

高等专科学校教材

# 计算方法

钱焕延 赵晓彬



西安电子科技大学出版社

高等专科学校教材

# 计 算 方 法

钱焕延 赵晓彬

~~电子科技大学出版社~~

## 内 容 简 介

本书由全国大专类计算机专业教材编审委员会推荐为大专计算机专业教材，也可供其它工科院校有关专业及从事计算机工作的技术人员选用、参考。

该教材从实用角度出发，介绍了计算方法的基本理论和基本方法，重点介绍了实际计算中常用的数值方法。其主要内容包括误差概念、一元非线性方程的解法、线性代数计算方法、插值法、数值积分和常微分方程数值解法等。该教材充分考虑到专科层次的教育特点，叙述由浅入深，内容精简，对常用的算法列出了计算步骤，并配有相应的计算框图，各章均配有一定数量的习题，便于读者自学。

高等专科学校教材

计 算 方 法

钱焕延 赵晓彬

责任编辑 王绍菊

---

西安电子科技大学出版社出版

西安电子科技大学印刷厂印刷

陕西省新华书店发行 各地新华书店经售

开本 850×1168 1/32 印张 9 字数 215 千字

1989年6月第1版 1989年6月第1次印刷 印数 1-5 000

---

ISBN7-5606-0073-5/TP·0025

定价：2.20元

## 出版说明

根据国务院关于高等学校教材工作分工的规定，我部承担了全国高等学校、中等专业学校工科电子类专业教材的编审、出版的组织工作。由于各有关院校及参与编审工作的广大教师共同努力，有关出版社的紧密配合，从1978年至1985年已编审、出版了两轮教材，正在陆续供给高等学校和中等专业学校教学使用。

为了使工科电子类专业能更好地适应“三个面向”的需要，贯彻“努力提高教材质量，逐步实现教材多样化，增加不同品种、不同层次、不同学术观点、不同风格、不同改革试验的教材”的精神，我部所属的七个高等学校教材编审委员会和两个中等专业学校教材编审委员会，在总结前两轮教材工作的基础上，结合教育形势的发展和教学改革的需要，制订了1986~1990年的“七五”（第三轮）教材编审出版规划，列入规划的教材、实验教材、教学参考书等近400种选题。这批教材的评选推荐和编写工作由各编委会直接组织进行。

这批教材的书稿，是从通过教学实践、师生反映较好的讲义中经院校推荐，由编审委员会（小组）评选择优产生出来的。广大编审者、各编审委员会和有关出版社为保证教材的出版和提高教材的质量，作出了不懈的努力。

限于水平的和经验，这批教材的编审、出版工作还会有缺点和不足之处，希望使用教材的单位，广大教师和同学积极提出批评建议，共同为不断提高工科电子类专业教材的质量而努力。

电子工业部教材办公室

## 前 言

本教材系按电子工业部制定的工科电子类专业教材 1986 年~1990 年编审出版规划,由大专类计算机教材编审委员会基础编审小组组织征稿、评选、推荐出版。

本教材由华东工学院钱焕延和南京有线电厂职工大学赵晓彬两位同志负责编写,上海科技大学潘仲雄教授担任主审。

本教材从实用角度出发,介绍了计算方法的基本理论和基本方法。其主要内容包括误差概念、一元非线性方程的数值解法、线性代数计算方法、插值法、数值积分、常微分方程数值解法和最优化方法等。该课程的参考学时数为 80 学时,而对只开设 60 学时的有关专业可略去教材中注有“\*”的有关章节。为了使读者熟练地掌握各种基本运算方法,教材对常用的算法列出了计算步骤,并配有相应的计算框图。此外,各章均配有一定数量的习题,以便于读者通过演习,进一步理解和掌握各章节的基本内容。编者汲取了多年来教学实践经验,在编写时考虑到专科层次的教育特点,力求使内容精选、文字简练、语言流畅,注意到理论与实际的结合,便于自学。

本教材由钱焕延编写第一、二、四、七章,赵晓彬编写第三、五、六章。参加编审工作的还有苏州师范专科学校周丁乃副教授、南京师范大学金炳陶副教授、上海科技专科学校娄玉琴副教授、湖南长沙水利电力学院数学系邱华吉副教授,他们对本书提出了许多宝贵意见,这里表示诚挚的感谢。由于编者水平有限,书中难免还存在一些缺点和错误,殷切希望广大读者批评指正。

