



高等学校精品规划教材

# 计算方法

主编 杨涛 王爱茹 王增辉  
主审 杨勇

JISUAN FANGFA



中国水利水电出版社  
[www.waterpub.com.cn](http://www.waterpub.com.cn)

高等学校精品规划教材

# 计算方法

主编 杨 涛 王爱茹 王增辉

副主编 贾 鹏 金 莉 徐 静

苏恒强 万保成

参 编 罗海燕 宋 平 李红智

畅娜丽 刘峰涛

主 审 杨 勇



中国水利水电出版社

[www.waterpub.com.cn](http://www.waterpub.com.cn)

## 内 容 提 要

本书是《高等学校精品规划教材》之一。全书共分九章，主要内容包括：解线性方程组的直接方法，解线性方程组的迭代法，非线性方程与非线性方程组解法，矩阵特征值和特征向量的计算，插值与逼近，数值积分与微分，常微分方程数值解法，偏微分方程的差分方法等。主要介绍科学计算中常用的数值计算方法，并简明介绍各种算法的基本思想与原理。

本书可作为计算机科学与技术专业及非计算机专业硕士研究生计算方法课程教材，也可作为理工科院校非数学专业计算方法、数值分析课程的教材，还可供广大工程科技人员参考。

## 图书在版编目 (CIP) 数据

计算方法 / 杨涛，王爱茹，王增辉主编. —北京：中国水利水电出版社，2005  
高等学校精品规划教材  
ISBN 7-5084-3115-4

I. 计… II. ①杨… ②王… ③王… III. 计算方法—高等学校—教材 IV. 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 089080 号

书 名	高等学校精品规划教材 <b>计算方法</b>
作 者	主编 杨涛 王爱茹 王增辉 主审 杨勇
出版 发行	中国水利水电出版社 (北京市三里河路 6 号 100044) 网址：www.waterpub.com.cn E-mail：sales@waterpub.com.cn 电话：(010) 63202266 (总机)、68331835 (营销中心)
经 售	全国各地新华书店和相关出版物销售网点
排 版	中国水利水电出版社微机排版中心
印 刷	北京市兴怀印刷厂
规 格	787mm×1092mm 16 开本 10.25 印张 243 千字
版 次	2005 年 8 月第 1 版 2005 年 8 月第 1 次印刷
印 数	0001—4000 册
定 价	<b>17.00 元</b>

凡购买我社图书，如有缺页、倒页、脱页的，本社营销中心负责调换

版权所有·侵权必究

# 前　　言

科学计算已成为理论分析与科学实验之外第三种科学研究的方法与手段，科学计算能力是 21 世纪人才必须具备的一种基本能力。计算方法课程在培养学生科学计算能力方面具有不可替代的作用。

本书是《高等学校精品规划教材》之一。可作为计算机科学与技术专业及非计算机专业硕士研究生计算方法课程教材。主要介绍科学计算中常用的数值计算方法，并简明介绍各种算法的基本思想与基本原理。

本书共分九章，讲授全部内容约需 80 学时。教师可根据教学需要及学生的实际情况，选择教学内容。

参加本书编写人员有：沈阳农业大学杨涛、金莉、徐静、罗海艳、宋平，河北农业大学王爱茹、贾鹏、李红智、畅娜丽、刘峰涛，吉林农业大学王增辉、苏恒强、万保成。全书由沈阳农业大学杨勇教授主审。

由于编者水平有限，书中疏漏和不足之处在所难免，恳请读者批评指正。

编　者

2005 年 7 月

# 目 录

## 前言

<b>第1章 绪论</b>	1
1.1 计算方法研究的对象和内容	1
1.2 误差来源和分类	1
1.2.1 模型误差	1
1.2.2 观测误差	2
1.2.3 方法误差	2
1.2.4 舍入误差	2
1.3 绝对误差、相对误差与有效数字	2
1.4 数值计算中的若干原则	4
1.4.1 避免两个相似的数相减	4
1.4.2 防止大数“吃掉”小数	5
1.4.3 绝对值太小的数不宜作除数	5
1.4.4 注意简化计算程序	5
1.4.5 选用数值稳定的算法	6
习题1	7
<b>第2章 解线性方程组的直接法</b>	8
2.1 Gauss 消去法	8
2.1.1 Gauss 顺序消去法	8
2.1.2 Gauss 主元消去法	11
2.2 三角分解法	12
2.2.1 Doolittle 分解法	12
2.2.2 平方根法	15
2.2.3 追赶法	17
2.3 误差分析	18
2.3.1 向量范数	18
2.3.2 矩阵范数	19
2.3.3 线性方程组固有性态与条件数	20
习题2	23

