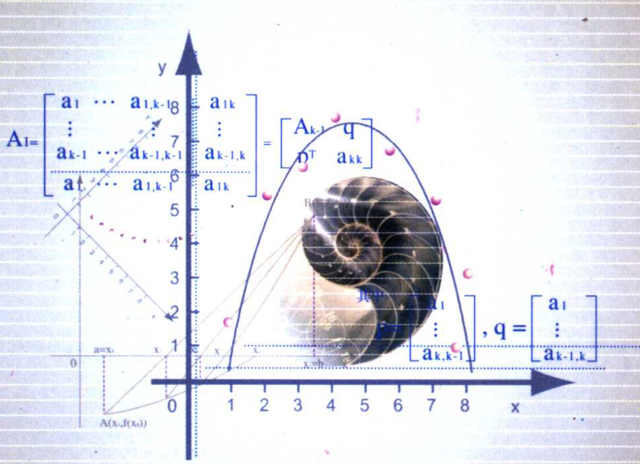
高等学校教材

计算方法

王世儒　王金金
冯有前　李彦民　编著



西安电子科技大学出版社
http://www.xduph.com

高等学校教材

计算方法

王世儒　王金金
冯有前　李彦民
编著

西安电子科技大学出版社

(陕)新登字 010 号

内 容 简 介

本教材是根据工科“计算方法”课程的教学大纲的要求而编写的。其内容包括绪论、线性方程组的数值解法、方程的近似根求法、插值与数据拟合、数值积分与数值微分、常微分方程初值问题的数值解法、矩阵的特征值与特征向量的计算等。在内容讲解上注意了深入浅出地介绍重要的概念和对计算方法的归纳总结，并配有丰富的例题。每章后附有习题。

本教材可供工科类各专业本科、专科学生使用，也可作为各类工程技术人员的学习参考书。

高等学校教材

计 算 方 法

王世儒　王金金
冯有前　李彦民　编著

责任编辑　李惠萍

西安电子科技大学出版社发行

地址：西安市太白南路 2 号　邮编：710071

西安兰翔印刷厂印刷

各地新华书店经销

开本 850×1168　1/32　印张 7.125　字数 172 千字

1996 年 6 月第 1 版　2002 年 9 月第 6 次印刷　印数 20 001～26 000

ISBN 7-5606-0448-X/O·0027(课)　　定价：8.80 元

XDUP 0781001-6

前　言

随着科学技术特别是计算机技术的高速发展，利用计算机去计算各种数学模型的数值计算方法，已成为各类工程技术人员的必备知识。因此，随着高等学校教学改革的深入发展，“计算方法”课程在工科各类专业及各个层次的人材培养中越来越受到重视。为了适应这一新的形势需要，我们编写了《计算方法》这本书。

本书着重介绍工程计算中的常用算法，如线性代数中的线性方程组和矩阵的特征值与特征向量的数值解法，方程的近似根求法，代数插值与数据拟合，数值积分和数值微分，常微分方程初值问题的数值解法等。各章内容具有一定的相对独立性，可根据需要予以取舍。同时，各章都配有适当的例题与习题。阅读本书只需要具备高等数学及线性代数的基本知识即可。考虑到大学本科、专科及各类工程技术人员的需要，我们力求叙述清晰，概念和方法的引入深入浅出，语言流畅，通俗易懂。

本书是在西安电子科技大学编写的《计算方法》讲义的基础上，通过多次教学实践，广泛征求广大师生意见，经过补充修改而成的。参加编写和修订本书的有西安电子科技大学的王世儒教授、王金金副教授，空军导弹学院的冯有前副教授、李彦民等同志，全书由王世儒教授负责统稿。

本书由西安电子科技大学宋国乡教授和刘三阳教授主审，他们在认真审阅了原稿、推荐出版本书的同时，提出了许多宝贵的意见和建议。西安电子科技大学的应用数学系、出版社和教材科，空军导弹学院数学教研室等单位对本书的编写和出版给予了大力支持和帮助。在此我们对在本书编写过程中给予大力支持和

提出宝贵意见的所有同志表示衷心的感谢。

由于我们水平有限，书中的缺点和错误在所难免，诚恳希望读者批评指正，以便进一步修改和完善本书。

编　者

1995年10月

目　录

第1章　绪论

1.1　研究计算方法的必要性

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。计算方法既是一门古老的数学学科，同时又是一门新兴的数学学科，特别是当计算机自1946年问世以后，为了更有效地使用计算机，计算方法更显出其重要性。大家知道，计算机只能作加、减、乘、除等算术运算和逻辑运算，而数学运算的范围是极其广阔的，既有算术运算，也有代数运算，还有各种各样的函数运算。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，将数学公式转换成一系列相应的算法步骤，并由此出发编制出一个正确的计算程序，再上机计算才能得出有用的结果。

