计算方法引论及例题选讲

朱水根 龚时霖 编著

计算方法引论及例题选讲

朱水根　龚时霖　编

(2)

天津科学技术出版社

责任编辑：黄立民

计算方法引论及例题选讲

朱水根　龚时霖　编

*

天津科学技术出版社出版

天津市赤峰道130号

天津新华印刷一厂印刷

新华书店天津发行所发行

*

开本787×1092毫米 1/32　印张22.5　字数480 000

1990年6月第1版

1990年6月第1次印刷

印数：1—1 680

ISBN 7-5308-0314-X/O·22　定价13.00元

前　言

随着电子计算机的广泛应用，“数值计算方法”已成为高等院校数学专业、计算机科学专业和许多其它专业的必修课，并引起广大工程技术人员的浓厚兴趣。为了有效地帮助读者更好地掌握计算方法的基本理论和解题方法，我们根据多年的教学经验和所收集的国内外资料编写了这本书。

本书共分两部分。第一部分为基本概念和理论。其中第一章分析了数值计算中所不可避免的误差的来源、种类及其在算术运算中的传播，并给出了设计算法的一般原则。第二章给出了求解高次代数方程和超越方程的几种简单而常用的方法：对分法、弦截法、一般迭代法和牛顿法。由于近年来发展起来的一个十分活跃的分支——非线性方程组的解法是牛顿法的推广，因此将其收入在本章中。第三、四章讨论了线性方程组的直接解法和迭代解法。由于共轭斜量法是解线性方程组的一个重要方法，因而也作了详细介绍。第五章对求方阵的特征值和特征向量的几种最重要的方法：幂法、逆幂法、雅可比方法、二分法等进行了详细的讨论，并给出了QR方法的基本思想和具体算法。第六章除了介绍古典的拉格朗日插值、牛顿插值和埃尔米特插值外，还讨论了三次样条插值，而样条函数则是近年来发展起来的广泛应用于飞机、船舶、汽车等制造业的新兴科学分支。在本章中还详细介绍了差分算子概念，实践证明这一部分内容的引入大大简化了许

多种重要差分性质的证明。最小二乘法是工程上处理数据的有效方法，也合并在本章中介绍。第七章用三条线贯穿了对数值微分和数值积分的讨论。一条线是由理查逊外推法导出数值微分算法及龙贝格积分法；另一条线是由拉格朗日插值导出牛顿——柯特斯求积公式；第三条线是利用正交多项式理论推出高斯型求积公式。第八章则集中介绍了常微分方程初值问题的各种有效推算公式，并部分地讨论了数值方法的收敛性和稳定性。

本书将为读者提供我们所精选的四百多道题。为了便于作教材使用，约二百题不给解答，仅给出计算结果或若干必要的提示，并附于第一部分各章后面作为习题，以培养学生和读者分析问题和解决问题的能力。余下的二百四十多题则给出详尽的证明或计算过程，其中有的题目采用一题多解，有的还比较了各种方法的优劣，以帮助读者掌握解题的思路和技巧，加深对第一部分基本概念和理论的理解。在所给例题中，还收入了部分融会贯通其它学科知识或难度较大的题目，供工程技术人员和有志于考研究生的读者参考使用。

大学专科班的学生使用本教材时只须略去文中带星号“*”的章节，亦可自成体系。

天津计算数学分会理事长、南开大学数学系孙澈先生审阅了全书的初稿。南开大学数学系汤怀民先生对本书第一部分正文进行了详细审阅，天津师范大学数学系林文贤先生对全书的修改稿进行了全面审阅，他们都提出了许多宝贵的修改意见。

天津师范大学应用数学教研室李学武老师对本书的所有习题和解答进行了认真的校阅。王玉珩老师为本书的第二部

分提供了部分资料。

谨向以上各位先生致以衷心地感谢。

本书的第一部分的一、六、七、八章由朱水根执笔，第二、三、四、五章由龚时霖执笔，第二部分内容由李学武、朱水根、龚时霖共同编写。

因限于水平，加之时间匆忙，错误和不妥之处在所难免，恳请读者批评指正。

编　者

1987年5月于天津师大

目　　录

第一部分　计算方法引论

第一章　导　　论

§1　误差的基本概念

计算方法是一门理论与实践高度结合的学科，它不仅有系统严谨的理论证明，还有大量的实际运算。而我们在运算中所遇到的数据往往是不准确的、带有误差的，它们是由测量、估计、或前面的计算得到的。为了能在实际计算中进行有效的运算，并对计算结果的精确性进行评价，应对误差的来源、种类进行必要的讨论。

一、误差来源

误差来源有如下四种：

（1）模型误差　用数学模型描述实际问题时，往往抓住本质的，起主导作用的方面，而略去非本质的次要因素，将问题理想化之后才进行数学概括，这种概括虽然很好地反映了客观规律，但也有误差，这就是模型误差。