<b>第3章 线性方程组的迭代法</b>	26
3.1 Jacobi 迭代法	26
3.2 Seidel 迭代法	27
3.3 松弛法——SOR 法	28
3.4 迭代法的一般形式与收敛性	29
习题 3	32
<b>第4章 非线性方程与非线性方程组解法</b>	34
4.1 二分法	34
4.2 简单迭代法	36
4.2.1 简单迭代法的一般形式	36
4.2.2 简单迭代法的收敛条件	37
4.2.3 简单迭代法的误差分析和收敛阶	38
4.3 Newton 迭代法	40
4.3.1 Newton 迭代法的迭代公式	40
4.3.2 Newton 迭代法收敛性	41
4.3.3 Newton 迭代法变形	42
4.4 解非线性方程组的 Newton 迭代法	43
习题 4	44
<b>第5章 矩阵特征值和特征向量的计算</b>	46
5.1 幂法	46
5.2 原点平移法	50
5.3 反幂法	52
5.4 Jacobi 方法	53
5.4.1 平面旋转变换	53
5.4.2 Jacobi 方法	54
习题 5	58
<b>第6章 插值与逼近</b>	59
6.1 Lagrange 插值多项式	59
6.1.1 插值多项式	59
6.1.2 Lagrange 插值多项式	60
6.1.3 插值多项式的余项	63
6.2 Newton 插值多项式	65
6.2.1 差商	65
6.2.2 Newten 插值公式	66
6.2.3 差分	68
6.2.4 等距节点插值公式	69
6.3 Hermite 插值多项式	71

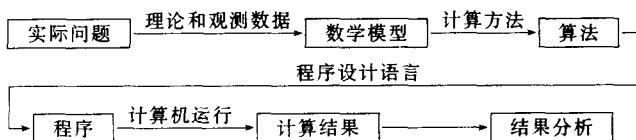
6.3.1 Hermite 插值 .....	71
6.3.2 Hermiter 插值的误差估计 .....	72
6.4 分段插值多项式 .....	74
6.4.1 分段线性插值 .....	74
6.4.2 Hermite 分段插值多项式 .....	76
6.5 Spline 插值 .....	77
6.5.1 三次样条插值函数的概念 .....	77
6.5.2 三次样条插值函数的求法 .....	78
6.6 数据拟合的最小二乘法 .....	81
6.6.1 最小二乘法 .....	81
6.6.2 多项式拟合 .....	81
习题 6 .....	82
<b>第 7 章 数值积分与微分 .....</b>	<b>84</b>
7.1 Newton-Cotes 公式 .....	84
7.1.1 梯形公式 .....	85
7.1.2 Simpson 公式 .....	86
7.1.3 Newton-Cotes 公式 .....	87
7.2 复化积分公式 .....	90
7.2.1 复化梯形公式 .....	90
7.2.2 复化 Simpson 公式 .....	90
7.3 Gauss 型求积公式 .....	93
7.3.1 Gauss-Legendre 求积公式 .....	97
7.3.2 Gauss-Chebyshev 求积公式 .....	99
7.4 数值微分 .....	100
7.4.1 用 Taylor 展开式求数值微分公式 .....	101
7.4.2 用插值多项式求微商 .....	102
习题 7 .....	103
<b>第 8 章 常微分方程数值解法 .....</b>	<b>105</b>
8.1 引言 .....	105
8.2 Euler 方法 .....	105
8.2.1 Euler 公式 .....	105
8.2.2 改进的 Euler 方法 .....	107
8.2.3 差分公式的误差分析 .....	109
8.2.4 Taylor 展开方法 .....	109
8.3 Runge-Kutta 方法 .....	110
8.4 单步方法的收敛性和稳定性 .....	114
8.4.1 单步方法的收敛性 .....	114