编 者

1987 年于南京

# 目 录

## 第一章 误差

§ 1 误差 .....	1
1.1 误差的来源 .....	1
1.2 绝对误差和绝对误差限 .....	3
1.3 相对误差和相对误差限 .....	3
1.4 有效数字 .....	5
§ 2 算术运算结果的误差 .....	6
2.1 加减法 .....	6
2.2 乘除法 .....	8
§ 3 算法的数值稳定性 .....	9
3.1 算法稳定性问题的例 .....	9
3.2 改善算法稳定性的方法举例 .....	12
习题一 .....	15

## 第二章 一元非线性方程的数值解法

§ 1 初始近似根的确定 .....	19
§ 2 二分法 .....	21
§ 3 迭代法 .....	26
§ 4 牛顿法 .....	33
§ 5 近似牛顿法 .....	37
§ 6 迭代过程的加速 .....	39
习题二 .....	43

## 第三章 线性代数计算方法

§ 1 高斯消去法 .....	47
1.1 顺序消去法 .....	47
1.2 主元素消去法 .....	52
§ 2 高斯-约当消去法 .....	58
§ 3 解实三对角线性方程组的追赶法 .....	61
§ 4 矩阵的三角分解 .....	64
4.1 高斯消去法与矩阵的初等变换 .....	65
4.2 矩阵三角分解的唯一性 .....	67
4.3 $LU$ 分解方法 .....	71
4.4 乔累斯基(Cholcsky)分解方法 .....	79
§ 5 迭代法 .....	85
5.1 简单迭代法 .....	85
5.2 赛德尔(Scidel)迭代法 .....	91
• § 6 方阵的特征值与特征向量 .....	95
6.1 乘法法 .....	95
6.2 $QR$ 方法 .....	102
习题三 .....	109

#### 第四章 插值法

§ 1 插值问题 .....	114
§ 2 插值多项式的存在唯一性 .....	115
§ 3 拉格朗日插值多项式 .....	116
3.1 拉格朗日插值多项式 .....	116
3.2 拉格朗日插值多项式的余项 .....	120
§ 4 牛顿均差插值多项式 .....	121
4.1 均差 .....	122
4.2 牛顿均差插值多项式 .....	124
§ 5 等距基点插值多项式 .....	130

5.1	有限差 .....	130
5.2	牛顿前差和后差插值多项式 .....	131
§ 6	样条插值 .....	137
6.1	三次样条插值函数的定义 .....	137
6.2	三次样条插值法 .....	137
* § 7	数值微分 .....	145
7.1	用插值法求数值微分 .....	145
7.2	用三次样条函数求数值微分 .....	148
§ 8	曲线拟合法 .....	149
习题四	.....	154

## 第五章 数值积分

§ 1	牛顿-柯特斯公式 .....	159
1.1	牛顿-柯特斯公式 .....	159
1.2	误差估计 .....	164
§ 2	复合求积公式 .....	166
2.1	复合梯形公式 .....	166
2.2	复合辛普生公式 .....	169
2.3	变步长公式 .....	172
§ 3	龙贝格积分方法 .....	174
习题五	.....	182

## 第六章 常微分方程数值解法

§ 1	引言 .....	184
§ 2	欧拉法和改进的欧拉法 .....	185
2.1	欧拉法(折线法).....	185
2.2	改进的欧拉法 .....	187
2.3	预估-校正法 .....	189



2.4	误差估计 .....	190
§ 3	龙格-库塔法 .....	193
3.1	泰勒级数展开法 .....	193
3.2	龙格-库塔法 .....	194
* § 4	线性多步法 .....	199
4.1	阿达姆斯(Adams)显式 .....	199
4.2	阿达姆斯隐式 .....	201
4.3	阿达姆斯预测-校正法 .....	203
§ 5	二阶线性常微分方程边值问题的数值解 .....	206
	习题六 .....	210
· 第七章 最优化方法		
§ 1	常用的一维寻查方法 .....	213
1.1	0.618 分割法(黄金分割法) .....	214
1.2	寻查区间的确定和初始步长的选取 .....	221
§ 2	最小二乘法 .....	225
2.1	最小二乘法 .....	225
2.2	改进的最小二乘法 .....	231
§ 3	最速下降法 .....	233
3.1	最速下降方向和最速下降法 .....	233
3.2	算法的下降性和最速下降法的收敛速度 .....	236
§ 4	共轭斜量法 .....	240
4.1	二阶收敛性和共轭方向 .....	240
4.2	共轭斜量法 .....	242
4.3	共轭斜量法的计算步骤及框图 .....	247
§ 5	变尺度方法 .....	252
5.1	变尺度方法的基本思想 .....	252
5.2	变尺度方法的近似矩阵 $H$ .....	254

