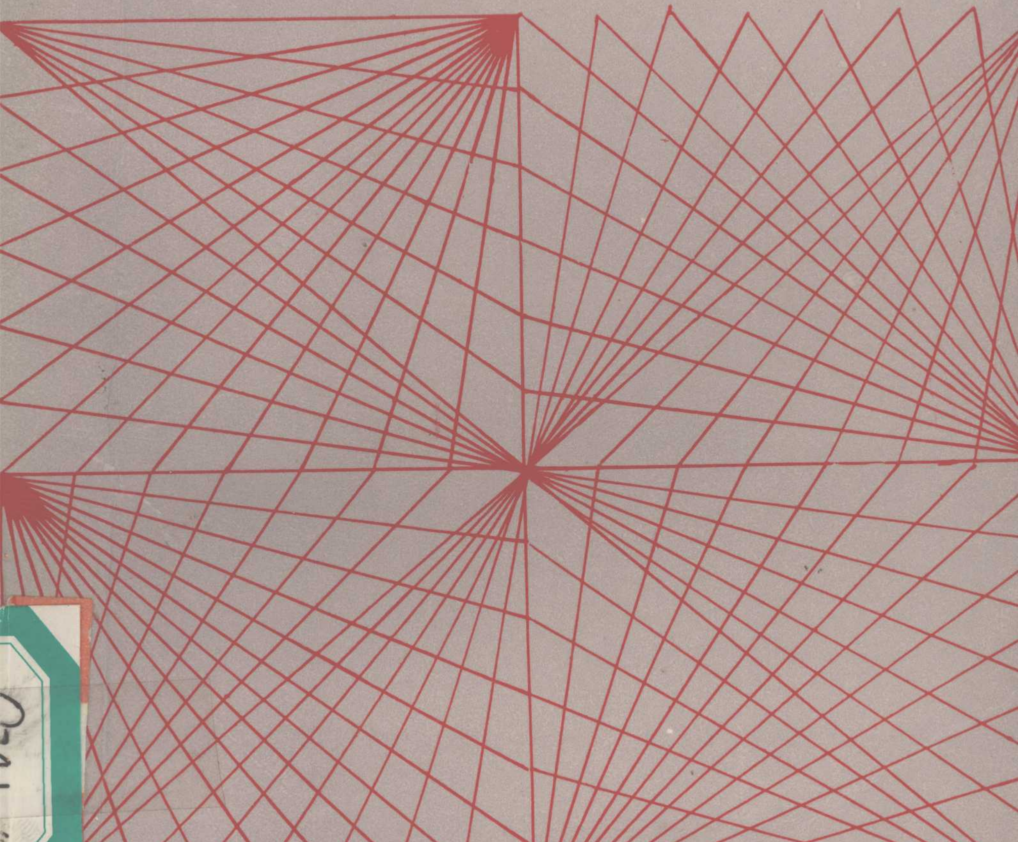
计算方法教程

高益明　裴锡灿　李才　张树元　主编



东北师范大学出版社

计 算 方 法 教 程

JISUAN FANGFA JIAOCHENG

高益明 裴锡灿 李 才 张树元 主编

责任编辑：杨述春　　封面设计：姚宏军　　责任校对：向 荣

东北师范大学出版社出版　　吉林省新华书店发行

（长春市斯大林大街110号）　　东北师范大学出版社印刷厂制版

（邮政编码：130024）　　东北师范大学出版社印刷厂印刷

开本：850×1168 毫米1/32　　1991年8月第1版

印张：11　　1991年8月第1次印刷

字数：280千　　印数：0 001—4 000册

ISBN 7-5602-0531-3/O·55　　（压膜）定价：2.80元

前　　言

本教程是在东北师范大学数学系多年使用的计算方法教材基础上，根据全国高校本科生必修课现行教学大纲，并参考现阶段国内外计算数学专业教材编写而成的高等师范院校本科生的计算方法教材.

本教程内容主要包括：误差，插值法，最佳逼近，数值积分，线性代数方程组直接解法与迭代解法，求矩阵特征值与特征向量，非线性方程与方程组数值解法，常微分方程数值解法，偏微分方程数值解法.

本教程为了适应不同专业需要，选择数值方法比较全面，内容处理力求系统完整，深浅适度，并注意联系中学实际，文字叙述力争简洁明了，通俗易懂. 为了便于自学，每小节都选配有丰富恰当的例题与习题.

