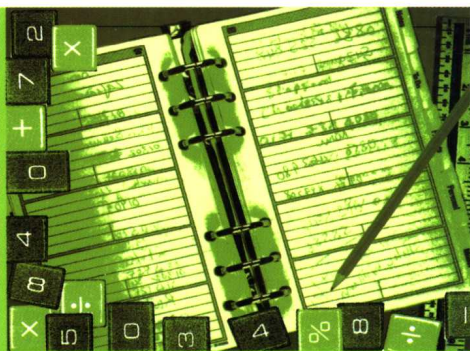




计算方法

朱方生 李大美 李素贞 编



全国优秀出版社
武汉大学出版社

计 算 方 法

朱方生 李大美 李素贞 编

武汉大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/朱方生,李大美,李素贞编. —武汉: 武汉大学出版社, 2003. 8

ISBN 7-307-03827-7

I. 计… II. ①朱… ②李… ③李… III. 数值计算—计算方法—高等学校—教材 IV. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 059064 号

责任编辑: 史新奎 责任校对: 鄢春梅 版式设计: 支 笛

出版发行: 武汉大学出版社 (430072 武昌 珞珈山)

(电子邮件: wdp4@whu.edu.cn 网址: www.wdp.whu.edu.cn)

印刷: 武汉市汉桥印务有限责任公司

开本: 850×1168 1/32 印张: 7.625 字数: 187 千字

版次: 2003 年 8 月第 1 版 2003 年 8 月第 1 次印刷

ISBN 7-307-03827-7/O · 279 定价: 11.00 元

版权所有, 不得翻印; 凡购买我社的图书, 如有缺页、倒页、脱页等质量问题, 请与当地图书销售部门联系调换。

前 言

随着计算机的广泛应用,工程和科学计算的重要性已人所共知。学习和掌握计算机上常用的数值计算方法及有关的基础理论知识已成为工科高等教育的一个重要内容,计算方法这门课程已在许多工科院校列为大学生的必修课。

本书是根据《高等工业学校数值计算方法课程教学基本要求》,在总结武汉大学工科专业多年教学实践的基础上,为高等工科院校大学生开设计算方法课程而重新编写的。

本书比较通俗地介绍了计算机上行之有效的常用数值计算方法的原理、结论及推导过程,并列举大量计算实例,以加深读者对这些方法的理解。对处理同一问题的几种不同的数值方法进行了比较和分析。凡本书介绍的方法都给出了在计算机上实现的详细步骤和程序框图。读者只要学过某种计算机语言,便可独立地针对所提出的实际问题,选择合适的方法,按照书中所给出的框图编制程序上机计算,一定可获得满意的数值结果。因此,本书也可作为本、专科与函授的计算机有关专业的教材,以及从事数值分析方面的科研和工程技术人员的参考书。

本教材共分七章,为了适应不同程度的需要,有些内容加了星号“*”。若只安排 36 个学时的授课时间,加星号的内容可不讲授。全书的内容适用于 54 个学时的讲授。另外,应加上机实习 12 个学时。

本教材第一、七章由李素贞编写,第二、三、四章由朱方生编写,第五、六章由李大美编写。在编写过程中,得到了武汉大学数

学与统计学院许多老师的关心和支持,在此深表感谢!

由于编写水平有限,书中错误和不妥之处,衷心希望读者提出宝贵意见。

编 者

2003 年 5 月于武汉大学

目 录

第一章 绪论	1
§ 1.1 计算方法研究的对象和特点	1
§ 1.2 误差的来源及基本概念	4
1.2.1 误差的来源	4
1.2.2 误差的概念和有效数字	5
1.2.3 初值误差的传播	9
§ 1.3 选用和设计算法应注意的问题	10
1.3.1 选用数值稳定的计算公式	10
1.3.2 防止两个相近数相减	12
1.3.3 防止大数“吃掉”小数	13
1.3.4 简化计算步骤,减少运算次数	14
习题 1	14
第二章 非线性方程的数值解法	16
§ 2.1 二分法	16
2.1.1 数学理论基础	17
2.1.2 二分法的方法介绍	17
2.1.3 计算步骤与程序框图	18
§ 2.2 迭代法	21
2.2.1 迭代法的基本思想	21
2.2.2 迭代法的收敛条件	22
2.2.3 误差估计式	25

