 $|e_x|$ 的、尽可能小的正数 Δx 表示近似数 x 的绝对误差的上限，称数 Δx 为近似数 x 的绝对误差界，记为 Δx 。由 Δx 的定义可知

$$|e_x| = |x^* - x| \leq \Delta x, \quad (3.1)$$

或
$$x - \Delta x \leq x^* \leq x + \Delta x. \quad (3.1)'$$

有时记 x 与 Δx 为 $x(\pm \Delta x)$ 或 $x \pm \Delta x$ 。

例如，在真空中光速为 $c = 299796 \pm 4$ 公里/秒，即

$$299792 \text{ 公里/秒} \leq c \leq 299800 \text{ 公里/秒}.$$

我们还要指出，取 Δx ，一般地从 $|e_x|$ 的左侧第一个非0数字起以收尾法取到含1个或2个数字为宜。

有了绝对误差界的概念，上述桌子长度的问题就容易解决了。桌子长的精确值 x^* ，无论怎样，它必定在3.40尺与3.50尺之间。所以 $|e_x|$ 不会超过半寸，即

$$|e_x| = |x^* - 3.45| \leq 0.05 \text{ (尺)}.$$

所以 $\Delta_{3.45} = 0.05$ 。

显然用去尾法或收尾法截取的近似数，其绝对误差界不超过近似数末位的一个单位。例如，对圆周率 π 分别用去尾法和收尾法截取三位数，就得3.14和3.15。它们的绝对误差界都是0.01，即 $\Delta_{3.14} = \Delta_{3.15} = 0.01$ 。

若用四舍五入法对 π 截取五位数字，则得3.1416，其绝对误差界： $\Delta_{3.1416} = 0.00005$ 。从而可知用四舍五入法截取的近似数 x 的绝对误差界不超过 x 的末位的半个单位。

特别当 $x^* = x$ 时， $e_x = 0$ ， $\Delta x = 0$ 。

但绝对误差，不能用来比较不同条件下的近似数的精确

度。

(二) 相对误差

先看一个例子。某人买一吨煤有 10 斤误差，另一人买 100 斤煤也有 10 斤误差。哪一个情况更好些呢？显然是前一情况好一些，而后一种情况是不能允许的。原因是误差太大。为什么太大呢？这是人们在头脑里把 10 斤的误差和购买量做了比较的结果。可见一个量的近似值的精确度，不但与绝对误差有关，而且还和该量本身的大小有关。为在一般情况下反映这一现象，我们引入表示近似值精确度的另一尺度。

定义 2 在定义 1 的假设下，我们称比值

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

为 x 对 x^* 的相对误差，或近似数 x 的相对误差。

由此定义可知，相对误差表示着在单位量中含有的绝对误差，或者说绝对误差在整个量（精确值）中占有的比重，所以它是不名数。因而有更广泛的适用性，它能更好地反映出误差的特性。

一般地，在同一量或不同量的几个近似值中， $|\epsilon_x|$ 小者精确度高。

但在实际计算中，由于 x^* 未知，所以就取

$$\bar{\epsilon}_x = \frac{e_x}{x}$$

作为相对误差的另一定义。

这样做的合理性，是因为 e_x 对 x^* 通常是个很小的量，

而差

$$e_x - \bar{\epsilon}_x = e_x \left(\frac{1}{x^*} - \frac{1}{x} \right) = -\frac{e_x^2}{x^*x}$$

是个更小的量，所以可用 $\bar{\epsilon}_x$ 代替 e_x ，以后谈到相对误差时，都是指 $\bar{\epsilon}_x$ 而言的。

由于 $|\bar{\epsilon}_x|$ 一般比较小，都是以小数形式出现的，故经常把它表示为百分数的形式，从而有百分误差之称。

不过当 x^* 未知时， e_x 是不能精确地求的，从而 $\bar{\epsilon}_x$ 也不能精确地算出，所以与处理绝对误差时同样，我们引入近似数 x 的相对误差界 δx 来表示 $\bar{\epsilon}_x$ 的变化范围：

$$|\bar{\epsilon}_x| = \frac{|e_x|}{|x|} \leq \delta x, \quad |x| \neq 0 \quad (3.2)$$

$$-\delta x \leq \bar{\epsilon}_x \leq \delta x. \quad (\text{注: } \bar{\epsilon}_x \text{ 均记作 } \epsilon_x)$$