本教程第一、二章由李才同志执笔，第三章由裴锡灿同志执笔，第四章由白玉山同志执笔，第五、六、七章由高益明同志执笔，第八章由张树元同志执笔，第九章由徐桢殷同志执笔，第十章由倪平同志执笔.

本教程在编写过程中，得到了东北师大数学系领导和东北师大出版社的热情关怀与支持，在此致以衷心感谢.

由于编者水平所限，教程中疏漏与错误在所难免，欢迎读者指正.

编　者
于东北师范大学数学系
1990年10月

目　　录

第一章　误　差

§1　误差的来源……………………………………（1）
§2　误差，误差界与有效数字…………………………（3）
§3　相对误差和相对误差界……………………………（6）
§4　误差的传播……………………………………（9）

第二章　插值法

§1　拉格朗日插值……………………………………（18）
§2　牛顿插值………………………………………（28）
§3　爱尔米特插值……………………………………（39）
§4　三次样条插值……………………………………（48）

第三章　最佳逼近

§1　最小二乘法………………………………………（57）
§2　正交多项式………………………………………（67）
§3　最佳平方逼近……………………………………（77）
§4　最佳一致逼近……………………………………（84）

第四章　数值积分

§1　内插求积公式……………………………………（93）
§2　梯形公式与辛卜生公式……………………………（101）
§3　龙贝格求积公式……………………………………（112）
§4　高斯求积公式………………………………………（117）
§5　利用样条插值的求积公式……………………………（124）

第五章　线性代数方程组的直接解法

§1　消元法……………………………………………………(129)
§2　矩阵的三角分解………………………………………………(135)
§3　紧凑格式…………………………………………………(143)
§4　改进平方根法与追赶法…………………………………………(147)
§5　求逆矩阵…………………………………………………(154)

第六章　线性代数方程组的迭代解法

§1　向量和矩阵的范数……………………………………………(160)
§2　迭代法及其收敛性……………………………………………(169)
§3　雅可比和塞德尔迭代法…………………………………………(174)
§4　共轭斜量法………………………………………………(182)

第七章　求矩阵特征值与特征向量

§1　乘幂法和逆幂法………………………………………………(191)
§2　QR方法……………………………………………………(199)
§3　对称阵的二分法………………………………………………(209)
§4　对称阵的雅可比法……………………………………………(217)

第八章　非线性方程和方程组的数值解法

§1　区间二分法………………………………………………(222)
§2　弦截法…………………………………………………(225)
§3　切线法…………………………………………………(237)
§4　一般迭代法………………………………………………(243)
§5　解非线性方程组的牛顿法…………………………………………(251)

第九章　常微分方程数值解法

§1　欧拉法与改进欧拉法……………………………………………(261)
§2　龙格-库塔法 ………………………………………………(268)
§3　单步法的收敛性与稳定性…………………………………………(274)

§4　线性多步法……(285)

第十章　偏微分方程数值解法

§1　椭圆型方程的差分法……(297)
§2　抛物型方程的差分法……(308)
§3　双曲型方程的差分法……(323)
§4　有限元法简介……(328)

第一章　误　差

在生产技术和科学研究工作中，人们总要分析处理各种数量关系，反映这些数量关系的数可分为两类，一类是准确反映实际情况的数，称为准确数（或真值），另一类则是近似反映实际情况的数，称为近似数（或近似值）．在数值计算中，参与计算的数，大多是由实验观测得来的近似值，在计算过程中所用的无理数（如π，$\sqrt{2}$，e）等，也只能是保留一定数位的近似值．一个数的真值与其近似值之差称为误差，即

误差＝真值－近似值．

在数值计算中，如果忽视了误差对计算结果的影响，则将会给工作造成严重损失．因此在讨论数值算法之前，有必要对误差有关知识作些简单介绍．

§1　误差的来源

引起误差的原因是多方面的．解决一个具体的科学技术问题，首先要建立数学模型．建立数学模型时往往忽略了许多次要因素，因此，数学模型中通常包含有误差，这种误差称为**模型误差**．