2.2.4	计算步骤和程序框图	26
2.2.5	迭代法的收敛阶	27
§ 2.3	牛顿(Newton)法	30
2.3.1	方法介绍	31
2.3.2	牛顿法收敛的充分条件	32
2.3.3	牛顿法的收敛阶	35
2.3.4	计算步骤和程序框图	36
2.3.5	双点弦截法(快速弦截法)	39
习题 2		43

第三章 解线性代数方程组的直接法 44

§ 3.1	高斯(Gauss)消去法	45
3.1.1	顺序消去法	45
3.1.2	主元消去法	50
§ 3.2	矩阵的三角分解	54
3.2.1	矩阵的杜利特尔(Doolittle)分解	54
3.2.2	高斯消去法与矩阵的三角分解	57
3.2.3	杜利特尔分解法	58
§ 3.3	解三对角方程组的追赶法	62
3.3.1	三对角阵能进行三角分解的条件	63
3.3.2	追赶法的递推公式	64
§ 3.4	平方根法和改进的平方根法	66
3.4.1	平方根法的理论基础	66
3.4.2	平方根法的计算公式与计算步骤	68
3.4.3	改进的平方根法	70
§ 3.5	线性代数方程组的性态	73
3.5.1	向量范数	74
3.5.2	矩阵范数	76
3.5.3	线性代数方程组的性态	80

习题 3	85
第四章 解线性代数方程组的迭代法	87
§ 4.1 三种基本的迭代方法	87
4.1.1 雅可比(Jacobi)迭代法	87
4.1.2 高斯-赛德尔(Gauss-Seidel)迭代法	90
4.1.3 超松弛迭代法(SOR 方法)	93
§ 4.2 迭代法的收敛条件	97
4.2.1 迭代法收敛的概念	97
4.2.2 迭代法收敛的判定定理	97
习题 4	107
第五章 插值与拟合	109
§ 5.1 插值的基本概念	109
5.1.1 插值问题	109
5.1.2 插值多项式的存在惟一性	110
5.1.3 插值余项	112
§ 5.2 拉格朗日(Lagrange)插值	113
5.2.1 拉格朗日插值基函数	113
5.2.2 拉格朗日插值多项式	114
§ 5.3 牛顿插值	118
5.3.1 差商及性质	118
5.3.2 牛顿插值多项式	120
§ 5.4 差分与等距节点插值	122
5.4.1 差分及性质	123
5.4.2 等距节点的牛顿插值	124
§ 5.5 埃尔米特(Hermite)插值	127
§ 5.6 分段低次插值	132
5.6.1 高次插值的缺陷	132

5.6.2	分段线性插值	133
5.6.3	分段三次埃尔米特插值	136
§ 5.7	三次样条插值	137
5.7.1	插值问题与插值条件	137
5.7.2	三弯矩方程	139
§ 5.8	曲线拟合的最小二乘法	144
5.8.1	曲线拟合	144
5.8.2	几种具体的拟合曲线类型	148
习题 5		151
第六章	数值积分	155
§ 6.1	代数精度与插值型求积公式	155
6.1.1	代数精度	155
6.1.2	插值型求积公式	157
§ 6.2	牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式	161
6.2.1	牛顿-柯特斯公式	161
6.2.2	几个低阶求积公式	164
§ 6.3	复化求积公式	169
6.3.1	复化梯形公式	169
6.3.2	复化辛卜生公式	170
§ 6.4	龙贝格(Romberg)算法	174
6.4.1	复化梯形公式逐次分半算法	174
6.4.2	李查逊(Richardson)外推法	177
6.4.3	龙贝格积分法	180
§ 6.5	高斯型求积公式	183
6.5.1	高斯型求积公式的定义	183
6.5.2	高斯型求积公式的建立	186
* § 6.6	二重积分的数值求积	189
6.6.1	积分区域为矩形域情形	189

