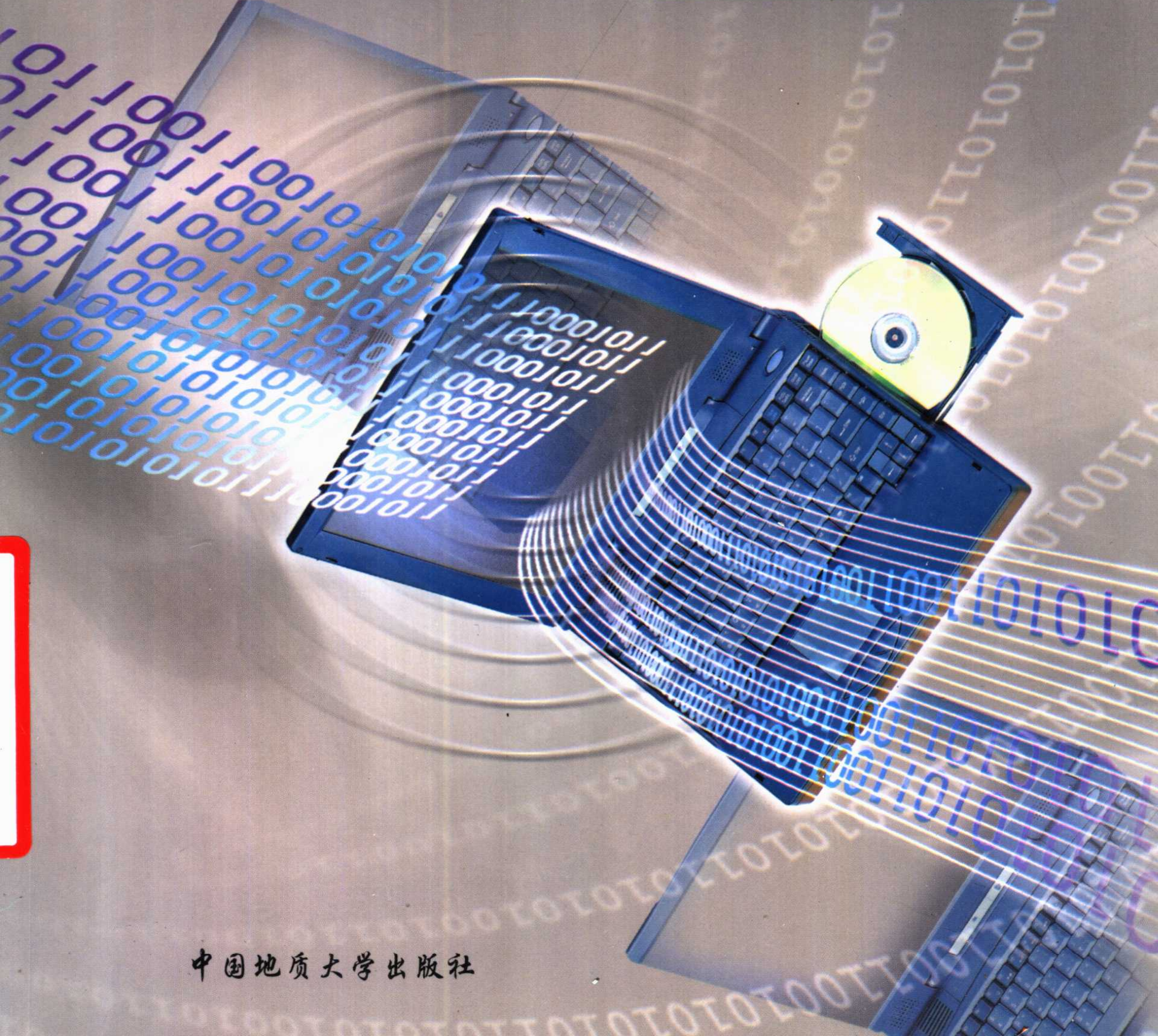
计算方法

沈远彤　黄精华　李少华　编



中国地质大学出版社

计 算 方 法

沈远彤　黄精华　李少华　编

中国地质大学出版社

内 容 提 要

本书内容共分七章，内容主要包括：插值理论、方程求根、线性代数方程组的解法、数值积分、常微分方程数值解法和矩阵特征值与特征向量的计算. 各章均配有一定量的习题，书末附有答案. 本书选材适度、通俗易懂，为了适应不同要求的需要，安排了一定量的选学内容. 对于加“*”的内容可酌情取舍.

