



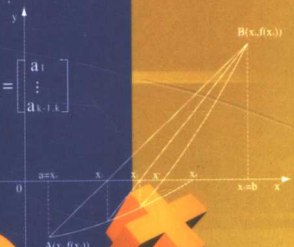
高等学校工科电子类教材

计算方法

(修订版)

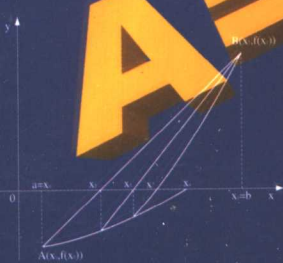
● 钱焕延 赵晓彬

其中 $p = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_{k,k-1} \end{bmatrix}, q = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_{k-1,k} \end{bmatrix}$



$$A_1 = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_{1,k-1} & a_{1k} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{k-1} & \cdots & a_{k-1,k-1} & a_{k-1,k} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_1 & \cdots & a_{1,k-1} & a_{1k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{k-1} & q \\ p^T & a_{kk} \end{bmatrix}$$

其中 $p = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_{k,k-1} \end{bmatrix}, q = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_{k-1,k} \end{bmatrix}$



西安电子科技大学出版社

<http://www.xduph.com>

高等专科学校教材

计算方法

(修订版)

钱焕延 赵晓彬

西安电子科技大学出版社

(陕)新登字 010 号

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科技人员选用或参考。

全书共分七章,主要包括: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、常微分方程数值解法和最优化方法等。本教材注意到专科层次的特点,选材深浅适度,文字通俗易懂,对常用的算法给出了计算步骤和计算框图,还有较丰富的例题和习题,便于自学。

高等专科学校教材

计 算 方 法

(修订版)

钱焕延 赵晓彬 编著

责任编辑 王绍菊

西安电子科技大学出版社出版发行

地址:西安市太白南路2号 邮编:710071

陕西画报社印刷厂印刷

新华书店经销

开本 850×1168 1/32 印张 8.75 字数 211 千字

1989年6月第1版 1994年6月第2版 2002年9月第13次印刷 印数 80 001~86 000

ISBN 7-5606-0294-0/TP·0101(课)

定价:10.00 元

XDUP 0564032 - 13

出版说明

根据国务院关于高等学校教材工作的规定，我部承担了全国高等学校和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1978~1990年，已编审、出版了三个轮次教材，及时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教材能更好地适应“三个面向”的需要，贯彻国家教委《高等教育“八五”期间教材建设规划纲要》的精神，“以全面提高教材质量水平为中心，保证重点教材，保持教材相对稳定，适当扩大教材品种，逐步完善教材配套”，作为“八五”期间工科电子类专业教材建设工作的指导思想，组织我部所属的九个高等学校教材编审委员会和四个中等专业学校专业教学指导委员会，在总结前三轮教材工作的基础上，根据教育形势的发展和教学改革的需要，制订了1991~1995年的“八五”（第四轮）教材编审出版规划。列入规划的，以主要专业主干课程教材及其辅助教材为主的教材约300多种。这批教材的评选推荐和编审工作，由各编委会或教学指导委员会组织进行。

这批教材的书稿，其一是从通过教学实践、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，其二是在认真遴选主编人的条件下进

行约编的，其三是经过质量调查在前几轮组织编定出版的教材中修编的。广大编审者、各编审委员会(小组)、教学指导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。

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

机械电子工业部电子类专业教材办公室

前 言

本教材按机械电子工业部制定的工科电子类专业教材 1991 年~1995 年编审出版规划,由大专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同志和南京有线电厂职工大学赵晓彬同志主编,南京建筑工程学院金炳陶副教授主审。

在生产实践和科学技术领域中,要解决的计算问题非常广泛,使用的数值方法也多种多样。本书从实际出发,采用由简单到复杂,由特殊到一般的叙述方法,阐述了数值计算中的基本理论和基本方法,内容力求精选,文字通俗简练。教材共分为七章:第一章为误差,介绍了绝对误差、相对误差、有效数字和算法的数值稳定性等概念;第二章为一元非线性方程的解法;第三章为线性代数计算方法,该章着重叙述了求解线性方程组的一些数值方法;第四章为插值法,用代数多项式来近似地代替较复杂的函数(或由表格给出的函数);第五章为数值积分,介绍了几个常用的求定积分数值解的方法;第六章为常微分方程数值解法,主要讨论一阶常微分方程初值问题的几个数值方法;第七章为最优化方法,研究多元函数极小化问题。为适应现代电子计算机的高速发展,书中对常用的算法给出了计算步骤,并配有相应的计算框图,以便于读者编制程序和上机操作。此外,各章都配有较丰富的例题和一定数量的习题,通过练习,可以加深对各章内容的理解和掌握。全书参考学时为 80,而对只开设 60 学时的有关专业可略去教材中注有“*”的部分章节,或根据专业的需要自行删节。