例 1　我们用公式

$$S(t)=\frac{1}{2}gt^2,\ g\approx 9.81\text{米/秒}^2.$$

来描述自由落体下落时距离和时间的关系．设自由落体在时间t的实际下落距离为$\tilde{s}_t$，则$\tilde{s}_t-s(t)$就是**模型误差**．

数学模型中一般包含若干参数，它们的值往往通过观测得

到，而观测难免出现误差，这种误差称为**观测误差**（或数据误差、模型参量误差）。

例 2 设温度 $t=0$ 时铝棒长度为 L_0，温度为 t 时铝棒长度 l_t 的计算公式为

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

其中 α 是由实验测量得到的常数：

$$\alpha = (0.0000238 \pm 0.0000001)1/°C.$$

这里 0.0000001/℃ 就是 α 的观测误差。

实际问题的数学模型往往很复杂，难以求得分析解，这就需要建立有效的近似方法或数值方法求解。模型的准确解与用数值方法（在无舍入的情况下）求得的近似解之差称为**截断误差**（或方法误差）。

例 3 一个无穷级数

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}f^{(k)}(x_0)$$

在实际计算时，我们只能取前面有限项（例如 n 项）

$$\sum_{k=0}^{n-1}\frac{1}{k!}f^{(k)}(x_0)$$

来代替，这就抛弃了无穷级数的后半段。因而出现了误差，就是一种截断误差。对这个问题来说，截断误差是

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}f^{(k)}(x_0)-\sum_{k=0}^{n-1}\frac{1}{k!}f^{(k)}(x_0)=\sum_{k=n}^{\infty}\frac{1}{k!}f^{(k)}(x_0)$$

最后，还有一类误差是因为在计算时只能取有限位数字进行运算引起的，这种误差称为**舍入误差**。

例 4 $\pi=3.1415926\cdots$，$\sqrt{2}=1.4142\cdots$ 等等。在计算机上运算时只能用有限位小数，如我们取小数点后面四位数字，则

$$\rho_1 = \pi - 3.1416 = -0.0000073\cdots,$$

$$\rho_2 = \sqrt{2} - 1.4142 = +0.000013\cdots$$

就是舍入误差。

在计算方法中主要讨论截断误差和舍入误差。

§2 误差，误差界与有效数字

为了方便起见，我们将真值记为x^*，而将其近似值记为 x。

定义1 将差 x^*-x 称为近似值 x 对于准确值 x^* 的绝对误差，或称近似值x的**误差**，记为$e(x)$. 即

$$e(x)=x^*-x. \tag{1}$$

$e(x)$ 的大小，标志着 x 的准确度。一般地，在同一量的不同近似值中，$|e(x)|$越小，x 的准确度越高。

一般来说$e(x)$的准确值很难求出，但是往往可以估出$|e(x)|$的上界，即可以求出一正数$\Delta(x)$，使

$$|e(x)|=|x^*-x|\leqslant\Delta(x) \tag{2}$$

数$\Delta(x)$称为 x 的绝对误差界或称x的**误差界**.

因为在任何情况下都有

$$|x^*-x|\leqslant\Delta(x)$$

即

$$x-\Delta(x)\leqslant x^*\leqslant x+\Delta(x).$$

这就表明x^*在$[x-\Delta(x),\ x+\Delta(x)]$这个区间内，通常用

$$x^*=x\pm\Delta(x) \tag{3}$$

来表示近似值x的准确度，或准确值所在的范围。

误差有正有负，当误差为正时，近似值偏小，称为"弱近似"，当误差为负时，近似值偏大，称为"强近似"．

例 1 已知 $x^*=\pi=3.14159\cdots$，求近似值 $x_1=3.14$，$x_2=3.141$，$x_3=3.1416$的误差，误差界。

解 $e(x_1)=\pi-3.14\approx0.0016$,

$e(x_2)=\pi-3.141\approx0.0006$,

$e(x_3)=\pi-3.1416\approx-0.000007$,

$|e(x_1)|<\frac{1}{2}\times10^{-2}=\Delta(x_1)$,

$|e(x_2)|<10^{-3}=\Delta(x_2)$,

$$|e(x_3)|<\frac{1}{2}\times 10^{-4}=\Delta(x_3).$$

例 2 用有毫米刻度的米尺，测得桌长近似值 $x=1235$毫米，求桌长真值范围。

解 由米尺的精度知

$$|x^*-x|\leqslant\Delta x=\frac{1}{2}\text{毫米}.$$

$$1234.5\leqslant x^*\leqslant 1235.5,$$

即

$$x^*=1235\pm 0.5\text{毫米}.$$

由误差界的定义，凡四舍五入法得到的近似值 x 的误差界都可取为它末位的半个单位，而用收尾法或去尾法得到的近似值的误差界可取为它末位的一个单位。

如果我们把任意十进制的数写为10的幂级数形式。例如

$$42.57=4\times 10^1+2\times 10^0+5\times 10^{-1}+7\times 10^{-2},$$

$$0.078=7\times 10^{-2}+8\times 10^{-3},$$

$$\begin{aligned}\sqrt{3}&=1.73205\cdots\\&=1\times 10^0+7\times 10^{-1}+3\times 10^{-2}+2\times 10^{-3}\\&\quad+0\times 10^{-4}+5\times 10^{-5}+\cdots.\end{aligned}$$