作为实用公式，我们取

$$\delta x = \frac{\Delta x}{|x|}, \quad \text{即} \quad \Delta x = |x| \delta x. \quad (3.3)$$

有了这个公式，就可以算出上面量桌子长度的相对误差界为

$$\delta 3.45 = \frac{0.05}{3.45} \leq 0.015 = 1.5\%$$

两个人买煤问题的相对误差界分别为

$$\delta 2000 = \frac{10}{2000} = 0.005 = 0.5\%$$

$$\delta 100 = \frac{10}{100} = 0.10 = 10\%$$

后者的误差是前者的 20 倍。

(三) 有效数字

在实际工作中，人们总是愿意把近似数写成十进制的有限形式。因此就总结出不通过计算绝对误差界或相对误差界，而直接由组成近似数的数字个数来表示近似数精确度的方法。

我们熟知，任何十进制数皆可写为10的幂级数的形式。例如，

$$26701.528 = 2 \cdot 10^4 + 6 \cdot 10^3 + 7 \cdot 10^2 + 0 \cdot 10^1 + 1 \cdot 10^0 + 5 \cdot 10^{-1} + 2 \cdot 10^{-2} + 8 \cdot 10^{-3},$$

$$0.0367 \dots = 3 \cdot 10^{-2} + 6 \cdot 10^{-3} + 7 \cdot 10^{-4} + \dots,$$

一般地，可将准确数 x^* (设 > 0) 的近似值 x 表示为

$$x = x_1 10^m + x_2 10^{m-1} + \dots + x_p 10^{m-p+1} + \dots + x_n 10^{m-n+1}, \quad (3.4)$$

其中 $x_1 \neq 0$, x_1, x_2, \dots, x_n , 各为 0, 1, 2, \dots , 9 中的某一个数字。 p, n 为正整数， m (称为 x 的阶) 为整数。

定义 3 对 (3.4)，如果

$$\Delta x \leq \frac{1}{2} 10^{m-p+1},$$

则称 x 精确到 10^{m-p+1} 位，或者说 x 是具有 p 个有效数位的近似数，其中 $10^m, \dots, 10^{m-p+1}$ 都是 x 的有效数位。

特别当 x 精确到末位 (即 $p = n$) 时，称 x 为有效数。其中 x_1, x_2, \dots, x_n 分别称为 x 的第 1, 第 2, \dots , 第 n 个有效数字。

例 1 $\pi = 3.1415926 \dots$, 取 $x = 3.142$. 则

$$|\pi - x| = |-0.000407\cdots| < 0.0005.$$

$$\therefore \Delta 3.142 = 0.0005 = \frac{1}{2}10^{-3},$$

此处 $m=0$, $m-p+1=-3$, 所以 $p=4$. 即 x 中的 3, 1, 4, 2 是其 4 个有效数字, 3.142 是有效数.

例2 若以 $3.142857 \left(\doteq \frac{22}{7} \right)$ 为 π 的近似值, 则

$$\pi - 3.142857 = -0.00125\cdots,$$

取 $\Delta 3.142857 = 0.002 < \frac{1}{2}10^{-2}$

即 3.142857 是 π 的具有 3 个有效数位的近似数.

通常, 用四舍五入法截取的近似数都是有效数.

我们约定: 原始数据都要用有效数字写. 凡是不标明绝对误差界或相对误差界的近似数都被认为是有效数.

这样一来, 从一个近似数的表示式就知道了它的绝对误差界 (不超过该数末位的半个单位) 或精确度.