6.6.2 积分区域为一般情形	192
习题 6	193
第七章 常微分方程数值解	195
§ 7.1 引言	195
§ 7.2 欧拉(Euler)方法	196
7.2.1 欧拉方法推导	197
7.2.2 隐式公式及改进的欧拉方法	200
7.2.3 误差分析	203
§ 7.3 龙格-库塔(Runge-Kutta)方法	204
7.3.1 龙格-库塔方法的构造	204
7.3.2 龙格-库塔方法的推导	205
§ 7.4 单步方法的收敛性和稳定性	210
7.4.1 单步法的收敛性	210
7.4.2 单步法的稳定性	212
§ 7.5 线性多步法	214
7.5.1 利用待定系数法构造线性多步法	214
7.5.2 利用数值积分构造线性多步法	215
7.5.3 亚当姆斯(Adams)公式	216
§ 7.6 常微分方程组与高阶微分方程的数值解法	220
7.6.1 一阶方程组	220
7.6.2 化高阶方程为一阶方程组	222
习题 7	224
习题参考答案	226
参考文献	232

第一章 绪 论

§ 1.1 计算方法研究的对象和特点

计算方法亦称为数值分析,它是专门研究求解各种数学问题的数值计算方法.众所周知,传统的科学研究方法有两种:理论分析和科学实验.今天随着计算机技术的飞速发展和计算数学方法与理论的日益成熟,科学计算已成为第三种科学研究的方法和手段.科学计算的物质基础是计算机,大家知道,计算机只能做加减乘除等算术运算和逻辑运算,而数学运算的范围极其广阔,既有数学运算,也有代数运算,还有各种各样的函数运算.同时由于生产实践和科学实验中提出的各种问题,在建立了数学模型之后,并不能立刻用计算机直接求解,还必须研究解决适合于计算机上采用的计算这些数学模型的计算方法,将数学公式转化成一系列相应的算法步骤,并由此出发编制出一套正确的计算程序,然后上机计算才能得出有用的结果.用计算机进行科学计算解决实际问题的基本过程如图 1.1 所示.

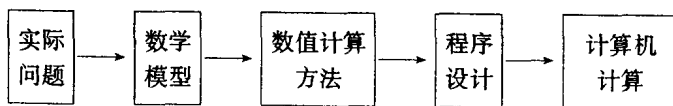


图 1.1

根据数学模型提出的问题,建立求解问题的数值计算方法并进行方法的理论分析,直到编出算法程序上机算出结果,及对结果进行分析的过程,便是计算数学要完成的任务.因此,计算方法就是研究用计算机解决数学问题的方法及其理论.它作为数学的一个分支,是以纯数学为基础,把理论和实际计算结合起来,着重研究面向计算机的、能够解决实际问题的数值方法和理论.具体地说,它首先要构造可计算出各种问题解的数值计算方法;然后分析方法的收敛性、稳定性和误差.由于是面向计算机的,它还要分析方法的时间复杂度和空间复杂度(即计算时间和存储空间的问题),这些都是必不可少的.

对于给定的数学问题,常常可以提出很多种不同的数值计算方法.如何评价这些方法的优劣呢?一般来说,一个好的方法应具有如下特点:

(1) 面向计算机,要根据计算机的特点,构造实际可行的有效算法,使之易于上机实现.

(2) 有可靠的理论分析,从理论上能够保证方法的收敛性和稳定性.

(3) 要有好的计算复杂度,即时间复杂度和空间复杂度.

(4) 要经得起数值实验的检验.也就是说,算法除了理论上要满足上述三点外,还要通过数值实验来证明其是行之有效的方法.

作为一个例子,我们来看一个简单的算法问题.设要对给定的 x 求多项式

$$P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 \quad (1.1)$$

的值.一种计算过程是直接计算 $P(x)$ 的每一项后逐项求和,这样要做 $\frac{n(n-1)}{2}$ 次乘法和 n 次加法.另一种就是先将 $P(x)$ 变形为如下形式:

$$P(x) = (((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \cdots + a_1)x + a_0, \quad (1.2)$$

再由内层向外层计算. 如设

$$u_0 = a_n,$$

$$u_k = (((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \cdots + a_{n-k+1})x + a_{n-k},$$

就可以得到一个递推公式

$$u_k = u_{k-1}x + a_{n-k}, \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (1.3)$$

这样的计算过程只需要计算 n 次乘法和 n 次加法. 这种算法和上一种算法相比, 不仅逻辑结构简单, 而且计算量也明显地减少了. 多项式求值的这种算法称为秦九韶算法, 它是我国宋朝数学家秦九韶最先提出的.