参加教材编审工作的还有苏州市职工大学俞咏薇副教授、本

校胡玉峰老师，他们对本书提出了许多宝贵意见和建议，在此谨向他们表示深切的谢意。

限于编者的水平和经验，书中定有不少缺点和错误，诚恳地希望读者批评指正。

编 者

1993年8月

目 录

第一章 误差	1
§ 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	6
§ 2 数的表示及运算	9
2.1 机器数及其运算	9
2.2 浮点数的运算.....	10
§ 3 算术运算结果的误差.....	11
3.1 加减法.....	11
3.2 乘除法.....	13
§ 4 算法的数值稳定性.....	14
4.1 算法稳定的若干原则.....	14
4.2 改善算法的例子.....	20
习题一	21
第二章 一元非线性方程的解法	23
§ 1 二分法.....	25
§ 2 迭代法.....	29
§ 3 切线法(牛顿法)	37
§ 4 弦截法.....	40
§ 5 加速迭代法.....	42
习题二	46

第三章 线性代数计算方法	48
§ 1 高斯消去法	49
1.1 顺序消去法	49
1.2 主元素消去法	54
§ 2 高斯-约当消去法	61
§ 3 解实三对角线性方程组的追赶法	63
§ 4 矩阵的三角分解	68
4.1 消去法与矩阵的初等变换	68
4.2 矩阵三角分解的唯一性	71
4.3 LU 分解方法	75
4.4 乔累斯基(Cholesky)分解方法	82
§ 5 行列式和逆矩阵的计算	89
5.1 行列式的计算	89
5.2 逆矩阵的计算	90
§ 6 迭代法	91
6.1 简单迭代法	91
6.2 赛德尔(Seidel)迭代法	94
6.3 松弛法	96
§ 7 迭代法的收敛性	97
7.1 向量范数	98
7.2 矩阵范数	99
7.3 迭代法的收敛性	102
*§ 8 矩阵的特征值与特征向量的计算	107
8.1 乘幂法	107
8.2 QR 方法	113
习题三	119
第四章 插值法	124
§ 1 插值问题	124

§ 2	线性插值与二次插值	125
2.1	线性插值	125
2.2	二次插值	127
§ 3	代数多项式插值的存在唯一性	128
§ 4	代数多项式的余项	129
§ 5	拉格朗日插值多项式	131
§ 6	牛顿均差插值多项式	134
6.1	均差	135
6.2	牛顿均差插值多项式	135
§ 7	牛顿前差和后差插值多项式	141
7.1	有限差	141
7.2	牛顿前差和后差插值多项式	143
§ 8	三次样条插值	147
8.1	三次样条插值函数的定义	148
8.2	三次样条插值法	148
§ 9	数值微分	155
9.1	用插值法求数值微分	155
9.2	用三次样条函数求数值微分	157
§ 10	曲线拟合法	158
	习题四	165
第五章	数值积分	168
§ 1	牛顿-柯特斯公式	170
1.1	牛顿-柯特斯(Newton - Cotes)公式	170
1.2	误差估计	175
§ 2	复合求积公式	177
2.1	复合梯形公式	177
2.2	复合抛物线公式	179
2.3	变步长公式	182

§ 3 龙贝格(Romberg)积分方法	184
习题五	191
第六章 常微分方程数值解法	193
§ 1 引言	193
§ 2 欧拉法和改进的欧拉法	194
2.1 欧拉法(折线法)	194
2.2 改进的欧拉法	196
2.3 预估-校正法	198
2.4 误差估计	198
§ 3 龙格-库塔法	203
3.1 泰勒级数展开法	203
3.2 龙格-库塔法	204
*§ 4 阿达姆斯方法	208
4.1 阿达姆斯(Adams)显式	209
4.2 阿达姆斯隐式	211
4.3 阿达姆斯预估-校正公式	213
§ 5 二阶线性常微分方程边值问题的数值解	215
习题六	220
*第七章 最优化方法	222
§ 1 引言	222
1.1 一元函数的极值	222
1.2 二元函数的极值	223
1.3 目标函数的最速上升方向和最速下降方向	225
1.4 求目标函数极值的迭代法	227
§ 2 一维搜索	229
2.1 牛顿法	229
2.2 二分法	230
2.3 黄金分割法(0.618法)	232

2.4	二次插值法	238
§ 3	非线性最小二乘法	240
§ 4	最速下降法	246
§ 5	共轭斜量法	250
§ 6	变尺度方法	258
§ 7	单纯形方法	261
7.1	单纯形方法的基本思想	261
7.2	初始单纯形的构造	264
7.3	单纯形方法的计算步骤及框图	264
	习题七	266
	参考资料	268

第一章 误差

在科学技术领域中，许多实际问题最终都可以归结为数学问题。为了获得人们所需的结果，必须将实际问题转变为数学理论问题（一般为数学模型），再将数学理论问题转化为计算问题。计算必须依靠计算工具进行，现代化计算工具主要是电子计算机。而不管多高精度的计算机，都只能取有限位数值进行计算。从实际问题到获得计算结果的过程，理想的准确值往往是得不到的，人们常常采用与准确值相近的近似值来代替。准确值与其近似值总是有差异的，我们称这种差异为误差。为了刻画近似结果的精度，我们要对此误差作必要的估计和分析。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科学技术中的实际问题，必须首先建立数学模型。而数学模型又只能在感性认识的基础上，抓住主要因素，忽略次要因素的情况下获得，故只能近似地描述所给的实际问题，其与实际问题之间有一定的差异，从而出现误差。这种误差称之为“模型误差”。