（2）观测误差　原始数据是由观测、实验，并加以记录而获得的。由于仪器的精密性、实验手段、周围的环境变化以及人的工作态度和能力等因素，而使数据带有的误差，

均称为观测误差。

（3）截断误差　理论上的精确值往往要求用无限次的运算才能获得，而实际计算则只能进行有限次。

例如，理论上由

$$e^{x}=\sum_{K=0}^{\infty}\frac{x^{k}}{K!}$$

取前$n+1$项的部分和

$$\sum_{k=0}^{n}\frac{x^{k}}{K!}$$

作为e^{x}的近似值，截去$\sum\limits_{k=n+1}^{\infty}\frac{x^{k}}{K!}$。这种模型的准确值与数值方法的准确解之间的差就称为截断误差。

（4）舍入误差　实际计算是按有限位数进行的，每一步所表示的数都可能要经过四舍五入或其它方法处理而得到。这种误差就是舍入误差。

显然，模型误差与观测误差对计算结果要产生深刻影响，但它们的产生往往涉及到其它有关学科的研究深度以及实验设备等因素，不是计算工作者能独立加以解决的。因此本课程将只讨论舍入误差、截断误差和它们在计算过程的传播及对计算结果的影响，并研究如何控制它们的影响，以保证计算结果有足够的精度。

二、绝对误差、绝对误差限

设x为某量的精确值，x^{*}是该量的近似值，称

$$\varepsilon(x)=x^{*}-x \qquad (1\cdot1)$$

为近似数x^{*}的绝对误差。

由于精确值 x 一般是未知的，因而$\varepsilon(x)$也是未知的，但对许多具体问题，人们往往可以估计出$|\varepsilon(x)|$的某一个上限$\eta(x)$，使

$$|\varepsilon(x)|\leqslant\eta(x) \tag{1·2}$$

称这个$\eta(x)$为近似值x^*的绝对误差限。显然，$\eta(x)$ 不是唯一的。

例如，用带有寸刻度的尺去测量一块布的长度 x，虽然其准确值难以确定，但可以估计出其误差的上界

$$|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\ (\text{寸})$$

由（1·1），（1·2）知在任何情况下都有

$$|x^*-x|\leqslant\eta(x)$$

即

$$x^*-\eta(x)\leqslant x\leqslant x^*+\eta(x)$$

习惯上常表示为

$$x=x^*\pm\eta(x) \tag{1·3}$$

例如，1975年国际大地测量会议建议的光速为

$$c_0=299792458\pm1.2\text{米/秒}$$

说明用299792458米/秒作为光速，其绝对误差限为

$$\eta(x)=1.2\text{米/秒}$$

显然，绝对误差及绝对误差限是有量纲的。

但是，绝对误差还不足以刻画出近似数的精确程度。比如，蜗牛的速度为0.0079米/秒，而刚才提及的光速的绝对误差限已经是蜗牛速度的150倍以上了。由此，需要引入一个更能刻画出误差本质的概念，这就是相对误差概念。

三、相对误差、相对误差限

称绝对误差$\varepsilon(x)=x^*-x$与精确值x之比

$$\varepsilon_r(x)=\frac{\varepsilon(x)}{x}=\frac{x^*-x}{x} \tag{1·4}$$

为近似数x^*的相对误差，而称

$$\delta(x)=\frac{\eta(x)}{|x|} \tag{1·5}$$

为x^*的相对误差限。其中$\eta(x)$为x^*的绝对误差限。由于$\eta(x)$并不唯一，所以$\delta(x)$亦不唯一。

另外，精确值x往往是未知的，讨论时常以x^*代之。如此，有相对误差的另一定义：

$$\varepsilon_r^*(x)=\frac{x^*-x}{x^*} \tag{1·6}$$

相应地，

$$\delta^*(x)=\frac{\eta(x)}{x^*} \tag{1·7}$$

为相对误差限的另一定义。

由于

$$\begin{aligned}\left|\delta(x)-\delta^*(x)\right| &= \left|\frac{\eta(x)}{x}-\frac{\eta(x)}{x^*}\right| \\ &= \eta(x)\left|\frac{|x^*|-|x|}{|x^*||x|}\right| \\ &\leqslant \eta(x)\frac{|x^*-x|}{|x^*||x|} \\ &\leqslant \eta^2(x)\frac{1}{|x^*||x|}\end{aligned}$$

所以，若$|x^*|$较$\eta(x)$大得多，那么由（1·7）式所定义的$\delta^*(x)$去近似代替（1·5）式中的$\delta(x)$是合理的。例如，刚

才所说的光速，由于$x^*=299792458$米/秒比 $\eta(x)=1.2$ 米/秒大得多，因此，用

$$\delta^*(x)=\frac{\eta(x)}{|x^*|}=\frac{1.2\text{米/秒}}{299792458\text{米/秒}}\approx\frac{1}{25\text{万}}$$

