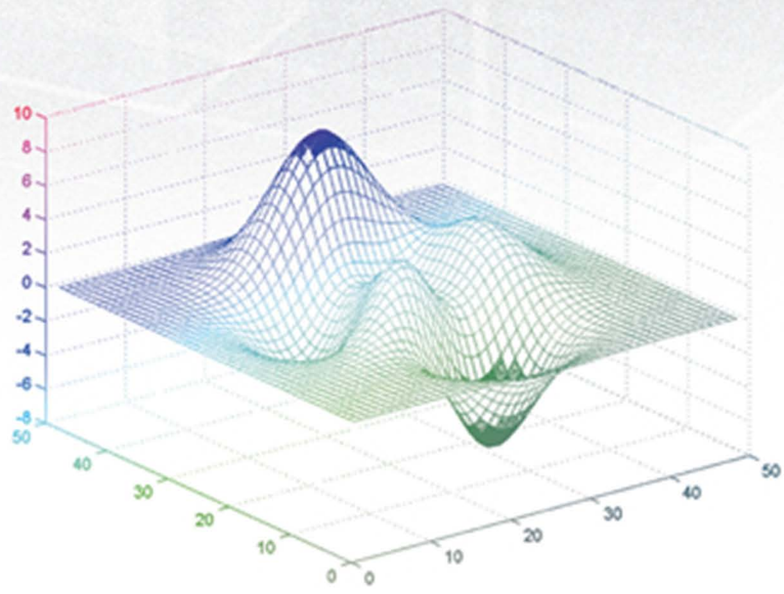
普通高等教育公共基础课精品系列教材

计算方法

陈丽娟 / 主编



北京理工大学出版社
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

普通高等教育公共基础课精品系列教材

计算方法

主　编　陈丽娟
副主编　张　蕾　王丽莎　李明珠

北京理工大学出版社
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

内 容 简 介

计算机的高速发展为用数值计算方法解决科学技术中的各种数学问题提供了简便而有力的条件。数值计算方法已成为当代大学生必须掌握的基础知识。本书讲述数值计算的理论与基本方法，内容包括：误差概念及数值计算中的若干问题、插值法、函数逼近与曲线拟合、方程的近似解法、线性方程组的直接解法、线性方程组的迭代解法、数值积分与数值微分、常微分方程的数值解法、矩阵特征值和特征向量的计算。本书注重理论联系实际，各章节都配备了丰富的数值计算例题与适量的数值实验题，部分章节配备了教学视频。本书可作为大学本科和研究生教材，亦可供相关人员参考。

图书在版编目（CIP）数据

计算方法／陈丽娟主编. —北京：北京理工大学出版社，2020.3
ISBN 978-7-5682-8171-3

Ⅰ.①计…　Ⅱ.①陈…　Ⅲ.①计算方法-高等学校-教材　Ⅳ.①O24

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2020）第 030411 号

出版发行／北京理工大学出版社有限责任公司
社　　址／北京市海淀区中关村南大街 5 号
邮　　编／100081
电　　话／（010）68914775（总编室）
　　　　　（010）82562903（教材售后服务热线）
　　　　　（010）68948351（其他图书服务热线）
网　　址／http：//www. bitpress. com. cn
经　　销／全国各地新华书店
印　　刷／唐山富达印务有限公司
开　　本／787 毫米×1092 毫米　1/16
印　　张／13. 5
字　　数／282 千字
版　　次／2020 年 3 月第 1 版　2020 年 3 月第 1 次印刷
定　　价／42. 00 元

责任编辑／江　立
文案编辑／赵　轩
责任校对／刘亚男
责任印制／李志强

前言

随着科学技术的飞速发展和计算机的广泛应用，科学计算已成为继理论方法、试验方法后的第三种基本手段。掌握数值计算方法的基本知识，已成为当代大学生必备的技能。本书是根据编者多年教授计算方法课程的实际感受，在不断充实与更新教学内容的基础上编写的。