本书适合高等学校各有关专业作为教材或参考书，也可供有关科技人员参考与自学.

图书在版编目（CIP）数据

计算方法 / 沈远彤，黄精华，李少华编. —武汉：中国地质大学出版社，2004.2
ISBN 7-5625-1842-4

Ⅰ. 计…
Ⅱ. ①沈…②黄…③李…
Ⅲ. 数学-高校-教材
Ⅳ. O17

计算方法 沈远彤 黄精华 李少华 编

责任编辑：方 菊 责任校对：张咏梅

出版发行：中国地质大学出版社（武汉市洪山区鲁磨路 388 号） 邮编：430074
电话：(027)87483101 传真：87481537 **E-mail**：cbo @ cug.edu.cn
经 销：全国新华书店 **http**: // www.cugp.cn

开本：787 毫米×960 毫米 1/16 字数：300 千字 印张：13.25
版次：2004 年 2 月第 1 版 印次：2004 年 2 月第 1 次印刷
印刷：荆州鸿盛印刷厂 印数：1—2 000 册

ISBN 7-5625-1842-4/O·62 定价：23.00 元

前　　言

随着计算机的广泛应用，计算方法的研究也得到很大的发展. 它的理论与基本方法已经影响到许多学科，并在生产、管理、教学与科学研究部门得以广泛应用. 本书是根据国家教委批准的高等工科院校本科“计算方法课程教学基本要求”，在作者教学实践基础上总结编写的. 它的目的是：通过学习本课程所介绍的一些常用的基本数值方法，使读者能够了解计算数学的特点，并初步掌握数值计算的基本理论与算法，培养应用电子计算机解决实际问题的能力.

本书主要内容包括误差的一般概念、插值法、数据拟合法、非线性方程的数值解法、线性代数方程组的数值解法、数值积分法、常微分方程初值问题的数值解法和矩阵特征值与特征向量的求法等. 本书在各章安排了一定量的数值实验，此部分可以借助软件 Matlab 或 Mathmatic 完成.

本书作为教材，参考学时为 30~50 学时，教师可根据开设课程的实际学时，对书中注有“*”的章、节作适当取舍.

由于作者水平有限，书中一定有不少不妥和错误之处，热忱地欢迎广大读者和有关专家提出宝贵建议和批评指正.

编　者

2003 年 12 月

目　　录

第一章 绪 论

计算方法这门学科是根据解决实际问题的需要而产生，并随着科学技术的发展而不断地发展与创新，特别是在计算机高速发展的背景下，许多大型、复杂的计算方法得以真正实现，为人类解决了许多实际问题，并节省了大量的人力、物力和财力.

计算方法是研究常见的基本数学问题的数值解法及其相关理论的一门数学分支，它包含了数值代数、数值微分与积分、常微分方程数值解等内容. 它的基本理论和研究方法是建立在数学理论的基础上，同时又与计算机密切联系，因此在考虑算法时，需要同时考虑计算机的特性，如计算量、存储量、字节长度等技术指标，考虑程序设计时的可行性和复杂性.

本章先对误差的基本概念和数值计算的注意事项作一些初步介绍.

1.1 误差的来源

用数学方法来解决实际问题的过程中，每一步都可能产生误差.

首先用数学模型来描述具体的物理现象时，往往要忽略许多次要因素，把模型“简单化”、“理想化”，因此模型本身就包含有误差，这种误差称为模型误差.

另外，在数学模型中总要包含一些观测数据，这些观测数据受工具、方法、观测者的主观因素、不可预料的随机干扰等影响必然带入误差，这种误差称为观测误差.

例 1 我们用

$$s(t)=\frac{1}{2}gt^2 \quad （g \text{ 为重力加速度}）$$

来描述物体自由下落时距离与时间的关系. 设自由落体在时间 t 时的实际下落距离为 s_t，则 $s_t-s(t)$ 就是“模型误差”.

例 2 设一根铝棒在温度 t 时的实际长度为 L_t，在 $t=0$ 时的实际长度为 L_0，用 l_t 来表示铝棒在温度为 t 时的长度计算值，并建立数学模型

$$l_t=L_0(1+\alpha t),$$

其中 α 是实验观测到的常数，

$$\alpha=(2.38\pm0.01)\times10^{-5}\ /^\circ\mathrm{C},$$

则称 $L_t - l_t$ 为“模型误差”，0.01×10^{-5} 是 α 的“观测误差”.

在解决实际问题时，数学模型常常难以直接求解，往往要近似代替，其近似解与精确解之间的误差称为截断误差.