对于秦九韶算法的实现, 只要依次计算 u_k , 最后返回 u_n 的值即可. 又因为中间的 u_k 不需要, 就没有保存的价值, 于是只需一个变量 u 进行计算就可以了, 具体如图 1.2 所描述:

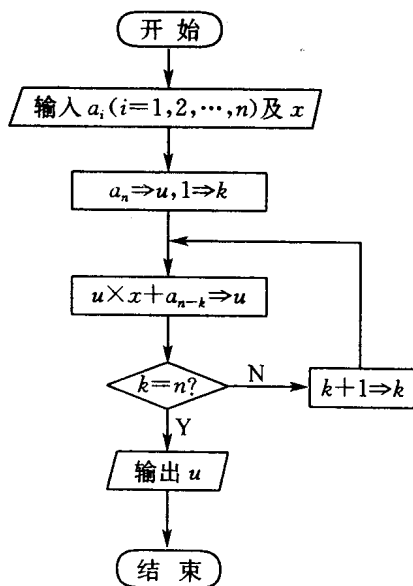


图 1.2 秦九韶算法框图

§ 1.2 误差的来源及基本概念

1.2.1 误差的来源

误差产生的原因是多方面的,它们的来源大体可分为四类:

1. 模型误差

用数值计算方法解决科学技术问题时,首先必须建立数学模型.由于不可能把所有的因素都考虑进去,往往只是抓住主要因素而忽略次要因素,因此实际问题的数学模型都是近似的,它与实际问题之间总存在着误差.由此产生的数学模型的解与实际问题的解之间出现的误差称为模型误差.

2. 观测误差

数学模型中往往含有一些物理量,它们的值通常是由观测或实验得到的,与实际数据本身总存在有误差,这种由观察所产生的误差称为观测误差.

3. 截断误差

当实际问题的数学模型很复杂,因而不能获得其精确解时,只能用数值计算方法求出它的近似解.数学模型的精确解与数值计算方法的近似解之间的误差称为截断误差.例如利用泰勒公式可以将函数 e^x 表示为

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} e^{\theta x}, \quad 0 < \theta < 1.$$

对给定的 x 要计算函数值 e^x 时,可以采用近似公式

$$e^x \approx I = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!},$$

则此近似公式的截断误差为

$$R = e^x - I = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} e^{\theta x}, \quad 0 < \theta < 1.$$

4. 舍入误差

由于计算机的字长有限,对超过位数的数字要进行舍入,由此产生的误差称为舍入误差.例如用 2.718 28 作为无理数 e 的近似值产生的误差就是舍入误差.

截断误差和舍入误差(包括原始数据的误差)将是数值近似方法误差分析的主要研究对象,讨论它们在计算过程中的传播对计算结果的影响,并找出误差的界,对研究误差的渐进特性和改进算法近似程度具有重大的实际意义.

1.2.2 误差的概念和有效数字

定义 1.1 设某数的精确值为 x^* , 其近似值为 x , 那么 x^* 与 x 之差

$$E = x^* - x$$

称为近似值 x 的绝对误差,简称误差.显然误差是可正可负的.

一般地,某数的精确值 x^* 是不知道的,因而 E 不能求出.但往往可以估计出它的大小范围,亦即可以确定一个正数 ϵ ,使得

$$|E(x)| = |x - x^*| \leq \epsilon.$$

此时,称 ϵ 为 x 的绝对误差限.有时也用

$$x^* = x \pm \epsilon$$

表示近似值 x 的精确值 x^* 或精确值 x^* 的所在范围.绝对误差是有单位的.例如,用有毫米刻度的米尺去测量一长度为 x^* 的物体,得其近似值为 x ,那么 x^* 与 x 之差的绝对误差限为 0.5 mm,即

$$|x^* - x| \leq 0.5 \text{ mm}.$$

由于对各种不同的问题进行测量后所得的结果,其数值相差很大,用绝对误差去衡量这个结果的好坏是不客观的.例如甲用米尺测量 10 m 长的物体,所产生的绝对误差为 2 cm,乙用同一米尺测量 1 m 长的物体,所产生的绝对误差为 1 cm,单凭绝对误差的大小就说明乙测量的精确度比甲好,显然是不对的.很明显,测