高等数学和线性代数为我们提供了解决各种数学问题的理论和公式，但是对实际问题的解决是远远不够的，例如要计算这样简单的一些定积分

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\,dx, \qquad \int_0^1 e^{-x^2}dx$$

等，由于原函数无法用初等函数的形式给出，从而牛顿—莱布尼兹公式便失去了作用，因此必须建立一套数值积分的计算方法。又如很多实际问题往往归结为求解一个线性方程组，其方程的未知量有时多达成千上万个，虽然线性代数中曾介绍过著名的克莱

姆法则，它在理论上十分完美，然而在实用上却一筹莫展，因此必须研究适合于计算机上使用的，计算量较少的求解线性方程组的算法和理论。可以毫无夸张地说，在生产实践和科学实验中建立的各种大量的数学模型，仅仅应用高等数学和线性代数中的数学公式来求解是不行的。要得到最后的结果，必须建立与之相应的一套数值计算方法，如插值，数值积分与数值微分，方程的近似解，微分方程的数值解法，线性方程组的数值解法，方阵的特征值和特征向量的数值解等等。

计算机的数值计算方法，对于自然科学和社会科学的发展及国防现代化建设都起着重要的推动作用。具有非凡计算能力的电子计算机从诞生时起，就与科学研究工作结下了不解之缘。可以说，近代尖端技术的发展是建立在计算机的基础上的，而计算机的数值计算方法的发展将会导致许多科学研究的新突破。

那么，什么是计算机的数值计算方法呢？数值计算方法已成为近代数学的一个重要分支，它专门研究数学问题的数值解法，其中包括方法的推导，对方法的描述以及对整个求解过程的分析。它不同于分析数学，分析数学主要研究运算规则和表达方式。而数值计算关心的是运算的数值方法和结果。如果数值方法选用不当，编写的计算程序所需的存贮量太大，就会超过计算机的存贮能力而无法运行，或是计算出的结果精确度不高而达不到要求，或是需要计算机花费太多的时间才能完成等等。但如果采用的数值方法较好，同样一台计算机就能发挥更大的作用。

因此，研究如何把数学模型归结为数值问题；如何制定较好的数值计算方法；如何估计一个给定算法的精度，分析误差在计算过程中的积累和传播；如何构造精度更高的算法，并研究算法的收敛性、稳定性等，就构成了数值计算方法的主要内容。

1.2 误差的基本概念

误差产生的原因是多方面的，大体可分为四种：

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略去次要因素，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。我们把数学模型与实际问题之间出现的这种误差称为**模型误差**。

2. 观测误差

数学模型中往往含有一些由观测得到的物理量，如电阻、电压、温度、长度等，而这些由观测得到的数据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**。例如用函数 $f(x)$ 的泰勒(Taylor)展开式的部分和 $S_n(x)$ 去近似 $f(x)$，其余项 R_n 就是真值 $f(x)$ 的截断误差。

4. 舍入误差

由于用计算机进行数值计算时，计算机的位数是有限的，因此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)将是数值计算方法的主要研究对象，讨论它们在计算过程中的传播和对计算结果的影响，并找出误差的界，对研究误差的渐近特性和改进算法的

近似程度具有重大的实际意义。

1.2.1 绝对误差

一个数的绝对误差是它的精确值减去它的近似值。设某一数的精确值为 x，其近似值为 x^*，那么 x 与 x^* 之差

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

称为近似值 x^* 的**绝对误差**，简称**误差**。

一般地，某数的精确值 x 是不知道的，因而 $E(x)$ 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 η，使得

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

此时，η 称为 x^* 的**绝对误差限**。有时也用

$$x = x^* \pm \eta$$

表示近似值 x^* 的精确值或精确值 x 的所在范围。绝对误差是有量纲单位的。

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

$$|x - x^*| \leqslant 0.5\ \mathrm{mm}$$

1.2.2 相对误差

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。例如某甲用米尺测量 10 m 长的物体，所产生的绝对误差为 4 cm，某乙用同一米尺测量 2 m 长的物体，所产生的绝对误差为 1 cm，那么，能否从绝对误差的大小就说明某乙测量的精确度比某甲好呢？显然这是不对的。除了要看绝对误差的大小外，还必须顾及被测物体本身的长短，这就需要引入相对误差的概念。

绝对误差与精确值之比，即

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

称为近似值 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 δ，使得 $|E_r(x)|\leqslant\delta$，则 δ 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，称为百分误差。