例 3 求 e^x 时，可将 e^x 展开为级数形式

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots \tag{1.1}$$

在实际计算时，我们只取前面有限项（例如 n 项）

$$S_n(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} \tag{1.2}$$

计算部分和 $S_n(x)$ 作为 e^x 的值必然产生误差，其误差为

$$R_n(x) = \frac{e^{\xi}}{(n+1)!}x^{n+1}，\xi \text{ 在 } 0 \text{ 与 } x \text{ 之间} \tag{1.3}$$

这个误差就是“截断误差”.

最后，还有一类误差是因为在计算时总是只能取有限位有效数字进行计算而引起，初始参数与中间结果都必须进行四舍五入，这个误差称为舍入误差.

例 4 $\pi = 3.1415926\cdots$，$\sqrt{2} = 1.41421356\cdots$，$\frac{1}{3} = 0.3333\cdots$，等，在计算机上运算时只能用有限位小数，如果取小数点后四位数字，则

$$l_1 = 3.1416 - \pi = 0.000074\cdots,$$

$$l_2 = 1.4142 - \sqrt{2} = -0.000013\cdots,$$

$$l_3 = 0.3333 - \frac{1}{3} = -0.000033\cdots,$$

就是“舍入误差 ”.

总之，误差一般来自模型误差、观测误差、截断误差、舍入误差. 在计算方法课程中，不分析模型误差；观测误差作为初始舍入误差；截断误差是主要讨论对象，是计算中误差的主要部分. 在各种算法中，通过数学方法可推导出截断误差限的公式，如（1.3）式；舍入误差的产生往往有很大的随机性，讨论比较困难，在问题本身呈现病态或不稳定时，它可能成为计算中误差的主要部分.

误差分析是一门专门的学科，经过训练的计算工作者，当发现计算结果与实际不符时，应当能找出误差的来源，并采取相应的措施加以改进，甚至对模型进行修改.

1.2 误差的基本概念

1.2.1 误差与误差限

定义 1.1 设x为准确值，x^*为x的一个近似值，称$e=x-x^*$为近似值x^*的绝对误差，简称误差.

误差是有量纲的量，量纲同x，它可正可负，当绝对误差为正时，近似值偏大，叫强近似值；当绝对误差为负时，近似值偏小，则称弱近似值.

通常，我们并不知道准确值x，也不能算出误差的准确值，但能根据测量工具或计算情况估计出误差的绝对值的上限，这个上限称为近似值x^*的误差限. 记为ε.

$$\left|x-x^*\right| \leqslant \varepsilon \text{，即} \left|e\right| \leqslant \varepsilon$$

其意义是：$x^*-\varepsilon \leqslant x \leqslant x^*+\varepsilon$，在工程中常记为：$x=x^*\pm\varepsilon$.

如

$$l=10.2\pm0.05\text{mm},$$
$$R=1500\pm10\Omega.$$

例 5 我们用一把毫米刻度的米尺来测量桌子的长度x，读出的长度为x^*=1235mm，x^*是x的近似值，由米尺的精度知道，它的误差限为 0.5mm，则有

$$\left|x-x^*\right|=\left|x-1235\right| \leqslant 0.5\text{mm},$$

即

$$1234.5 \leqslant x \leqslant 1235.5.$$

这表明x在区间 [1234.5, 1235.5] 内，写成

$$x=1235\pm0.5\text{mm}.$$

1.2.2 相对误差与相对误差限

误差限的大小还不能完全反映近似程度. 例如：称两堆苹果，第一堆 10kg，误差为 1kg；第二堆为 100kg，误差为 2kg，虽然后者的误差限比前者大，但不能简单地认为前者精确，还必须注意到该数本身的大小. 下面给出相对误差的定义.

定义 1.2 误差与精确值的比值

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

称作近似值x^*的相对误差，记作e_r. 相对误差是无量纲的量，常用百分比表示，

它可正可负．相对误差也不能准确计算，而是用相对误差限来估计的

$$|e_r| = \left|\frac{x - x^*}{x}\right| \leqslant \frac{\varepsilon}{|x|} = \varepsilon_r \, ,$$

ε_r 就是相对误差限.