一般地，可将准确数x^*(设$x^*>0$)的近似值x表示为

$$\begin{aligned}x=a_1\times 10^m+a_2\times 10^{m-1}+\cdots+a_p\times 10^{m-p+1}+\cdots\\+a_n\times 10^{m-n+1}.\end{aligned}\tag{4}$$

其中 $a_1\neq 0$，a_2，a_3，…，a_n为0，1，2，…9 中的某个数字。p，n为正整数，m（称为x的阶）为整数。

定义 2 对(4)如果有

$$\Delta(x)\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{m-p+1}\tag{5}$$

则称x**准确到 10^{m-p+1}位**，或称x**具有 p 位有效数位**。其中 10^m位，…，10^{m-p+1}位都是x的有效数位。

特别地，当x准确到该数的末位（即 $p=n$），则称 x **具有n位有效数字**，或称x为**有效数**。其中数字 a_1，a_2…，a_n分别称

为 x 的第 1，第 2，…，第 n 个有效数字。

由有效数位定义可知，有效数位越多的近似数 x 越精确。

例 3 $\pi=3.14159\cdots$，取 $x=3.142$ 为 π 的近似值。验证 x 有几位有效数字。

解 因为

$$|\pi-3.142|=0.000407\cdots<\frac{1}{2}\times10^{-3},$$

所以取

$$\Delta(3.142)=\frac{1}{2}\times10^{-3},$$

又因为 $m=0$，$m-p+1=-3$，即 $p=4$，则 3.142 具有四位有效数字，即为 3，1，4，2.

例 4 以 $22/7=3.1428571\cdots$，作为 π 的近似值，它准确到哪位？

解 因为

$$|\pi-3.1428571\cdots|<\frac{1}{2}\times10^{-2},$$

所以可取

$$\Delta\left(\frac{22}{7}\right)=\frac{1}{2}\times10^{-2},$$

由定义得 x 为准确到 10^{-2} 位的近似值。

由有效数字的定义知，用四舍五入法得到的近似数，都是准确到末位的有效数。

我们约定：原始数据都要用有效数字写，凡不标明误差界的近似数都认为是用四舍五入法得到的有效数。

这样一来，不仅从一个近似数的表示式就知道它的误差界（为它末位的半个单位），同时也知道同一数的近似值位数越多越准确。于是近似数 3.1 与近似数 3.10 的精度是不同的，前者具有 2 位有效数字，误差界 $\Delta(3.1)=\frac{1}{2}\times10^{-1}$，后者具有 3 位有效数字，误差界 $\Delta(3.10)=\frac{1}{2}\times10^{-2}$.所以在近似数的尾部，不能随意抹掉零或添加零。

习　　题

1　已知　$x^*=\sqrt{2}=1.4142135\cdots$，求其近似值 $x_1=1.41$，$x_2=1.4142$ 的误差与误差界。

2　用 $x=355/113$ 作为 π 的近似值，它准确到哪位？

3　写出下列各数具有五位有效数字的近似值。

1237651，　6000045，　816.9547，　0.0152367.

4　求下列各近似数的误差界和有效数字.

235000，　235×10^3，　2.35×10^5.

§3　相对误差和相对误差界

上节我们引入了误差和误差界的概念，误差是有量纲单位的，用误差只能衡量同一量的不同近似值的准确程度，而对于不同量的近似值的准确程度，用误差就无法度量了。例如，甲测量一百米长度产生了五厘米的误差，乙测量十米长度产生了一厘米的误差，显然甲测量比乙测量准确。可见要决定不同量的近似值的准确度，除了要看它误差的大小外，还必须考虑量本身的大小。

定义　将近似值 x 的误差与准确值 x^* 的比值，称为近似值 x 的**相对误差**，记为

$$\beta(x)=\frac{e(x)}{x^*}=\frac{x^*-x}{x^*},\quad |x^*|\neq 0,\tag{1}$$

在同一量或不同量的近似值中，$|\beta(x)|$ 越小，x 的准确度越高。

一般地，$\beta(x)$ 的准确值也很难求出。同样地，我们往往可以估出 $|\beta(x)|$ 的上界，即可以求出一正数 $\delta(x)$，使

$$|\beta(x)|=\left|\frac{e(x)}{x^*}\right|\leqslant\delta(x),\tag{2}$$

数 $\delta(x)$ 称为 x 的**相对误差界**.