作为光速的相对误差限是合理的。在实际计算中，人们更常用上式表示相对误差限，这是我们应当注意的。此外，我们易知相对误差及相对误差限都是无量纲的。

顺便指出，有的书定义绝对误差为

$$\varepsilon(x)=x-x^*$$

为了避免因该式与（1·1）不同而带来的符号差别，人们常视$|x-x^*|$为x^*的绝对误差。

四、有效数字

为了明确表示一个近似数的精确程度，下面我们介绍一个很有用的概念"有效数字"。

定义1　如果某近似数x^*的一个绝对误差限$\eta(x)$是该近似数某一位上的半个单位，从该位到x^*的第一位非零数字一共有n位，则称该近似数有n位有效数字（或者说x^*准确到该位）。

这个定义使我们一旦知道某一近似数的绝对误差限，立即可知其有效数字位数。

例如，已知$\pi=3.1415926\cdots\cdots$则近似数

$$x^*=3,\ 3.14,\ 3.14159$$

的有效数字分别为一、三、六位。

表 1-1

近似数x^*	绝对误差$\varepsilon(x)$	绝对误差限$\eta(x)$	有效数字位数
3	$\varepsilon(x)\approx-0.14$	0.5	1 位
3.14	$\varepsilon(x)\approx-0.0016$	0.005	3 位
3.14159	$\varepsilon(x)\approx0.0000026$	0.000005	6 位

为便于研究有效数字与绝对误差及相对误差的关系，我们给出有效数字的第二个定义。

定义 2　设数x的近似数为x^*，将x^*写成

$$x^* = \pm 0\cdot a_1a_2\cdots a_n\times 10^{m+1}$$
$$= \pm 10^{m+1}(a_1\times 10^{-1}+a_2\times 10^{-2}+\cdots+a_n\times 10^{-n}) \tag{1·8}$$

若其绝对误差限满足

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

则说近似数x^*具有n位有效数字。此处，m是一整数，每个$a_i\in\{0,1,2,\cdots 9\}$，且$a_1\neq 0$。

比如，可验证3.14159是π的具有 6 位有效数字的近似数。事实上，

$$|\pi-3.14159|\doteq 0.0000026\leqslant 0.000005 = \frac{1}{2}\times 10^{0+1-6}$$

显然，若给出了某一近似数的有效数字位数，则可从（1·9）式求出该近似数的绝对误差限。例如，设$x^*=3587.64$具有 6 位有效数字，由于可表

$$3587.64=10^4\times 0.358764$$

由定义 2，必有

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{4-6}=\frac{1}{2}10^{-2}$$

即x^*的绝对误差限为0.005。一般地，可得以下推论。

推论 1　若已知某一近似数x^*恰具有n位有效数字，且表x^*为

$$x^*=\pm 10^{m+1}\times 0\cdot a_1a_2\cdots a_n$$

则其绝对误差x^*-x满足

$$\frac{1}{2}\times 10^{m-n}<|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{m-n+1}\qquad(1\cdot 10)$$

显然，有效数字的位数 n 越大，其绝对误差限就越小。

推论 2　若形如（1·8）的近似数x^*恰具有 n 位有效数字，则由（1·6）式所定义的相对误差满足

$$\frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-n}<|\varepsilon_r^*(x)|\leqslant\frac{1}{2a_1}\times 10^{-(n-1)}\qquad(1\cdot 11)$$

其中$a_1\neq 0$是x^*的第一位有效数字。

证　由（1·8）知

$$(a_1+1)\times 10^m>|x^*|\geqslant a_1\times 10^m$$

将上式和(1·10)的各对应项相除，注意不等号的方向，则有

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

$$\leqslant\frac{\frac{1}{2}\times 10^{m-n+1}}{a_1\times 10^m}=\frac{10^{-(n-1)}}{2a_1}$$

推论 3　形如（1·8）的近似数x^*若其相对误差$\varepsilon_r^*(x)$

满足

$$\left|\varepsilon_r^*(x)\right| \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)} \qquad (1\cdot 12)$$

则x^*至少有n位有效数字。

证 由于

$$\varepsilon_r^*(x) = \frac{x^*-x}{x^*} \text{及} |x^*| \leqslant (a_1+1) \times 10^m$$

所以

$$|x^*-x| = |x^*||\varepsilon_r^*(x)|$$

$$\leqslant (a_1+1) \times 10^m \times \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

$$= \frac{1}{2} \times 10^{m+1-n}$$

由定义 2，知x^*至少具有n位有效数字。

最后，关于有效数字我们指明以下几点：

（1）用四舍五入法取准确值的前n位x^*作为近似值，则x^*必有n位有效数字。

（2）有效数字的位数相同的两个近似数，绝对误差限不一定相同。

例如，设$x_1^* = 12345$及$x_2^* = 0.12345$均有五位有效数字，由定义 1，可知它们的绝对误差限分别为$\eta_1 = 0.5$，$\eta_2 = 0.000005$。

（3）把任何数乘以10^p（$p = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$）等于移动该数的小数点，并不影响它的有效数字位数。

例如，$g = 9.80$米/秒^{2}具有三位有效数字，而$g = 0.00980 \times 10^3$米/秒^2，亦具有三位有效数字。但9.8米/秒^{2}与9.80米/