8.4.2 单步方法的稳定性 .....	115
8.5 线性多步方法 .....	117
8.5.1 利用待定参数法构造线性多步方法 .....	117
8.5.2 利用数值积分构造线性多步方法 .....	118
8.6 常微分方程组与高阶微分方程的数值解法 .....	120
8.6.1 一阶常微分方程组的数值解法 .....	120
8.6.2 化高阶方程为一阶方程组 .....	122
习题 8 .....	123
<b>第 9 章 偏微分方程的差分方法</b> .....	<b>126</b>
9.1 椭圆型方程边值问题的差分方法 .....	126
9.1.1 差分方程的建立 .....	126
9.1.2 一般区域的边界条件处理 .....	128
9.2 抛物型方程的差分方法 .....	129
9.2.1 一维问题 .....	129
9.2.2 差分格式的稳定性 .....	134
习题 9 .....	135
部分习题答案 .....	137
附录 .....	143
参考文献 .....	155

# 第1章 绪 论

## 1.1 计算方法研究的对象和内容

计算方法是研究科学计算中各种数学问题求解的数值计算方法。随着计算机技术的发展和计算数学方法与理论的日益成熟，科学计算已成为理论分析和科学实验外第三种科学的研究方法和手段。科学计算的工具是计算机，其理论基础是计算数学。用计算机进行科学计算，其基本过程如下：



根据数学模型，建立求解问题的数值计算方法并进行方法的理论分析，直到编制出算法程序上机计算出结果，并对计算结果进行分析，这一过程就是计算方法研究的对象和任务。因此，计算方法就是研究用计算机解决数学问题的数值计算方法及其理论。计算方法与其他数学分支相比，更注重理论与计算机实际计算的结合，具体地说，计算方法首先要构造可解的数学模型（算法）；其次，分析方法的可靠性；然后，要分析方法的效率，即分析比较求解同一问题的各种方法的时间效率与空间效率。应当指出，计算方法的构造和分析是密切相关、不可分割的。

对于给定的数学问题，常常可以提出各种各样的数值计算方法。一般说来，一个好的数值计算方法应具有如下特点：

- (1) 结构简单，易于计算机程序实现。
- (2) 有可靠的理论分析，理论上可保证方法的收敛性和数值稳定性。
- (3) 算法效率高，即算法的时间效率与空间效率高。
- (4) 经过实际检验。

在学习计算方法时，我们要掌握计算方法的基本原理和思想；注意方法处理的技巧及其与计算机的结合；重视误差分析，了解算法的收敛性及稳定性。此外，还要通过应用数值方法进行编程计算，以此来提高应用各种数值方法解决实际问题的能力。

## 1.2 误 差 来 源 和 分 类

从实际问题出发，一直到计算出问题的结果，在这个过程中每个步骤都可能产生误差。误差按照它们的来源可分为模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差四种。

### 1.2.1 模型误差

反映实际问题有关量之间的关系的数学公式或方程，即数学模型，通常只是近似的，

因为用数学模型来描述具体的物理现象要做许多简化，因此数学模型本身就包含误差。数学模型的解与实际问题解之间的误差称为模型误差。

### 1.2.2 观测误差

数学模型中往往包含一些观测数据，它们的值往往是通过观测和实验得到的，难免带有误差。这种观测数据与实际数据之间的误差称为观测误差。

### 1.2.3 方法误差

由于数学模型往往比较复杂，求解数学模型所用的数值方法一般是一种近似方法，只能得到数学模型的近似解。数学模型的准确解与用数值方法求得的解之间的误差称为方法误差或截断误差。例如，利用 Taylor 公式，函数  $e^x$  可表示为

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

对给定的  $x$ ，要计算函数值  $e^x$  时，可采用近似公式

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

那么此近似公式的截断误差为

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

### 1.2.4 舍入误差

由于计算机的字长有限，参加运算的数据以及运算结果在计算机上存放时，计算机会按舍入原则舍去每个数据在字长之外的数字，从而产生误差，这种误差称为舍入误差。例如，在十进制十位的限制下，会出现

$$1.000003^2 - 1.000006 = 0$$

这个结果不是准确的，准确地结果应是  $9 \times 10^{-12}$ 。这里所产生的误差就是计算舍入误差。

在计算方法中，主要研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响。

## 1.3 绝对误差、相对误差与有效数字

设  $x$  是精确值  $x^*$  的一个近似值，记

$$e = x^* - x$$

称  $e$  为近似值  $x$  的绝对误差，简称误差。如果  $\epsilon$  为  $|e|$  的一个上界，即

$$|e| \leq \epsilon$$

则称  $\epsilon$  为近似值  $x$  的绝对误差限或绝对误差界，简称误差限或误差界。精确值  $x^*$ 、近似值  $x$  和误差限  $\epsilon$  三者的关系是： $x - \epsilon \leq x^* \leq x + \epsilon$ ，这表明  $x^*$  在区间  $[x - \epsilon, x + \epsilon]$  上，通常记为