5.3 变尺度方法的计算步骤及框图 .....	257
§ 6 单纯形方法 .....	263
6.1 单纯形方法的基本思想 .....	263
6.2 初始单纯形的构造 .....	265
6.3 单纯形方法的计算步骤及框图 .....	269
习题七 .....	272
参考资料 .....	274

# 第一章 误差

在实际问题的数值计算中，理想的准确值或真值往往得不到，人们常常采用与准确值相近的近似值来代替。在进行近似值的计算时，近似计算的结果与准确计算的结果是有差异的，我们要对此相差程度进行必要的估计和分析。因此，误差理论在数值计算中是很重要的。

## § 1 误差

### 1.1 误差的来源

用数值计算方法解决实际问题时，可能会遇到下述两种误差：第一种误差是由于我们在具体进行计算时粗枝大叶或疏忽而产生的，称其为“过失误差”。例如计算时把 989 误写成 998 或误用公式等。对这种误差这里不予以讨论，只要在实际计算中仔细、谨慎即可避免。第二种误差就是我们所要讨论的且按照一般规律计算时所不可避免的误差，即所谓“模型误差”、“量测误差”、“截断误差”、“舍入误差”等。下面具体地谈谈这些误差的来源。

在数值计算过程中，首先必须根据具体问题的自然现象建立数学模型。例如，气体的体积  $V$  与压力  $P$  之间的关系为

$$PV = C \quad (C \text{ 为常数})$$

这就是所建立的数学模型，可利用它来计算气体的体积或压力。然而数学模型总是忽视一些次要因素后才获得的，故只能近似地描述所给问题的自然现象。其与自然现象之间有一定的差异，从而出现误差。这种误差称之为“模型误差”。

在建立数学模型时，所用到的数据往往是通过观测得来的，而观测的结果不可能绝对准确，因而就产生了误差。这种误差通常称为“量测误差”。由此可知，在数值计算中参与计算的量一般说来都是近似的。

在计算过程中，我们常用收敛无穷级数的前几项代替无穷级数，即抛弃了无穷级数的后段。这样的误差称为“截断误差”。例如  $\sin x$  和  $\ln(1+x)$  能够展成无穷级数：

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots, \quad -\infty < x < +\infty$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots, \quad -1 < x \leq 1$$

当  $|x|$  很小时，常用  $x$  代替  $\sin x$ ，用  $x$  代替  $\ln(1+x)$ ，它们的截断误差大约分别为  $\frac{1}{6}x^3$  和  $\frac{1}{2}x^2$ 。

此外，在具体运算时，还会经常用到一些无理数及循环小数。例如  $\pi$ 、 $e$ 、 $\sqrt{2}$ 、 $\frac{1}{3}$ 、 $\frac{1}{7}$  等，在计算机上或人工手算时这些数只能近似地表示。这样就引起了“舍入误差”。舍入的方法较多，有收尾法（只入不舍）、去尾法（只舍不入）、四舍五入法等。本教材将主要采用四舍五入法。其实，实际计算时总是按有限位数进行的，所以数值计算的每一步都不可避免地有舍入误差的影响。

以上说明，在数值计算中常会出现诸如模型、量测、截断、舍入等误差。一旦数学模型建立以后，我们只考虑后两种误差，即截断误差和舍入误差。因为主要是在已给数学模型的基础上研究其计算方法的，所以也只考虑截断误差和舍入误差。

## 1.2 绝对误差和绝对误差限

定义 假设某一量的准确值为  $x$ , 近似值为  $x^*$ , 则  $x$  与  $x^*$  之差叫做近似值  $x^*$  的绝对误差 (简称误差), 记为  $\varepsilon(x)$ , 即

$$\varepsilon(x) = x - x^* \quad (1-1)$$

$|\varepsilon(x)|$  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,  $|\varepsilon(x)|$  越小,  $x^*$  的精确度越高。