实际上，由于 x 不知道，用上式无法确定 ε_r，因而常用 x^* 代替 x 作分母，此时

$$\left|\frac{\varepsilon}{|x|} - \frac{\varepsilon}{|x^*|}\right| = \frac{|\varepsilon(|x^*| - |x|)|}{|x \cdot x^*|} \leqslant \frac{\varepsilon^2}{|x \cdot x^*|} = \frac{(\frac{\varepsilon}{x})^2}{\left|\frac{x^*}{x}\right|} = O(\varepsilon_r^2) \, .$$

可见，此时产生的影响是 ε_r^2 量级．当 ε_r 较小时，可以忽略不计，所以以后我们就用 $\frac{\varepsilon}{|x^*|}$ 表示相对误差限.

例 6　刚才称苹果的例子中，第一堆苹果 10 ± 1kg，第二堆苹果 100 ± 2kg，则相对误差分别为

$$e_r = \frac{1}{10} = 10\%, \quad e_r = \frac{2}{100} = 2\%.$$

显然，称第一堆苹果的相对误差大.

1.2.3　有效数字

定义 1.3　如果近似值 x^* 的绝对误差限 ε 是某一位数字的半个单位，我们就说 x^* 准确到该位，从这一位起直到前面的第一位非零数字为止的所有数字称为 x^* 的有效数字.

如 $x^* = 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$，其中 $a_1, a_2, \cdots, a_n$ 是 0 ~ 9 之中的自然数，且 $a_1 \neq 0$，如果 $|e| = |x^* - x| \leqslant \varepsilon = 0.5 \times 10^{m-l}$，$1 \leqslant l \leqslant n$，则称 x^* 有 l 位有效数字.

例 7　设 $x = \pi = 3.1415926\cdots$，那么若取

$$x_1^* = 3 \, , \quad e_1 = 0.1415\cdots \leqslant 0.5 \times 10^0 \, ,$$

则 x_1^* 的有效数字为 1 位.

$$x_2^* = 3.14 \, , \quad e_1 = 0.00159\cdots \leqslant 0.5 \times 10^{-2} \, ,$$

则 x_2^* 的有效数字为 3 位.

在更多的情况下，我们不知道准确值 x，如果我们认为计算结果各数位可

靠，将它四舍五入到某一位，这时从这一位到前面第一个非零数字共l位，它与计算结果之差必小于该位的半个单位. 我们习惯上说将计算结果保留l位有效数字.

例 8　设$x=0.034039$，那么

取 2 位，$x^*\approx 0.034$，有效数字为 2 位；

取 3 位，$x^*\approx 0.0340$，有效数字为 3 位；

取 4 位，$x^*\approx 0.03404$，有效数字为 4 位.

相对误差与有效位数的关系十分密切，定性地讲，相对误差越小，有效位数越多，反之亦然. 定量地讲，有如下两个定理：

定理 1.1　设近似值$x^*=\pm 0.a_1a_2\cdots a_n\times 10^m$（$a_1\neq 0$）有$n$位有效数字，则其相对误差限为

$$\varepsilon_r\leqslant \frac{1}{2a_1}\times 10^{-n+1}.$$

此定理证明不难，留作练习.

定理 1.2　设近似值$x^*=0.a_1a_2\cdots a_n\times 10^m$的相对误差限为

$$\frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-n+1},\quad a_1\neq 0,$$

则它有n位有效数字.

证明：由于

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

$$|x^*-x|=\frac{|x^*-x|}{|x^*|}\times|x^*|\leqslant \frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-n+1}(a_1+1)\times 10^{m-1}=0.5\times 10^{m-n},$$

由定义 1.3 知x^*有n位有效数字.

例 9　若$x^*=3587.64$是x的具有六位有效数字的近似值，那么它的误差限是

$$|x^*-x|\leqslant \frac{1}{2}\times 10^{4-6}=\frac{1}{2}\times 10^{-2}.$$

若$x^*=0.0023156$是x的具有五位有效数字的近似值，则误差限是

$$|x^*-x|\leqslant \frac{1}{2}\times 10^{-2-5}=\frac{1}{2}\times 10^{-7}.$$

例 10　计算$\sin 1.2$，问需要取几位有效数字才能保证相对误差限不大于0.01%.

解：　$\sin 1.2=0.93\cdots$，故$a_1=9, m=0$，

$$\varepsilon_r \leqslant \frac{1}{2a_1}\times 10^{-n+1} \leqslant 0.01\% = 10^{\ 4},$$

解关于 n 的不等式，得

$$10^{-n} \leqslant 18\times 10^{-5} \leqslant 1.8\times 10^{-4},$$

所以取 $n=4$ 即可满足要求.