显然, 在定义 3 的条件下, 有效数字个数多的近似数精确.

于是近似数 3.1 与 3.10 就有了不同的含义. 前者表示,

$\Delta 3.1 \leq \frac{1}{2} \cdot 10^{-1}$, 而后者表示 $\Delta 3.10 \leq \frac{1}{2}10^{-2}$. 3.10 比 3.1 精确. 所以在近似数的小数部分里不能随便添加零或抹掉零.

例如, 我国 1979 年的粮食产量为三万二千四百九十万吨. 用数字应写为 32490×10^4 吨. 这是个近似数. 它表明 $\Delta 32490 \times 10^4 \leq \frac{1}{2}10^4$. 即数 32490×10^4 中有 5 个有效数

字 3, 2, 4, 9, 0, 如果把它写成

$$3249 \times 10^5 \text{ 或 } 324900000,$$

就有问题了. 前者表示粮食产量的绝对误差界不超过 5 万吨, 后者表示绝对误差界不超过半吨. 显然这是不合实际的.

必须注意, 在定义 3 中的 $\Delta x \leq \frac{1}{2} 10^{m-p+1}$, 应理解为

$$10^{m-p} < \Delta x \leq \frac{1}{2} 10^{m-p+1} \quad (3.5)$$

否则, 与绝对误差界的定义就有矛盾了.

(四) 有效数字个数与相对误差界

在定义 3 中表明了近似数的有效数字个数与绝对误差界的关系. 下面指出有效数字 (位) 个数与相对误差界的关系.

定理 1 如果近似数 x 有 p 个有效数字 (位), 则

$$10^{-(p+1)} < \delta x \leq \frac{1}{2x_1} 10^{-(p-1)} \quad (3.6)$$

其中 x_1 为 x 第 1 个非零数字 (下同)

证明 由 (3.4) 知

$$x_1 10^m \leq x < (x_1 + 1) 10^m, \quad (3.7)$$

所以由 (3.3) 及定义 3 得

$$\delta x = \frac{\Delta x}{x} \leq \frac{\frac{1}{2} 10^{m-p+1}}{x_1 10^m} = \frac{1}{2x_1} 10^{-(p-1)}.$$

另一方面, 由 (3.5), (3.7),

$$\delta x = \frac{\Delta x}{x} > \frac{10^{m-p}}{(x_1 + 1) 10^m}.$$

$$= \frac{1}{(x_1+1)} 10^{-p} \geq 10^{-(p+1)}.$$

证完. 例如, 取 3.14 为 π 的近似值, 其相对误差界由 (3.6) 可得.

$$\delta 3.14 \leq \frac{1}{2 \times 3} 10^{-(3-1)} = \frac{1}{6} 10^{-2} < 0.17\%$$

若用 (3.3) 计算, 则

$$\delta 3.14 = \frac{\Delta 3.14}{3.14} < \frac{0.16}{3.14} < 0.051\%.$$

可见用 (3.6) 估计 δx , 虽然简便, 但结果比较粗糙.

不过, 定理 1 告诉我们, 有效数字个数越多, 近似数的相对误差界越小.

推论 如果 $\delta x > \frac{1}{2} 10^{-p}$, 则 x 含有的有效数字 (位) 个数不超过 p .

证明 用反证法. 设 x 有 $p+1$ 个有效数字 (位), 则由定理 1 得.

$$\delta x \leq \frac{1}{2x_1} 10^{-p} \leq \frac{1}{2} 10^{-p}.$$

这与题设矛盾. 证完.

例. 求 $\sqrt{6}$ 的近似值 a , 使 $\delta a \leq \frac{1}{2} 10^{-3}$.

解 因为 $\sqrt{6} = 2.4492\dots$, $x_1 = 2$. 设 a 有 n 个有效数字, 由定理 1, $\delta a \leq \frac{1}{4} 10^{-(n-1)}$. 令