本书讲述数值计算的理论与基本方法，内容分为 9 章。第 1 章介绍了误差概念以及数值计算中的若干问题；第 2 章介绍了拉格朗日插值法、牛顿插值法、埃尔米特插值法等；第 3 章介绍了建立数学模型的曲线拟合与逼近理论；第 4 章介绍了各种消元法、矩阵分解法以及迭代法；第 5 章介绍了二分法、迭代法、牛顿法等；第 6 章介绍了雅可比迭代法、高斯-赛德尔迭代法等；第 7 章介绍了龙贝格算法、高斯公式等；第 8 章介绍了欧拉法、龙格-库塔法等；第 9 章介绍了幂法和反幂法、雅可比方法等。每一章还有部分例题适合在 MATLAB 中进行实际操作。

本书第 1、4、5、6 章由陈丽娟编写，第 2、3、7 章由张蕾编写，第 8、9 章由王丽莎编写，书中 MATLAB 程序由陈丽娟和李明珠编写。视频由青岛理工大学陈丽娟、张蕾、王丽莎、张立杰，以及哈尔滨工业大学马强共同录制。全书由陈丽娟负责统稿。

本书注重理论联系实际，各章节都配备了丰富的数值计算例题。在实践环节，各章都给出了适当的数值实验题，以作为算法描述和方法应用的补充，便于读者更好地理解和应用本课程所学内容，提高其数学素质以及运用计算机解决实际问题、进行科学计算的能力。此外，本书部分章节还配备了教学视频。本书可作为本科生和研究生计算方法课程的教材或者教学参考书。

青岛理工大学对本教材的编写给予了大力支持和鼓励，在此表示感谢。同时也感谢北京理工大学出版社的同志对出版本书所做的大量工作和帮助。

本书在选材和内容叙述方面可能存在不当或者错误之处，在此恳请广大读者和各位同行们给予批评和指正。

编　者

2019. 08

目 录

第 1 章

绪　论

本章主要介绍计算方法的研究对象与特点，介绍误差的基本概念，并且提出在数值计算中应当普遍遵循的若干原则。

1.1　计算方法的研究对象与特点

计算方法又称数值分析，属于计算数学的范畴，是研究各种数学问题的数值方法设计、分析以及有关的数学理论和具体实现的一门学科。由于近几十年来计算机的迅速发展，数值计算方法的应用已经普遍深入到各个科学领域，很多复杂的和大规模的计算问题都可以在计算机上进行计算，新的、有效的数值计算方法不断出现。现在，数值计算已经成为各门自然科学和工程技术科学的一种重要手段，与实验和理论并列的一个不可缺少的环节。所以，计算方法既是一个基础性的，同时也是一个应用性的数学学科，与其他学科的联系十分紧密。

视频 01：计算方法的任务与特点

由于大量的问题要在计算机上求解，所以本书要对各种数值计算方法进行分析，内容包括：误差、稳定性、收敛性、计算工作量、存储量和自适应性、准确性、效率和使用的方便性，以及这些基本的概念用于刻画数值方法的适用范围、可靠性等。此外，本书还涉及科学和工程计算中常见的数学问题，如函数的插值、离散数据的拟合、微分与积分、线性和非线性方程、矩阵特征值问题、微分方程等。

要用数值计算方法求解数学问题，就必须把所求解的数学问题转化为按照一定规则进行的一系列四则运算。计算机只能机械地执行人们所给定的指令，交给计算机的每一步解题方法，都必须加以准确地规定。同一个问题可能有多种数值计算方法，但不一定都有效。用计算机求数学问题不是简单的构造算法，它涉及多方面的理论问题，例如算法的收敛性和稳定

性等。除理论外，还需要数值实验来检验。计算方法是一门与计算机使用密切结合的、实用性很强的数学课程，它既有纯数学的高度抽象性与严密科学性的特点，又有应用广泛性与实际实验的高度技术性的特点。

计算方法所处理的问题都是科学与工程计算中最基本的内容，首先学习时要注意掌握方法的原理和思想；其次，要上机练习，学习使用各种数值计算方法解决实际问题，熟悉方法的计算过程。