1.3 数值计算的注意事项

1.3.1 数值运算时误差的传播

当参加运算的数值带有误差时，结果也必然带有误差，问题是结果的误差与原始误差相比是否扩大.

1. 函数 $f(x)$ 的计算

设 x^* 是 x 的近似值，函数 $f(x)$ 运算后误差为

$$e(f(x^*)) = f(x) - f(x^*),$$

利用泰勒展开式

$$f(x) = f(x^*) + f'(x^*)(x-x^*) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x-x^*)^2,$$

ξ 介于 x 与 x^* 之间，

$$e(f(x^*)) = f'(x^*)(x-x^*) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x-x^*)^2,$$

$$\left|e(f(x^*))\right| \leqslant \left|f'(x^*)\right|\left|x-x^*\right| + \left|\frac{f''(\xi)}{2!}\right|\left|x-x^*\right|^2 = \left|f'(x^*)\right|\left|\varepsilon(x^*)\right| + \left|\frac{f''(\xi)}{2!}\right|\left|\varepsilon^2(x^*)\right|.$$

忽略高阶无穷小之后，可得函数 $f(x)$ 计算后的误差限估计值

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx \left|f'(x^*)\right|\varepsilon(x^*) \tag{1.4}$$

2. 多元函数 $A = f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 的计算

假设 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的近似值为 $x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*$，则 A 的近似值为

$$A^* = f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*),$$

函数值的误差 $\varepsilon(A^*)$ 由泰勒展开式可得

$$e(A^*) = A - A^* = f(x_1, x_2, \cdots, x_n) - f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*),$$

$$\left|A - A^*\right| = \left|f(x_1, x_2, \cdots, x_n) - f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)\right|$$

$$\leqslant \sum_{k=1}^{n}\left|\frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_k}\right|\left|x_k - x_k^*\right| + o(\Delta x),$$

其中

$$\Delta x = \max_k \left|x_k - x_k^*\right|.$$

略去高阶项后得 A^* 的误差限为

$$\varepsilon(A) \approx \sum_{k=1}^{n}\left|\frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_k}\right|\varepsilon(x_k^*) \tag{1.5}$$

3. 四则运算中误差的传播

由公式(1.5) 易得两个近似数 x_1^* 和 x_2^*，其误差限分别为 $\varepsilon(x_1^*)$ 和 $\varepsilon(x_2^*)$，它们进行加、减、乘、除四则运算的误差公式为

$$\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) = \varepsilon(x_1^*) + \varepsilon(x_2^*) \tag{1.6}$$

$$\varepsilon(x_1^* \cdot x_2^*) \approx \left|x_1^*\right|\varepsilon(x_2^*) + \left|x_2^*\right|\varepsilon(x_1^*) \tag{1.7}$$

$$\varepsilon(x_1^* / x_2^*) \approx [\left|x_1^*\right|\varepsilon(x_2^*) + \left|x_2^*\right|\varepsilon(x_1^*)] \Big/ \left|x_2^*\right|^2 \quad (x_2^* \neq 0) \tag{1.8}$$

例 11 已知测得某三角形的物体底边长 L^* 为 20m，高 H^* 为 5m，若已知 $\left|L - L^*\right| \leqslant 0.1\text{m}$，$\left|H - H^*\right| \leqslant 0.02\text{m}$. 试求其面积 $S = \dfrac{1}{2}L \cdot H$ 的绝对误差限与相对误差限.

解：因 $S = \dfrac{1}{2}L \cdot H$，由(1.7)式知

$$\varepsilon(S^*) \approx \frac{1}{2}(\left|L^*\right|\varepsilon(H^*) + \left|H^*\right|\varepsilon(L^*)).$$

其中

$$L^* = 20\,\text{m},\ H^* = 5\,\text{m},\ \varepsilon(L^*) = 0.1\,\text{m},\ \varepsilon(H^*) = 0.02\,\text{m}.$$

于是绝对误差限

$$\varepsilon(S^*) \approx \frac{1}{2}(20 \times 0.02 + 5 \times 0.1) = 0.45\ (\text{m}^2),$$

相对误差限

$$\varepsilon_r(S^*) = \frac{\varepsilon(S^*)}{\left|S^*\right|} = \frac{\varepsilon(S^*)}{\frac{1}{2}L^* \cdot H^*} = \frac{0.45}{50} = 0.9\%.$$

例 12 设 $y = x^n$，证明 y 的相对误差约为 x 的相对误差的 n 倍.