量 1 m 时绝对误差为 1 cm 比测量 10 m 时绝对误差为 2 cm 的精确度要差. 这说明一个近似值的精确度除了要看绝对误差的大小外, 还与精确值本身的大小有关. 记

$$E_r(x) = \frac{E(x)}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*},$$

称 $E_r(x)$ 为近似值 x 的相对误差. 由于精确值 x^* 一般不知道, 实际计算时通常取

$$E_r(x) = \frac{x^* - x}{x}$$

作为近似值 x 的相对误差.

若能求出一个正数 ϵ_r , 使得 $|E_r(x)| \leq \epsilon_r$, 则 ϵ_r 称为近似值 x 的相对误差限. 相对误差是无量纲的数, 通常用百分比表示.

根据上述定义可知, 甲测量时的相对误差

$$|E_r(x)| = \frac{2}{1000} = 0.2\%.$$

乙测量时的相对误差

$$|E_r(x)| = \frac{1}{100} = 1\%.$$

可见甲测量结果比乙精确. 所以, 在分析误差时, 相对误差更能刻画误差的特性.

大家知道, 当数值 x 有很多位数时, 由于计算机字长的限制, 常常按“四舍五入”原则得到 x^* 的近似值 x . 例如 $e = 2.718\,281\,8\dots$, 按四舍五入取三位小数, 得 e 的近似值 2.72; 取 6 位小数, 得近似值为 2.718 28. 不管取几位小数, 所得到的近似值, 其绝对误差都不会超过其末位数的半个单位, 即

$$|e - 2.72| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2},$$

$$|e - 2.718\,28| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-6}.$$

下面我们将四舍五入抽象成数学语言, 并引入一个新的名词

“有效数字”来描述它.

定义 1.2 如果近似值 x 的误差限是某一位的半个单位, 该位到 x 的第一位非零数字共有 n 位, 则称 x 有 n 位有效数字.

任何一个实数 x^* , 经四舍五入后得到的近似值 x 都可以表示为如下标准形式:

$$\begin{aligned} x &= \pm (a_1 \times 10^{-1} + a_2 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n}) \times 10^m \\ &= \pm 0. a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m, \end{aligned} \quad (1.4)$$

如果其绝对误差限满足

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n},$$

则称近似值 x 具有 n 位有效数字, 其中 m 位整数, $a_i \in \{0, 1, \cdots, 9\}$, $i = 1, 2, \cdots, n$, 且 $a_1 \neq 0$.

根据有效数字的定义, 容易验证 e 的近似值 2.71828 具有 6 位有效数字. 事实上,

$$\begin{aligned} 2.71828 &= (2 \times 10^{-1} + 7 \times 10^{-2} + 1 \times 10^{-3} + 8 \times 10^{-4} \\ &\quad + 2 \times 10^{-5} + 8 \times 10^{-6}) \times 10. \end{aligned}$$

这里 $m = 1$, $n = 6$, 而

$$|e - 2.71828| = 0.000001828\cdots < \frac{1}{2} \times 10^{-5},$$

所以它具有 6 位有效数字. 有效数字不但给出了近似值的大小, 而且还给出了它的绝对误差限. 例如近似值 2537.48, 0.342×10^{-2} ,

0.3420×10^{-2} 的绝对误差限分别为 $\frac{1}{2} \times 10^{-2}$, $\frac{1}{2} \times 10^{-5}$, $\frac{1}{2} \times 10^{-6}$.

特别要注意有效数字的指数记法, 0.342×10^{-2} 与 0.3420×10^{-2} 是有区别的两个近似数, 前者具有 3 位有效数字, 而后者则具有 4 位有效数字.

有效数字与绝对误差、相对误差有如下关系:

(1) 若某数 x^* 的近似值 x 有 n 位有效数字, 那么, 这个近似值 x 的绝对误差限为