1.2　误差

1.2.1　误差的来源与种类

在工程和科学计算中需要建立数学模型、测量数据，以便用计算机来解决问题。根据误差的来源，误差可分为以下 4 种。

1. 模型误差

应用数学工具解决实际问题，首先要对被描述的实际问题进行抽象、简化，以得到实际问题的数学模型。实际问题的解与数学模型的解之间的误差称为模型误差。

2. 观测误差

在数学模型中，通常要包含一些观测数据而确定的参数。对数学模型中的一些参数的观测数据只能是近似的，测量值与真值之间的误差称为观测误差。

3. 截断误差

在解决实际问题时，人们可能用容易计算的问题代替不易计算的问题，也可能用有限过程逼近无限过程，这个过程所产生的误差称为截断误差。例如，有

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} + \cdots$$

当 $|x|$ 较小时，若用 $2n$ 次多项式作为 $\cos x$ 的近似值，则截断误差的绝对值不超过 $\frac{x^{2n+2}}{(2n+2)!}$。这个误差就是截断误差。

4. 舍入误差

有了求解数学问题的计算公式以后，用计算机作数值计算时，一般也不能获得数值计算公式的准确解，而需要对原始数据、中间结果和最终结果取有限位数字，即要进行舍入。这种由舍入产生的误差称为舍入误差。

例如，$\pi=3.141\,592\,6\cdots$，如果用 3.141 6 代替 π，则产生的舍入误差为 $\pi-3.141\,6=-0.000\,007\,3\cdots$，这就是舍入误差。

显然，上述 4 类误差都会影响计算结果的准确性，但模型误差和观测误差往往是计算工

作者不能独立解决的，它们是需要与各有关学科的科学工作者共同研究的问题。因此，在计算方法课程中，主要研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响。

1.2.2　误差与有效数字

视频02：误差与有效数字

定义 1.1　设数 x 的近似值为 x^*，记 $e(x)=x^*-x$ 为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。

准确值 x 是未知的，因而 $e(x)$ 也是未知的，但往往可以估计出绝对误差的一个上界，即 $|e(x)|=|x^*-x|\leqslant\varepsilon$，称 ε 为 x^* 的绝对误差限，即 $x^*-\varepsilon\leqslant x\leqslant x^*+\varepsilon$，常记为 $x=x^*\pm\varepsilon$。

绝对误差还不足以刻画近似数的精确程度，例如 $x=1.234\pm0.001$，$y=0.002\pm0.001$，虽然两个近似数绝对误差限都是 0.001，但 x 的近似效果要比 y 要好。所以，除考虑误差的大小外，还应考虑准确值本身的大小。

定义 1.2　$e_r(x)=\dfrac{e(x)}{x}=\dfrac{x^*-x}{x}$ 称为近似值 x^* 的相对误差。

在实际中，由于真值 x 总是未知的，常取 $e_r(x)=\dfrac{e(x)}{x^*}=\dfrac{x^*-x}{x^*}$。它的绝对值的上界 $|e_r(x)|=\left|\dfrac{e(x)}{x^*}\right|=\left|\dfrac{x^*-x}{x^*}\right|\leqslant\varepsilon_r$，称 ε_r 为该近似值的相对误差限。

如已知 $\pi=3.141\ 592\ 6\cdots$，若近似值 $\pi^*=3.14$，则 $e(\pi)=\pi^*-\pi=0.001\ 592\ 6\cdots$。$|e(\pi)|=|\pi^*-\pi|\leqslant0.002$，即绝对误差限为0.002。$|e_r(\pi)|=\left|\dfrac{e(\pi)}{\pi^*}\right|=\left|\dfrac{\pi^*-\pi}{\pi^*}\right|\leqslant0.000\ 6$，即相对误差限为 0.000 6。

定义 1.3　设数 x 的近似值为 x^*，则

$$x^*=\pm10^m\times0.a_1a_2\cdots a_i\cdots \tag{1.2.1}$$

其中，a_1 是 1 ~9 中的一个数字，$a_i(i\geqslant2)$ 是 0 ~9 中的一个数，m 为整数。若 $|x-x^*|\leqslant\dfrac{1}{2}\times10^{m-n}$，则称 x^* 有 n 位有效数字。