在数学模型中，常常包含了若干参变量，如比重、加速度、阻力系数等，这些量一般是通过观测得来的，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”。

例 设某金属棒在温度 t 时的长度为 l_t (0°C 时金属棒的长度为 l_0), 则

$$l_t \approx L_t = l_0(1 + \alpha t + \beta t^2)$$

这里 $l_0 \equiv 1$, α, β 为参数, 可估计为

$$\alpha = 0.001\ 253 \pm 10^{-6}$$

$$\beta = 0.000\ 068 \pm 10^{-6}$$

于是知, $l_t - L_t$ 为模型误差, 10^{-6} 是观测 α, β 而产生的误差, 因此为量测误差。

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。这样得到的误差称为“截断误差”。例如

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

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

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, 在数值计算时这些数只能近似地表示。这样就产生了所谓“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 $\epsilon(x)$, 即

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

$|\epsilon(x)|$ 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, $|\epsilon(x)|$ 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 $\epsilon(x)$ 的准确值也无法求得, 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 ξ , 使得

$$|\epsilon(x)| = |x - x^*| \leq \xi \quad (1-2)$$

我们称 ξ 为近似值 x^* 的**绝对误差限**。有时也用

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

表示近似值的精度或准确值的所在范围。在实际问题中, 绝对误差一般是有量纲的。例如测得某一物件的长度为 5 m, 其误差限为 0.01 m, 通常将准确长度 s 记为

$$s = 5 \pm 0.01$$

即准确值在 5 m 左右, 但不超过 0.01 m 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

$$x_1 = 100 \pm 1$$

$$x_2 = 1\,000 \pm 1$$

近似值 $x_1^* = 100$ 的绝对误差限与 $x_2^* = 1\,000$ 的绝对误差限相同, 不过 100 的误差为 1 与 1 000 的误差为 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

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

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

$$\epsilon_r(x) = \frac{\epsilon(x)}{x^*}$$

显见，上例 x_2^* 的相对误差为 $1/1\,000$ ；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， $|\epsilon_r(x)|$ 小者精确度高。相对误差是一个无量纲量。

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

$$\epsilon(x) = x \epsilon_r(x) \quad (1-5)$$

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 $\epsilon(x)$ 与 x 都不能准确地求得，因此相对误差 $\epsilon_r(x)$ 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 η ，使

$$|\epsilon_r(x)| = \frac{|\epsilon(x)|}{|x|} \leq \eta \quad (1-6)$$

称 η 为近似值 x^* 的**相对误差限**。

例 1 给定 $g(x) = 10^7(1 - \cos x)$ ，试用四位数学用表求 $g(2^\circ)$ 的近似值。

解 甲用下列步骤解题：由于 $\cos 2^\circ \approx 0.9994$ ，故

$$\begin{aligned} g(2^\circ) &= 10^7(1 - \cos 2^\circ) \\ &\approx 10^7(1 - 0.9994) \\ &= 6\,000 \end{aligned}$$

乙用另法计算：由于

$$g(x) = 10^7(1 - \cos x) \equiv 2 \times 10^7 \sin^2 \frac{x}{2}$$

查表 $\sin 1^\circ \approx 0.0175$ ，故

$$\begin{aligned} g(2^\circ) &= 2 \times 10^7 \sin^2 1^\circ \approx 2 \times 10^7 (0.0175)^2 \\ &\approx 6125 \end{aligned}$$

甲、乙都用一本数学手册，表的每一个数都准确到小数后第四位，答案为什么不一致？谁的答案较正确呢？下面我们来分析甲、乙算题时各自的相对误差：

记

$$t_1 = (1 - A)10^7, \quad \text{其中 } A = \cos x,$$

$$t_2 = 2 \times 10^7 B^2, \quad \text{其中 } B = \sin \frac{x}{2},$$

三角函数表给出了四位数字，它准确到小数后第三位，而第四位是经过“四舍五入”得到的，即有

$$|A - A^*| \leq \frac{1}{2} 10^{-4}$$

$$|B - B^*| \leq \frac{1}{2} 10^{-4}$$

这里 A^* 、 B^* 分别为 A 、 B 的近似值。于是

$$\begin{aligned} |\epsilon_r^*(t_1)| &= \frac{|(1 - A)10^7 - (1 - A^*)10^7|}{|1 - A^*|10^7} \\ &= \frac{|A - A^*|}{|1 - A^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} 10^{-4}}{1 - A^*} \\ &= \frac{\frac{1}{2} 10^{-4}}{1 - 0.9994} = \frac{1}{12} \approx 8.3\% \end{aligned}$$

$$|\epsilon_r^*(t_2)| = \frac{|2 \times 10^7 B^2 - 2 \times 10^7 B^{*2}|}{2 \times 10^7 B^{*2}}$$