根据上述定义可知，某甲测量时的相对误差

$$|E_r(x)|=\frac{4}{1\ 000}=0.4\%$$

某乙测量时的相对误差

$$|E_r(x)|=\frac{1}{200}=0.5\%$$

可见某甲测量结果比某乙精确。所以，在分析误差时，相对误差更能刻画误差的特性。

1.2.3 有效数字

大家知道，当准确值 x 有很多位数时，常常按“四舍五入”原则得到 x 的近似值 x^*。例如 e=2.718 281 8…，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

$$|\mathrm{e}-2.72|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-2}$$

$$|\mathrm{e}-2.718\ 28|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-5}$$

下面我们将四舍五入抽象成数学语言，并引入一个新名词“有效数字”来描述它。

定义　若近似值 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**。

由于任何一个实数 x 经四舍五入后得到的近似值 x^* 都可以表示为

$$x^* = \pm (\alpha_1 \times 10^{-1} + \alpha_2 \times 10^{-2} + \cdots + \alpha_n \times 10^{-n}) \times 10^m \tag{1.1}$$

所以若其绝对误差限满足

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

则称近似值 x^* 具有 n 位有效数字，其中 m 为整数，α_1 是 1～9 中的一个数字，α_2，…，α_n 是 0～9 中的一个数字。

根据上述有效数字的定义，容易验证 e 的近似值 2.718 28 具有 6 位有效数字。事实上，

$$\begin{aligned}2.718\,28 = (&2 \times 10^{-1} + 7 \times 10^{-2} + 1 \times 10^{-3} \\ &+ 8 \times 10^{-4} + 2 \times 10^{-5} + 8 \times 10^{-6}) \times 10\end{aligned}$$

这里 $m=1$，$n=6$。因为

$$|\mathrm{e} - 2.718\,28| = 0.000\,001\,828\cdots < \frac{1}{2} \times 10^{-5}$$

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。如有效数字 2 537.48，0.342×10^{-2}，$0.342\,0\times10^{-2}$的绝对误差限分别为$\frac{1}{2}\times10^{-2}$，$\frac{1}{2}\times10^{-5}$，$\frac{1}{2}\times10^{-6}$。特别要注意有效数字的指数记法，0.342×10^{-2}与 $0.342\,0\times10^{-2}$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

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

由此看出，当 m 相同时，n 越大，则 10^{m-n} 越小，从而**有效位数越多，其绝对误差限越小。**

(2) 用式(1.1)表示的近似数 x^*，若 x^* 具有 n 位有效数字，则其相对误差限为

$$|E_r^*(x)| \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

反之，若 x^* 的相对误差限为

$$|E_r^*(x)| \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字。

证明 由(1)知，若 x^* 具有 n 位有效数字，则

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

从而

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

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

反之，若 x^* 的相对误差限为

$$|E_r^*(x)| \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

则由于

$$|E(x)| = |x^*| \cdot |E_r^*(x)|$$

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

故

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

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

所以 x^* 至少具有 n 位有效数字。

由(2)可以看出，**有效位数越多，相对误差限就越小**。就是说，若近似数的有效位数越多，用这个近似数去近似代替准确值，其精度就越高。

1.3 选用和设计算法应注意的问题

利用电子计算机求数学模型的数值解，必须先设计算法，而算法的好坏，直接影响到计算机的使用效率，也影响到数值结果是否真实。一般衡量算法的标准有：算法是否稳定；算法的逻辑结构是否简单；算法的运算次数和算法的存贮量是否尽量少等等。当这些要求不能兼备时，应根据需要，权衡利弊而作决择。一般地，选用和设计算法应注意如下几个问题。

1. 选用数值稳定的计算公式

一个算法是否稳定，是十分重要的。如果算法不稳定，那么数值计算的结果就会严重背离数学模型的真实结果。下面我们通过一个例子加以说明。

计算定积分

$$I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n e^x dx, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{1.2}$$

利用分部积分法不难求得 I_n 的递推关系式为

$$\begin{cases} I_n = 1 - nI_{n-1} \\ I_0 = 1 - e^{-1} \approx 0.632\,1 \end{cases} \tag{1.3}$$

由(1.3)式可依次算得如下结果：

$$I_0 = 0.632\,1, \quad I_1 = 0.368\,0, \quad I_2 = 0.264\,0,$$
$$I_3 = 0.208\,0, \quad I_4 = 0.168\,0, \quad I_5 = 0.160\,0,$$
$$I_6 = 0.040\,0, \quad I_7 = 0.720\,0, \quad I_8 = -0.728\,0$$

因为 $$0 < I_n < e^{-1}\max_{0\leqslant x\leqslant 1}(e^x)\cdot\int_0^1 x^n dx = \frac{1}{n+1} \tag{1.4}$$

由上面 I_n 的不等式可看出