在实际计算时，通常取

$$\delta(x)=\frac{\Delta(x)}{|x|},\quad |x|\neq 0. \tag{3}$$

例 1 求 π 的近似值 $x_1=3.142$ 的相对误差和相对误差界。

解 $$\beta(x)=\frac{\pi-x_1}{\pi}=\frac{3.14159\cdots-3.142}{3.14159\cdots}$$

$$\approx -0.00013.$$

$$\delta(x)=\frac{\Delta(x_1)}{x_1}=\frac{\frac{1}{2}\times 10^{-3}}{3.142}$$

$$\approx 0.00016.$$

相对误差表示近似值 x 中每单位所含的误差，相对误差一般都以小数形式出现，因此，又称相对误差为百分误差。

下面给出相对误差界与有效数位的关系。

定理 1 如果近似数 x 有 p 位有效数位，则

$$\delta(x)\leqslant\frac{1}{2a_1}\times 10^{-(p-1)} \tag{4}$$

证明 由 § 2(4)知

$$a_1\times 10^m\leqslant |x|\leqslant (a_1+1)\times 10^m.$$

代入(3)且由定义 2 得

$$\delta(x)=\frac{\Delta x}{|x|}\leqslant\frac{\frac{1}{2}\times 10^{m-p+1}}{a_1\times 10^m}=\frac{1}{2a_1}\times 10^{-(p-1)}.$$

例 2 用 $x=2.72$ 来表示 e 的具有三位有效数字的近似数，则相对误差界是

$$\delta(2.72)\leqslant\frac{1}{2\times 2}\times 10^{-2}.$$

推论 如果近似数 x 有 p 位有效数位，则

$$\delta(x)\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-(p-1)}. \tag{5}$$

由此可见，相对误差界可从有效数位推出。

例 3 求$\sqrt{6}$的近似值a，使$\delta(a)\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}$.

解 设a为p位有效数位，则由推论得

$$\delta(a)\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-(p-1)}.$$

由已知 $p-1=3$，得 $p=4$，即a取 4 位有效数字，便满足$\delta(a)\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}$，即 $a=2.449$.

定理 2 若近似数x的相对误差界满足关系式

$$\delta(x)\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{-(p-1)}, \tag{6}$$

则x至少有p位有效数位.

证明 由§2(4)有 $x\leqslant(a_1+1)\times10^m$，又由(6)有

$$\Delta(x)=|x|\delta(x)\leqslant(a_1+1)\times10^m\times\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{-(p-1)}$$

$$=\frac{1}{2}\times10^{m-p+1}.$$

由定义 2 可知x至少有p位有效数位.

以上定理说明，有效数位越多，相对误差界越小.

习 题 一

1 试求用3.14、22/7代替π的相对误差、相对误差界.

2 求$\sqrt{10}$的近似值a，使$\delta(a)\leqslant0.1\%$.

3 如果x有n个有效数字，则

$$\delta(x)\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-(n-1)}$$

4 如果$\delta(x)\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-p}$，求证$x$至少有$p$位有效数位.

§4 误差的传播

在近似数的运算过程中，初始数据的误差对计算结果是有影响的，这种现象称作误差传播问题。误差的传播是否可控，对一个数值方法能否在电子计算机上使用，是一个很重要问题，本节我们将介绍几个有关的基本问题。

（一）函数值的误差

设 y 为某一数学问题的解并与 x_1，x_2，…，x_n有关，即 $y=\varphi(x_1, x_2\cdots, x_n)$，$y$ 在点$X=(x_1, x_2\cdots, x_n)$附近可微分。若测得的一组近似值（即数据）为 $\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \cdots, \tilde{x}_n$，记作$\tilde{X}=(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \cdots, \tilde{x}_n)$，相应解为$\tilde{y}=\varphi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \cdots, \tilde{x}_n)$．下面我们讨论用$\tilde{y}$代替 y 时的误差。假设数据误差较小时，解的误差

$$\begin{aligned}\Delta(y) &= y-\tilde{y}\\ &=\varphi(x_1, x_2, \cdots, x_n)-\varphi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \cdots, \tilde{x}_n)\\ &\approx \sum_{i=1}^{n}\frac{\partial\varphi(x_1, x_2, \cdots, x_n)}{\partial x_i}\Delta(x_i).\end{aligned} \tag{1}$$