由于准确值  $x$  一般不能得到, 于是误差  $\varepsilon(x)$  的准确值也无法求出。但在实际测量或计算时, 可根据具体情况事先估计出它的大小范围, 也就是指定一个适当小的正数  $\eta$ , 使得

$$|\varepsilon(x)| = |x - x^*| \leq \eta \quad (1-2)$$

我们称  $\eta$  为近似值  $x^*$  的绝对误差限。显然有

$$x^* - \eta \leq x \leq x^* + \eta$$

有时也用

$$x = x^* \pm \eta \quad (1-3)$$

表示近似值的精度或准确值的所在范围。

例如测得某一物件的长度为 5m, 其误差限为 0.01m, 通常将准确长度  $s$  记为

$$s = 5 \pm 0.01$$

即准确值在 5m 左右, 但不超过 0.01m 的误差限。

## 1.3 相对误差和相对误差限

绝对误差并不足以表示近似值的好坏。例如设

$$x_1 = 100 \pm 1$$

$$x_2 = 1000 \pm 1$$

近似值  $x_1^* = 100$  的绝对误差限与  $x_2^* = 1000$  的绝对误差限相

同，不过在 100 之内差 1 与 1000 之内差 1 比较，后者应比前者精确。可见决定一个量的近似值的精确度除了要看绝对误差的大小之外，还必须考虑到该量本身的大小。据此我们引进相对误差的概念。

定义 我们把绝对误差与准确值之比

$$\varepsilon_r(x) = \frac{\varepsilon(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x}, \quad x \neq 0 \quad (1-4)$$

称为  $x^*$  的相对误差。由于准确值  $x$  往往是不知道的，因此在实际问题中，常取

$$\varepsilon_r(x) = \frac{\varepsilon(x)}{x^*}$$

显见，上例  $x_2^*$  的相对误差为  $1/1000$ ；而  $x_1^*$  的相对误差为  $1/100$ 。一般地，在同一量或不同量的几个近似值中， $|\varepsilon_r(x)|$  小者精确度高。

由式(1-4)可知，相对误差可以由绝对误差求出；反之，绝对误差也可由相对误差求出。其关系是

$$\varepsilon(x) = x \varepsilon_r(x) \quad (1-5)$$

在讨论对近似值进行运算结果的误差分析时，相对误差更能反映出误差的特征。因此在误差分析中相对误差比绝对误差显得更为重要。

在实际计算中，由于  $\varepsilon(x)$  与  $x$  都不能准确地求得，因此相对误差  $\varepsilon_r(x)$  也不可能准确地得到。于是也像绝对误差那样，只能估计它的大小范围，即指定一个适当小的正数  $\delta$ ，使

$$|\varepsilon_r(x)| = \frac{|\varepsilon(x)|}{|x|} \leq \delta \quad (1-6)$$

称  $\delta$  为近似值  $x^*$  的相对误差限。

## 1.4 有效数字

对于一个近似值我们当然还希望说明它的准确程度。为此再引进有效数字的概念。

定义 若近似值  $x^*$  的绝对误差限是某一位上的半个单位，且该位到  $x^*$  的第一位非零数字一共有  $n$  位，则称近似值  $x^*$  有  $n$  位有效数字，或者说  $x^*$  准确到该位。

例如设

$$x = \pi = 3.1415926 \dots$$

那么

若取  $x_1^* = 3$ ，则  $|\varepsilon_1(x)| = 0.1415\dots < 0.5 \times 10^0$ ， $x_1^*$  的有效数字为 1 位，或者说  $x_1^*$  精确到个位；

若取  $x_2^* = 3.14$ ，则  $|\varepsilon_2(x)| = 0.00159\dots < 0.5 \times 10^{-2}$ ， $x_2^*$  的有效数字为 3 位，或者说  $x_2^*$  精确到 0.01；

若取  $x_3^* = 3.1416$ ，则  $|\varepsilon_3(x)| = 0.0000074\dots < 0.5 \times 10^{-4}$ ， $x_3^*$  的有效数字为 5 位，或者说  $x_3^*$  精确到 0.0001；

若取  $x_4^* = 3.1415$ ，则  $|\varepsilon_4(x)| = 0.0000926\dots < 0.5 \times 10^{-3}$ ， $x_4^*$  的有效数字为 4 位，或者说  $x_4^*$  精确到 0.001。

实际上，用四舍五入方法取准确值  $x$  的前  $n$  位(不包括第一位非零数字前面的零)作为它的近似值  $x^*$ ，则  $x^*$  有  $n$  位有效数字。其中每一位数字(包括后面的零)都叫做  $x^*$  的有效数字。