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

例如， $x = 1.414$  作为无理数  $\sqrt{2}$  的一个近似值，它的绝对误差是

$$e = \sqrt{2} - 1.414$$

易知

$$|e| \leq 0.00022$$

所以， $x=1.414$  作为  $x^* = \sqrt{2}$  的一个近似值，它的绝对误差限为

$$\epsilon = 0.00022$$

用绝对误差来刻画近似值的精确程度不能说明近似的好坏程度，因为它没有反映出它相对于精确值的大小。例如，两个量  $x^*$  和  $y^*$  与它们的近似值  $x$  和  $y$  分别为

$$\begin{array}{ll} x^* = 10 & x = 10 \pm 1 \\ y^* = 10000 & y = 1000 \pm 5 \end{array}$$

则有误差限

$$\epsilon_x = 1$$

$$\epsilon_y = 3$$

虽然  $\epsilon_y$  是  $\epsilon_x$  的 5 倍，但在 10000 内差 5 显然比 10 内差 1 更精确些。这说明一个近似值的精确程度除了与绝对误差有关外，还与精确值的大小有关，即

$$e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$$

称  $e_r$  为近似值  $x$  的相对误差。由于  $x^*$  未知，实际使用时总是将  $x$  的相对误差取为

$$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x^* - x}{x}$$

$|e_r|$  的上界，即

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{|x|}$$

称为近似值  $x$  的相对误差限或相对误差界。

**【例 1.1】** 设  $x=2.18$  是由精确值  $x^*$  经过四舍五入得到的近似值。问： $x$  的绝对误差限  $\epsilon$  和相对误差限  $\epsilon_r$  各是多少？

解 根据四舍五入原则，应有

$$x^* = x \pm 0.005$$

所以

$$\epsilon = 0.005, \quad \epsilon_r = \frac{\epsilon}{|x|} = \frac{0.005}{2.18} \approx 0.23\%$$

凡是由精确值经过四舍五入得到的近似值，其绝对值误差限等于该近似值末位的半个单位。

**定义 1.1** 设数  $x$  是数  $x^*$  的近似值，如果  $x$  的绝对误差限是它的某一数位的半个单位，并且从  $x$  左起第一个非零数字到该数位共有  $n$  位，则称这  $n$  个数字为  $x$  的有效数字，也称用  $x$  近似  $x^*$  时具有  $n$  位有效数字。

**【例 1.2】** 已知下列近似值的绝对误差限都是 0.005，即

$$a = 2.16, \quad b = -0.06537, \quad c = 0.0031$$

问：这些近似值有几位有效数字？

解 由于 0.005 是近似值小数点后第 2 个数位的半个单位，则根据上述定义可知： $a$  有三位有效数字 2、1、6； $b$  有一位有效数字 6； $c$  没有有效数字。

数  $x$  总可以写成如下形式

$$x = \pm 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_k \times 10^m$$

其中  $m$  是整数,  $\alpha_i$  ( $i=1, 2, \dots, k$ ) 是  $0 \sim 9$  中的一个数字,  $\alpha_1 \neq 0$ 。根据上述定义容易推得,  $x$  作为  $x^*$  的近似具有  $n$  位 ( $n \leq k$ ) 有效数字, 则有

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \quad (1.1)$$

由此可知, 近似值的有效数字越多, 它的绝对误差就越小, 近似值的精确程度也就越高。

**【例 1.3】** 为了使  $x^* = \sqrt{20}$  的近似值的绝对误差小于  $10^{-3}$ , 问应取几位有效数字?

解 由于  $\sqrt{20} = 4.4\dots$ , 则近似值  $x$  可写为

$$x = 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_k \times 10 \quad \alpha_1 = 4 \neq 0$$

根据式 (1.1), 令

$$\frac{1}{2} \times 10^{1-n} \leq 10^{-3}$$

故取  $n=4$ , 即取四位有效数字, 此时  $\sqrt{20} = 4.472135\dots$  的具有 4 位有效数字的近似值为  $x = 4.472$ 。