例如，$x=\pi=3.141\ 592\ 653\ 5\cdots$，按四舍五入的原则得到数 $x_1^*=3.14$，$x_2^*=3.141\ 6$，$|\pi-x_1^*|\approx0.002<0.005=\dfrac{1}{2}\times10^{(1-3)}$，$|\pi-x_2^*|\approx0.000\ 008<0.000\ 05=\dfrac{1}{2}\times10^{(1-5)}$。则 x_1^* 具有 3 位有效数字，x_2^* 具有 5 位有效数字。

因此，近似数的有效数字不但给出了近似值的大小，而且还指出了它的绝对误差限。显然，近似值的有效数字位数越多，相对误差就越小，反之则反。下面给出相对误差限与有效数字的关系。

定理 1.1　设 x 的近似值 x^* 满足式（1.2.1），则：

（1）若 x^* 有 n 位有效数字，则其相对误差为 $e_r(x)\leqslant\dfrac{1}{2a_1}\times10^{1-n}$；

（2）若 x^* 的相对误差为 $e_r(x) \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n}$，则 x^* 至少有 n 位有效数字。

证明 （1）由式（1.2.1）可得 $a_1 \times 10^{m-1} \leqslant |x^*| \leqslant (a_1+1) \times 10^{m-1}$，所以，得

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

（2）由 $|x-x^*| \leqslant |x^*|$，$|e_r(x)| \leqslant (a_1+1) \times 10^{m-1} \times \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$，可知 x^* 有 n 位有效数字。

例 1.1：要使 $\sqrt{20}$ 的近似值的相对误差限小于 0.1%，要取几位有效数字？

解 由于 $4<\sqrt{20}<5$，所以 $a_1=4$，由定理

$$\frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n} \leqslant 0.1\%$$

可知 $n=4$，即只要对 $\sqrt{20}$ 的近似值取 4 位有效数字，其相对误差就大于 0.1%，此时 $\sqrt{20} \approx 4.472$。

1.2.3 数值运算的误差估计

两个近似数 x_1^*、x_2^*，其误差分别为 $e(x_1)$、$e(x_2)$，它们进行加、减、乘、除运算得到的绝对误差分别为

$$e(x_1 \pm x_2) = e(x_1) \pm e(x_2)$$

$$e(x_1 x_2) \approx |x_1^*| e(x_1) + |x_2^*| e(x_2)$$

$$e\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \frac{|x_1^*| e(x_2) + |x_2^*| e(x_1)}{|x_2^*|^2}$$

下面，我们讨论并计算 $y=f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 时的误差问题。设 x_1^*，x_2^*，…，x_n^* 依次是 x_1，x_2，…，x_n 的近似值，则 y 的近似值 $y^*=f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$。函数值 y^* 的绝对误差可利用泰勒展开式来得到，即

$$ef(x_1^*, \cdots, x_n^*) \approx \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i} \right| e(x_i) \tag{1.2.2}$$

则相对误差为

$$e_r f(x_1^*, \cdots, x_n^*) \approx \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i} \right| \frac{e(x_i)}{|f(x_1^*, \cdots, x_n^*)|} \tag{1.2.3}$$

例 1.2：已测得某场地长 l 的近似值为 $l^*=110$ m，宽 d 的近似值为 $d^*=80$ m，已知 $|l-l^*| \leqslant 0.2$ m，$|d-d^*| \leqslant 0.1$ m，试求面积 $S=ld$ 的绝对误差限与相对误差限。

解 因 $S=ld$，$\frac{\partial S}{\partial l}=d$，$\frac{\partial S}{\partial d}=l$，由式（1.2.2）知

$$e(S^*) \approx \left|\left(\frac{\partial S}{\partial l}\right)^*\right| e(l^*) + \left|\left(\frac{\partial S}{\partial d}\right)^*\right| e(d^*)$$