值得注意的是，近似值后面的零不能随便省去。例如

$$x = 2.179953$$

$$x_1^* = 2.18$$

$$x_2^{\circ} = 2.1800$$

$x_1^{\circ}$  精确到 0.01, 有 3 位有效数字; 而  $x_2^{\circ}$  精确到 0.0001, 有 5 位有效数字。可见它们的近似程度完全不同。

特别指出, 两个相近的近似数相减可能会造成有效数字的严重损失。实际计算时要尽量避免这种情况的发生。

在计算机上进行计算时, 要求输入的数为一定位数的数字, 计算结果也只保留一定位数的数字。因此在计算的结果中, 所保留下来的就不一定都是有效数字。于是不能把所得的数字都视为有效数字。这些数字中有些是有效数字, 而有些则不是, 甚至可能一个有效数字也没有。实际计算时要加以注意。

## § 2 算术运算结果的误差

对原始数据进行加、减、乘、除运算时, 由于原始数据的误差, 其结果必产生误差。这一节主要讨论算术运算时原始数据的相对误差与计算结果的相对误差之间的关系。

### 2.1 加减法

设  $x^{\circ}$ 、 $y^{\circ}$  分别为准确值  $x$ 、 $y$  的近似值, 则由绝对误差的定义

$$\begin{aligned}\varepsilon(x+y) &= (x+y) - (x^{\circ} + y^{\circ}) \\ &= (x - x^{\circ}) + (y - y^{\circ}) \\ &= \varepsilon(x) + \varepsilon(y)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}|\varepsilon(x+y)| &= |\varepsilon(x) + \varepsilon(y)| \\ &\leq |\varepsilon(x)| + |\varepsilon(y)|\end{aligned}$$



因此，任何两个数之和的绝对误差等于两个数的绝对误差之和，任何两个数之和的绝对误差限为这两个数的绝对误差限之和，且可推广到有限多个数相加的情形。因为加法与减法互为逆运算，所以减法可化为加法情形讨论。

设  $x_1$ 、 $x_2$  的近似值分别为  $x_1 + \varepsilon(x_1)$ 、 $x_2 + \varepsilon(x_2)$ ，则这两个数之和的相对误差为

$$\begin{aligned} \varepsilon_r(x_1 + x_2) &= \frac{\varepsilon(x_1 + x_2)}{x_1 + x_2} = \frac{\varepsilon(x_1) + \varepsilon(x_2)}{x_1 + x_2} \\ &= \frac{x_1}{x_1 + x_2} \frac{\varepsilon(x_1)}{x_1} + \frac{x_2}{x_1 + x_2} \frac{\varepsilon(x_2)}{x_2} \\ &= \frac{x_1}{x_1 + x_2} \varepsilon_r(x_1) + \frac{x_2}{x_1 + x_2} \varepsilon_r(x_2) \quad (1-7) \end{aligned}$$

当  $x_1$  和  $x_2$  同号时，则

$$\begin{aligned} \underline{|\varepsilon_r(x_1 + x_2)|} &\leq \frac{x_1}{x_1 + x_2} \max(|\varepsilon_r(x_1)|, |\varepsilon_r(x_2)|) \\ &\quad + \frac{x_2}{x_1 + x_2} \max(|\varepsilon_r(x_1)|, |\varepsilon_r(x_2)|) \\ &= \underline{\max(|\varepsilon_r(x_1)|, |\varepsilon_r(x_2)|)} \quad (1-8) \end{aligned}$$

因此，当两数的符号相同时，它们和的相对误差限小于两数相对误差限中最大者。

当  $x_1$  和  $x_2$  异号时，则式(1-7)右端

$$\frac{x_1}{x_1 + x_2} - \frac{x_2}{x_1 + x_2}$$

这两个数的绝对值至少有一个大于 1。当  $x_1$  和  $-x_2$  相当接近时，原始数据的误差会对计算结果产生很大的影响。

当  $|x_1|$  和  $|x_2|$  相差很大，不失一般性，我们假设  $|x_1| \gg |x_2|$ ①，则  $x_1 / (x_1 + x_2)$  接近于 1，而  $x_2 / (x_1 + x_2)$  的绝对值相

① 表示  $|x_1|$  比  $|x_2|$  大得多。