值得注意的是, 按有效数字概念, 数 1.14001 的两个近似值 1.14 和 1.1400 是有区别的, 前者有三位有效数字, 后者有五位有效数字, 因而后的精确程度比前者更高。精确值的有效数字可认为有无限多位。

## 1.4 数值计算中的若干原则

应用计算机进行数值计算时, 由于计算机的字长有限, 只能保留有限个有效数字, 因而每一步计算都可能产生误差, 比如计算舍入误差, 在反复多次的计算过程中, 将产生误差的传播和积累。当误差积累过大时, 会导致计算结果失真。因而, 为减少舍入误差的影响, 设计算法时应遵循如下一些原则。

### 1.4.1 避免两个相似的数相减

在数值计算中, 两个相近的数相减会使有效数字受到损失, 有效数位减少。例如,  $x = 6.253$ ,  $y = 6.248$  都有四位有效数字, 但  $x - y = 0.005$  却仅有一位有效数字。

事实上, 如果  $x^*$ ,  $y^*$  的近似值分别为  $x$ ,  $y$ , 则  $z = x - y$  是  $z^* = x^* - y^*$  的近似值, 此时, 相对误差满足估计

$$|e_r(z)| = \left| \frac{z^* - z}{z} \right| \leq \left| \frac{x}{x-y} \right| |e_r(x)| + \left| \frac{y}{x-y} \right| |e_r(y)|$$

可见, 当  $x$  与  $y$  非常接近时,  $x - y$  作为  $x^* - y^*$  的近似值其相对误差有可能很大。

在数值计算中, 如果遇到两个相近的数相减运算, 可考虑变换计算公式以避免两相近的数相减, 例如:

当  $x_1$  与  $x_2$  接近时

$$\log x_1 - \log x_2 = \log \frac{x_1}{x_2}$$

当  $x$  接近零时

$$1 - \cos x = 2 \sin^2 \frac{x}{2}$$

$$\text{当 } x \gg 0 \text{ 时} \quad \sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}$$

如果找不到适当方法，可考虑在计算机上采用双倍字长计算，以增加有效数字，提高精度。

### 1.4.2 防止大数“吃掉”小数

参加计算的数，有时数量级相差很大，如果不注意采取相应措施，在它们的加、减运算中，绝对值很小的数往往被绝对值较大的数“吃掉”，不能发挥其作用，造成计算结果失真。例如，在八位十进制计算机上计算

$$A = 83281316 + 0.2 + 0.8$$

此时，按照加法浮点运算的对阶规则，应有

$$A = 0.83281316 \times 10^8 + 0.000000002 \times 10^8 + 0.000000008 \times 10^8$$

由于计算机只能存放八位十进制数，上式中后两个数在计算机上变成“机器零”，计算结果为

$$A = 0.83281316 \times 10^8 = 83281316$$

即相对小数 0.2 和 0.8 已被大数 83281316 吃掉，计算结果失真。如果改变计算次序，先将两个小数相加得到整数 1，再进行整数加法运算，就可避免上述现象，此时

$$A = (0.2 + 0.8) + 83281316 = 1 + 83281316 = 83281317$$

### 1.4.3 绝对值太小的数不宜作除数

在计算过程中，用绝对值很小的数作除数会使商的数量级增加，假设  $x^*$  和  $y^*$  的近似值分别是  $x$  与  $y$ ，则  $z^* = \frac{x^*}{y^*}$  的近似值是  $z = \frac{x}{y}$ ，此时， $z$  的绝对误差为

$$|e(z)| = |z^* - z| = \left| \frac{(x^* - x)y + x(y - y^*)}{y^* y} \right| \approx \frac{|y| |e(x)| + |x| |e(y)|}{|y|^2}$$

可见，当  $|y|$  很小时， $z$  的绝对误差可能很大，此外，当商过大时，其数值可能超出计算机表示的范围发生上溢，或者作为一个大数吃掉参与运算的一些小数，使计算产生更大的舍入误差。

### 1.4.4 注意简化计算程序

算法的简化非常重要，若方法选取得当，则不仅可提高计算速度，也可减少误差积累。例如，对给定的  $x$ ，计算多项式

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

的值。如果采用逐项计算然后相加的算法

$$\begin{cases} u_k = a_k x^k & k = 0, 1, \dots, n \\ p_n(x) = u_0 + u_1 + \cdots + u_n \end{cases}$$