其中绝对误差为：$\left(\frac{\partial S}{\partial l}\right)^* = d^* = 80\ \text{m}$，$\left(\frac{\partial S}{\partial d}\right)^* = l^* = 110\ \text{m}$，$e(l^*) = 0.2\ \text{m}$，$e(d^*) = 0.1\ \text{m}$，从而有

$$e(S) = 80\times0.2+110\times0.1 = 27\ \text{m}^2$$

相对误差为

$$e_r(S) = \frac{e(S)}{|S^*|} = \frac{27}{80\times110} = 0.31\%$$

1.2.4 数值计算中应该注意的一些原则

由上述讨论可知，误差分析在数值计算中是一个很重要又很复杂的问题。因为在数值计算中每一步运算都可能产生误差，而一个科学计算问题的解决，往往要经过成千上万次运算，如果每一步运算都分析误差，显然是不可能的，其实也是不必要的。人们经常通过对误差的某传播规律的分析，指出在数值计算中应该注意的一些原则，有助于鉴别计算结果的可靠性并防止误差危害现象的产生，下面介绍在数值计算中应该注意的一些原则。

视频 03：计算方法中应遵循的原则

1. 避免两个相近数相减

在数值计算中，两个相近的数作减法时有效数字会损失。例如，求 $y = \sqrt{x+1} - \sqrt{x}$ 之值。当 $x = 1\ 000$ 时，y 的准确值为 0.015 80；若两者直接相减，即 $y = \sqrt{1\ 001} - \sqrt{1\ 000} = 31.64 - 31.62 = 0.02$。这个结果只有 1 位有效数字，损失了 3 位有效数字，从而绝对误差和相对误差都变得很大，严重影响计算结果的精度。若处理成 $y = \sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$，按此公式可求得 $y = 0.015\ 81$，则 y 有 4 位有效数字，可见改变计算公式，可以避免两相近数相减引起有效数字损失，而得到较精确的结果。

类似地，有 $1-\cos x = 2\sin^2\frac{x}{2}$；当 x_1 和 x_2 比较相近时，有 $\ln x_1 - \ln x_2 = \ln\frac{x_1}{x_2}$。

2. 避免绝对值太小的数作除数

在机器上若用绝对值很小的数作除数，则会溢出，而且当很小的数稍有一点误差时，对计算结果影响很大。

例如，有

$$\frac{2.718\ 2}{0.001} = 2\ 718.2$$

如分母变为 0.001 1，也即分母只有 0.000 1 的变化时，则

$$\frac{2.718\ 2}{0.001\ 1} = 2\ 471.1$$

此时，在分母变化很小的情况下，商却发生很大变化。因此，在计算过程中既要避免两个相近数相减，更要避免再用这个差作除数。

3. 避免大数吃小数

如 $a = 10^9$，$b = 9$，设想在 8 位浮点数系中相加，即

$$\begin{aligned} a + b &= 0.100\,000\,00 \times 10^{10} + 0.900\,000\,00 \times 10^{1} \\ &= 0.100\,000\,00 \times 10^{10} + 0.000\,000\,000\,9 \times 10^{10} \\ &= 0.100\,000\,00 \times 10^{10} \end{aligned}$$

由于只保留 8 位有效数字，09 被舍去。

例 1.3：计算 0.499 4+100 0+0.000 600 0+0.409 0，并保留 4 位有效数字。

解 0.499 4+1 000≈1 000，1 000+0.000 600 0≈1 000，1 000+0.409 0≈1 000；改变顺序后，有 0.499 4+0.000 600 0≈0.500 0，0.500 0+0.409 0≈0.909 0，100 0+0.909 0≈1 001。即正确的计算结果应为 1 001。

4. 数值算法要稳定

所谓算法，就是给定一些数据，按着某种规定的次序进行计算的一个运算序列。算法是一个近似的计算过程，选择一个算法，主要要求它的计算结果能达到给定的精度。一般而言，在计算过程中初始数据的误差和计算中产生的舍入误差总是存在的，而数值解是逐步求出的，前一步数值解的误差必然要影响到后一步数值解的精度。人们把运算过程中舍入误差增长可以控制的计算公式称为稳定的数值算法，否则是不稳定的数值算法。只有稳定的数值算法才可能给出可靠的计算结果，不稳定的数值算法毫无实用价值。下面用一个例子来简单介绍一下稳定性的概念。