证明：由于 $y = x^n$，由(1.4)式得

$$\varepsilon_r(y) = \frac{\varepsilon(y)}{|y|} \approx \frac{|y'|\varepsilon(x)}{|x^n|} = \frac{|nx^{n-1}|\varepsilon(x)}{|x^n|} = \frac{n\varepsilon(x)}{|x|} = n\varepsilon_r(x).$$

1.3.2 数值运算中应注意的事项

数值运算中的误差分析是个很重要而复杂的问题，在本书中我们不打算介绍专门的误差分析方法，有兴趣的读者可以参阅理论性较强的计算方法（或数值分析）教材及参考书. 在这里我们只提出数值运算中要注意的几个问题，它有助于鉴别计算结果的可靠性，防止误差危害现象的产生，并提高计算结果的精度.

1. 要避免两个相近的数相减

在数值计算中，两个相近的数相减，有效数字会严重损失，由公式(1.6)，设 x_1, x_2 为两近似值

$$\varepsilon(x_1 - x_2) = \varepsilon(x_1) + \varepsilon(x_2),$$

推出

$$\begin{aligned}\varepsilon_r(x_1 - x_2) &= \frac{\varepsilon(x_1 - x_2)}{|x_1 - x_2|} = \frac{\varepsilon(x_1) + \varepsilon(x_2)}{|x_1 - x_2|} \\ &= \frac{|x_1|}{|x_1 - x_2|}\frac{\varepsilon(x_1)}{|x_1|} + \frac{|x_2|}{|x_1 - x_2|}\frac{\varepsilon(x_2)}{|x_2|} \\ &= \frac{|x_1|}{|x_1 - x_2|}\varepsilon_r(x_1) + \frac{|x_2|}{|x_1 - x_2|}\varepsilon_r(x_2).\end{aligned}$$

当 x_1, x_2 十分接近时，则 $|x_1 - x_2|$ 接近于零，这时 $\frac{|x_1|}{|x_1 - x_2|}$ 和 $\frac{|x_2|}{|x_1 - x_2|}$ 将很大. 所以，$\varepsilon_r(x_1 - x_2)$ 将比 $\varepsilon_r(x_1)$ 和 $\varepsilon_r(x_2)$ 大很多. 即相对误差显著增大.

从直观看，相近数相减将造成有效数字减少. 如 123.45 与 123.32 都有 5 位有效数字，但相减后的结果为 0.13 ，只有两位有效数字. 因此，在计算过程中要尽量避免两个相近的数相减.

例 13 计算 $A = (1 - \cos 2^\circ) \times 10^7$（用四位有效数字计算）.

解：由于 $\cos 2^\circ = 0.9994$，它与 1 是两个相近数的直接计算，则得

$$A=(1-0.9994)\times 10^7=6\times 10^3,$$

只有一位有效数字．若利用$(1-\cos x)=2\sin^2\dfrac{x}{2}$，则

$$A=(1-\cos 2^\circ)\times 10^7=2\sin^2 1^\circ\times 10^7=6.13\times 10^3.$$

这个结果具有三位有效数字．

此例说明在计算中应尽量避免两个相近数的减法，在实际计算时可通过变换计算公式以达到上述目的．

例如当x很大时，可用下面变换

$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}},$$

$$\arctan(x+1)-\arctan x=\arctan\frac{1}{1+x(x+1)},$$

$$\sin(x+1)-\sin x=2\cos(x+\frac{1}{2})\sin\frac{1}{2}.$$

类似地，如果x_1与x_2很接近时，

$$\ln x_2-\ln x_1=\ln\frac{x_2}{x_1},$$

一般情况，即$f(x)\approx f(x^*)$时，

$$f(x)-f(x^*)=f'(x^*)(x-x^*)+\frac{f''(x^*)}{2!}(x-x^*)^2+\cdots.$$

在上述变换中用等式右边计算，能减少有效数字的损失．

如果无法改变算式，则需采用增加有效位数的方式进行运算，在计算机上则采用双精度运算，但这要增加计算机的计算时间和多占用内存单元．

2．防止大数“吃掉”小数

由于计算机位数有限，因此，在加减法运算中，当参加运算的数的数量级相差悬殊时，要采取适当措施，应尽量避免较小的那个数被“吃掉”．

例 14 在八位十进制浮点计算机上，计算

$$A=12345678+\sum_{i=1}^{10000}\delta_i，其中\ \delta_i=0.9.$$

解：把运算写成规格化形式

$$A=0.12345678\times 10^8+\sum_{i=1}^{10000}\delta_i.$$