所需的乘法次数为

$$1 + 2 + \cdots + (n-1) + n = \frac{n(n+1)}{2}$$

加法次数为  $n$ 。如果把  $p_n(x)$  改写为

$$p_n(x) = (\cdots((a_n x + a_{n-1}) x + a_{n-2}) x + \cdots) x + a_0$$

采用如下算法

$$\begin{cases} w_n = a_n \\ w_k = w_{k+1}x + a_k & k = n-1, \dots, 1, 0 \\ p_n(x) = w_0 \end{cases}$$

则只需  $n$  次乘法和  $n$  次加法运算。

#### 1.4.5 选用数值稳定的算法

一种数值算法，如果其计算舍入误差积累是可控制的，则称其为数值稳定的。反之称为数值不稳定的。数值不稳定的算法没有实用价值，考虑积分计算

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

利用分部积分法可得计算  $I_n$  的递推公式

$$I_n = 1 - nI_{n-1} \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.2)$$

注意  $n=0$  时

$$I_0 = \int_0^1 e^{x-1} dx = 1 - e^{-1} = 0.63212055\dots$$

取  $I_0$  具有四位有效数字的近似值  $I_0 \approx 0.6321$ ，按式 (1.2) 递推计算，可得到  $I_n$  的计算值  $I_0, I_1, \dots, I_9$  如下：

$$\begin{aligned} & 0.6321, 0.3679, 0.2642, 0.2074, 0.1704, \\ & 0.1480, 0.1120, 0.2160, -0.7280, 7.5520 \end{aligned}$$

由计算结果可见，虽然初始值  $I_0$  的近似误差不超过  $\frac{1}{2} \times 10^{-4}$ ，但随着计算步数的增加  $I_n$  的

计算值已严重偏离了  $I_n$  的精确值。比如，对任何  $n$  都有  $I_n > 0$ ，但  $I_8$  的计算值已为负值。发生这种现象的原因是，算法式 (1.2) 是数值不稳定的，不能控制住误差的传播和积累。事实上，设  $I_n^*$  是由精确的初始值  $I_0^* = 1 - e^{-1}$  按式 (1.2) 精确计算得到的，即

$$I_0^* = 1 - e^{-1}, \quad I_n^* = 1 - nI_{n-1}^* \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.3)$$

由式 (1.2) 和式 (1.3) 可得

$$I_n - I_n^* = -n(I_{n-1} - I_{n-1}^*) = \dots = (-1)^n n!(I_0 - I_0^*)$$

由此可见，初始近似微小的误差随着计算步数的增加将迅速放大，最终使计算结果失真。

如果将计算公式 (1.2) 改写为

$$I_{n-1} = \frac{1}{n}(1 - I_n) \quad n = k, k-1, \dots, 1 \quad (1.4)$$

由  $I_n$  的一个估计值倒推计算，仍按上述分析可得

$$I_k - I_k^* = (-1)^{n-k} \frac{k!}{n!} (I_n - I_n^*) \quad k = n, n-1, \dots, 1, 0$$

这表明，随着计算步数的增加初始近似误差  $I_n - I_n^*$  是可控制的。因而算法式 (1.4) 是数值稳定的。例如，当  $0 \leq x \leq 1$  时， $e^{-1} \leq e^{x-1} \leq 1$ ，则可得到  $I_9$  的估计

$$\frac{e^{-1}}{10} \leq I_9 = \int_0^1 x^9 e^{x-1} dx \leq \frac{1}{10}$$

取近似值  $I_9 \approx \frac{1}{2}(\frac{e^{-1}}{10} + \frac{1}{10}) = 0.0684$ ，按计算公式 (1.4) 倒推计算得到  $I_9, I_8, \dots, I_0$