例 1.4：求 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x$ 的值，其中 $n = 0, 1, 2, \cdots, 8$。

解 由于

$$I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x+5}\mathrm{d}x = \int_0^1 x^{n-1}\mathrm{d}x = \frac{1}{n}$$

初值 I_0 为

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5}\mathrm{d}x = \ln 6 - \ln 5 = \ln(1.2)$$

于是可建立递推公式，即

$$\begin{cases} I_0 = \ln(1.2) \\ I_n = \dfrac{1}{n} - 5I_{n-1} \qquad (n = 1, 2, \cdots, 8) \end{cases} \tag{1.2.4}$$

若取 $I_0 = \ln(1.2) \approx 0.182$，则按式（1.2.4）就可以逐步算得

$$I_1 = 1 - 5I_0 \approx 0.09$$

$$I_2 = \frac{1}{2} - 5I_1 \approx 0.05$$

$$I_3 = \frac{1}{3} - 5I_2 \approx 0.083$$

$$I_4 = \frac{1}{4} - 5I_3 \approx -0.165$$

因为在［0，1］上被积函数$\frac{x^n}{x+5} \geqslant 0$(仅当$x = 0$时，等号成立)，且当$m > n$时，$\frac{x^n}{x+5} \geqslant \frac{x^m}{x+5}$(仅当$x = 0$时，等号成立)，所以$I_n(n = 0, 1, 2, \cdots, 8)$是恒正的，并有$I_0 > I_1 > I_2 > \cdots > I_8 > 0$。

在上述计算结果中，I_4的近似值是负的，这个结果显然是错的。为什么会这样呢？这就是误差传播所引起的危害。由式(1.2.4)可看出，I_{n-1}的误差扩大到5倍后传给I_n，因而初值I_0的误差对以后各步计算结果的影响随着n的增大愈来愈严重，这就造成I_4的计算结果严重失真。

如果改变计算公式，先取一个I_n的近似值，用下面的公式倒过来计算I_{n-1}，I_{n-2}，$\cdots$，I_0，即

$$I_{k-1} = \frac{1}{5k} - \frac{1}{5}I_k \qquad (k = n, n-1, \cdots, 1) \tag{1.2.5}$$

这时，可发现I_k的误差减小到$\frac{1}{5}$后传给I_{k-1}，因而初值的误差对以后各步的计算结果的影响是随着n的增大而愈来愈小。

由于误差是逐步衰减的，初值I_n可以这样确定，不妨设$I_9 \approx I_{10}$，于是由$I_9 = \frac{1}{50} - \frac{1}{5}I_{10}$可求得$I_9 \approx 0.017$，按式（1.2.5）可逐次求得

$$\begin{aligned} &I_8 \approx 0.019 && I_7 \approx 0.021 \\ &I_6 \approx 0.024 && I_5 \approx 0.028 \\ &I_4 \approx 0.034 && I_3 \approx 0.043 \\ &I_2 \approx 0.058 && I_1 \approx 0.088 \\ &I_0 \approx 0.182 && \end{aligned}$$

显然，这样算出的I_0与$\ln(1.2)$的值比较符合。虽然初值I_9很粗糙，但因为用式（1.2.5）计算时，误差是逐步衰减的，所以计算结果相当可靠。

比较以上两个计算方案，显然，前者是一个不稳定的数值算法，后者是一个稳定的数值算法。对于一个稳定的计算过程，由于舍入误差不增大，因而不具体估计舍入误差也是可用的；而对于一个不稳定的计算过程，如果计算步骤太多，就可能出现错误结果。因此，在实际应用中应选用稳定的数值算法，尽量避免使用不稳定的数值算法。

5. 先化简再计算，减少步骤，避免误差积累

对于给定的x，求下列n次多项式的值。多项式为

$$P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n \tag{1.2.6}$$