解的相对误差

$$\begin{aligned}\delta(y) &= \frac{\Delta(y)}{y}\\ &=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial\varphi(x_1,x_2,\cdots,x_n)}{\partial x_i}\cdot\frac{x_i}{\varphi(x_1,x_2,\cdots x_n)}\delta(x_i)\end{aligned} \tag{2}$$

在式（1）和式（2）中，系数

$$\frac{\partial\varphi(x_1, x_2\cdots, x_n)}{\partial x_i}\text{或}$$

$$\frac{x_i}{\varphi(x_1,x_2\cdots,x_n)}\cdot\frac{\partial\varphi(x_1,x_2,\cdots,x_n)}{\partial x_i},\tag{3}$$

表示结果误差相对于数据误差的放大或缩小倍数。如果绝对值

$$\left|\frac{\partial\varphi(x_1,x_2,\cdots,x_n)}{\partial x_i}\right|,$$

$$\left|\frac{x_i}{\varphi(x_1,x_2\cdots,x_n)}\cdot\frac{\partial\varphi(x_1,x_2,\cdots x_n)}{\partial x_i}\right|$$

很大，则 $\Delta(y)$ 或 $\delta(y)$ 可能很大，即数据 x_i 很小变化可能引起结果 y 的很大误差。

（二）代数运算结果的误差

对于加减乘除及开平方几种运算，从(1) 和(2) 两个公式立即可以推出数据误差和计算结果误差之间的关系。

1. 和的误差

$$\Delta(x_1+x_2)\approx\Delta x_1+\Delta x_2,$$

$$\delta(x_1+x_2)\approx\frac{x_1}{x_1+x_2}\delta(x_1)+\frac{x_2}{x_1+x_2}\delta(x_2).\tag{4}$$

当 x_1 与 x_2 同号时，

$$\frac{x_1}{x_1+x_2}\text{或}\frac{x_2}{x_1+x_2}$$

的绝对值都在 0 和 1 之间，由式(4) 可见此时必有

$$\begin{aligned}|\Delta(x_1+x_2)|&\leqslant|\Delta(x_1)|+|\Delta(x_2)|,\\|\delta(x_1+x_2)|&\leqslant|\delta(x_1)|+|\delta(x_2)|.\end{aligned}\tag{5}$$

这两个不等式说明加法结果的误差界或相对误差界，都不超过相加各项的误差界或相对误差界之和.

当 x_1 与 x_2 异号时，

$$\frac{x_1}{x_1+x_2} \text{或} \frac{x_2}{x_1+x_2}$$

绝对值可能大于1，则上面结论就不正确了。特别，若$x_1+x_2\approx 0$，上式的绝对值可能很大，就可能有

$$|\delta(x_1+x_2)| \gg |\delta(x_1)| + |\delta(x_2)|. \tag{6}$$

因此，大小接近的异号数相加或者大小接近同号数相减。会造成结果误差的严重增大。

2. 积的误差

$$\begin{aligned} &\Delta(x_1x_2) \approx x_2\Delta(x_1) + x_1\Delta(x_2), \\ &\delta(x_1x_2) \approx \delta(x_1) + \delta(x_2). \end{aligned} \tag{7}$$

从(7)式可知，当x_1或x_2的绝对值很大时，$|\Delta(x_1x_2)|$可能很大。这说明，乘数绝对值很大，可能会使误差严重增大，减少精确度。

3. 商的误差

$$\begin{aligned} &\Delta\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \frac{x_2}{x_2^2}\Delta(x_1) - \frac{x_1}{x_2^2}\Delta(x_2), \\ &\delta\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \delta(x_1) - \delta(x_2). \end{aligned} \tag{8}$$

从(8)式可见，除数接近于零，可能会使误差严重增大，减少精确度。

4. 开方的误差

$$\begin{aligned} &\Delta(\sqrt{x}) \approx \frac{1}{2\sqrt{x}}\Delta(x), \\ &\delta(\sqrt{x}) \approx \frac{1}{2}\delta(x) . \end{aligned} \tag{9}$$

从(9)式可见，平方根的相对误差是被开方数的相对误差的1/2。即方根的精度比被开方数的精度高。