的计算值为

$$0.0684, 0.1035, 0.1121, 0.1268, 0.1455,$$

$$0.1709, 0.2073, 0.2642, 0.3679, 0.6321$$

可见  $I_0 = 0.6321$  已精确到小数点后四位。

## 习 题 1

1-1 下列各数都是经过四舍五入得到的近似值，试分别指出它们的绝对误差限，相对误差限和有效数字的位数。

$$x_1 = 5.420, x_2 = 0.5420, x_3 = 0.005420, x_4 = 6000, x_5 = 0.6 \times 10^5$$

1-2 下列近似值的绝对误差限都是 0.005，即

$$a = -1.00031, b = 0.042, c = -0.00032$$

试指出它们有几位有效数字。

1-3 为了使  $\sqrt{10}$  的近似值的相对误差小于 0.01%，试问应取几位有效数字？

1-4 求方程  $x^2 - 56x + 1 = 0$  的两个根。使它们至少具有四位有效数字 ( $\sqrt{3132} \approx 55.964$ )。

1-5 若取  $\sqrt{783} \approx 27.983$  及初始值  $y_0 = 28$ ，按递推公式

$$y_n = y_{n-1} - \frac{1}{100} \sqrt{783} \quad n = 1, 2, \dots$$

计算  $y_{100}$ ，试估计  $y_{100}$  有多大误差。

1-6 设  $S = \frac{1}{2}gt^2$ ，假定  $g$  是精确的，而对时间  $t$  的测量有  $\pm 0.1$  s 的误差。证明：

当  $t$  增大时， $S$  的绝对误差增大而相对误差减少。

## 第 2 章 解线性方程组的直接法

本章研究的对象是  $n$  阶线性方程组

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{array} \right. \quad (2.1)$$

其矩阵形式为

$$AX = b \quad (2.1)'$$

其中,  $A = (a_{ij})$  是方程组的系数矩阵,  $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ ,  $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$  分别为方程组的未知向量和常数向量。所谓直接法, 就是在不计舍入误差时, 经过有限步运算能求得方程组精确解的方法。下面介绍几种较实用的直接法。

### 2.1 Gauss 消去法

#### 2.1.1 Gauss 顺序消去法

高斯 (Gauss) 消去法实质是消元法, 只是步骤规范, 便于编程。它的基本做法是把方程组 (2.1) 转化成一个等价的三角方程组

$$\left\{ \begin{array}{l} b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + \cdots + b_{1n}x_n = g_1 \\ b_{22}x_2 + \cdots + b_{2n}x_n = g_2 \\ \cdot \quad \quad \quad \vdots \\ \cdot \quad \quad \quad \vdots \\ b_{nn}x_n = g_n \end{array} \right. \quad (2.2)$$

这个过程称为消元。然后, 逐个求出  $x_n, x_{n-1}, \dots, x_1$ , 这个过程称为回代。

##### 2.1.1.1 高斯消去法的计算过程

为了符号统一, 把方程组 (2.1) 改写成下面形式

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)}x_1 + a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ \cdots \\ a_{n1}^{(1)}x_1 + a_{n2}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)} \end{array} \right. \quad (2.3)$$

用矩阵表示为

$$A^{(1)}X = b^{(1)} \quad (2.3)'$$

其中

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix}, \quad b^{(1)} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

若  $a_{11}^{(1)} \neq 0$ , 用第二个方程减去第一个方程的  $a_{21}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$  倍, 第三个方程减去第一个方程的  $a_{31}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$  倍, 等等。即得与式 (2.3) 等价的方程组

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ a_{32}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{3n}^{(2)}x_n = b_3^{(2)} \\ \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \\ a_{n2}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(2)}x_n = b_n^{(2)} \end{array} \right. \quad (2.4)$$

用矩阵表示为

$$A^{(2)}X = b^{(2)} \quad (2.4)'$$

其中

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad b^{(2)} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix}$$

令  $m_{ij} = a_{ij}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$  ( $i = 2, 3, \dots, n$ ), 则

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{ij}a_{1j}^{(1)} \quad i, j = 2, 3, \dots, n \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1}b_1^{(1)} \end{array} \right. \quad (2.5)$$

类似地, 若  $a_{22}^{(2)} \neq 0$ , (2.4) 中第  $i$  个方程减去第二个方程的  $a_{i2}^{(2)}/a_{22}^{(2)}$  倍, 得 (2.4) 的等价方程组

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ a_{33}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{3n}^{(3)}x_n = b_3^{(3)} \\ \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \\ a_{n3}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{nn}^{(3)}x_n = b_n^{(3)} \end{array} \right. \quad (2.6)$$

用矩阵表示为

$$A^{(3)}X = b^{(3)} \quad (2.6)'$$

其中

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} \end{bmatrix}, \quad b^{(3)} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(3)} \end{bmatrix}$$