中国矿业大学（北京）研究生教材
中央高校基本科研业务费项目资助
中国矿业大学（北京）研究生教材出版基金资助

数值计算方法

濮英英　编著

煤炭工业出版社

中国矿业大学(北京)研究生教材
中央高校基本科研业务费项目资助
中国矿业大学(北京)研究生教材出版基金资助

数值计算方法

濮英英 编著

煤炭工业出版社

·北 京·

图书在版编目（CIP）数据

数值计算方法/濮英英编著．--北京：煤炭工业出版社，2014

ISBN 978-7-5020-4401-5

Ⅰ.①数…　Ⅱ.①濮…　Ⅲ.①数值计算—计算方法　Ⅳ.①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2013）第 308695 号

煤炭工业出版社　出版
（北京市朝阳区芍药居 35 号　100029）
网址：www. cciph. com. cn
北京市郑庄宏伟印刷厂　印刷
新华书店北京发行所　发行
*
开本 880mm × 1230mm $^1/_{32}$　印张 $6^3/_4$
字数 176 千字
2014 年 4 月第 1 版　2014 年 4 月第 1 次印刷
社内编号 7233　定价 20.00 元

前　　言

科学计算需要解决的问题非常广泛，使用的数值方法多种多样，作为非数学类专业的工科研究生的公共基础课，本书包含了计算方法的传统内容，如误差分析，插值，拟合，数值积分与微分，线性和非线性方程求解等。考虑到我校工科学生的具体情况，舍去了一些需要较多数学基础知识的问题和方法，本教程略去常微分方程数值解、代数特征值问题等。虽然有些遗憾，但由此能更深入地讨论学习一部分典型问题，比泛泛地述说许多内容往往更能使学生深刻领会处理科学计算的主要思想，同时只需要读者具备高等数学和线性代数的基础知识。本书尽可能详细阐明其意义及其处理问题的基本方法，取材由浅入深，期望给读者一个清晰的思路。本书各章内容具有一定的独立性，各章结束都配有相关例题以备读者加深对所学知识的理解和掌握。

无论是在传统学科领域还是在高科技领域均少不了数值计算方法的实现，现已成为优化工程设计进行数值模拟实验中的一种重要手段。因此学习掌握数值计算方法及相关理论已成为科学教育的重要内容。为适应工科读者的学习和指导需要，编写本书，旨在提高我校部分专业研究生的数学素质和理论水平，学以致用，将所学方法用于科学研究。

本书的出版承中国矿业大学（北京）研究生院的鼎力支持，在此表示诚挚的谢意。

目　　次

1 绪 论

1.1 数值计算方法的对象和特点

早在 15 世纪出现了以解析几何学和微积分学为标志的近代数学以来，计算也随之兴旺起来，由于当时计算工具的落后，使得计算数学的发展明显滞后。随着计算机发展的广泛应用使得它与计算数学的关系越来越密切，科学计算方法发展成为与科学理论、科学实验相并进的第三种科学方法。使它在各种科技领域与科学计算的结合产生了一系列计算性的学科分支：在计算物理、计算化学、计算生物学、计算地质学、计算气象学（数值天气预报）、计算材料学、计算流体力学、计算天文学、数理经济学的领域中。研究理论基础和核心是计算数学。

计算数学主要研究内容有，函数的数值逼近；数值微分与数值积分；非线性方程数值解；数值线性代数；常微分和偏微分方程数值解（图 1－1）。

数值计算方法是近代数学的一个重要分支，它是解决各种科学研究实际问题中各种数学问题的数值解法（近似解法），包括方法的构造和求解过程的理论分析。数值计算方法又称为计算方法或数值分析，当前是一门与计算机应用密切结合的实用性很强的数学课程。

利用计算机解决列举计算问题一般有以下几个大过程：

实际问题构造数学模型—选择数值计算方法—程序设计—上机计算求出结果—实际问题（验证）。

数值计算方法是以数学问题为研究对象的，它是数学的一个分支，它的特点在于与计算机的密切结合，着重研究求解的数值计

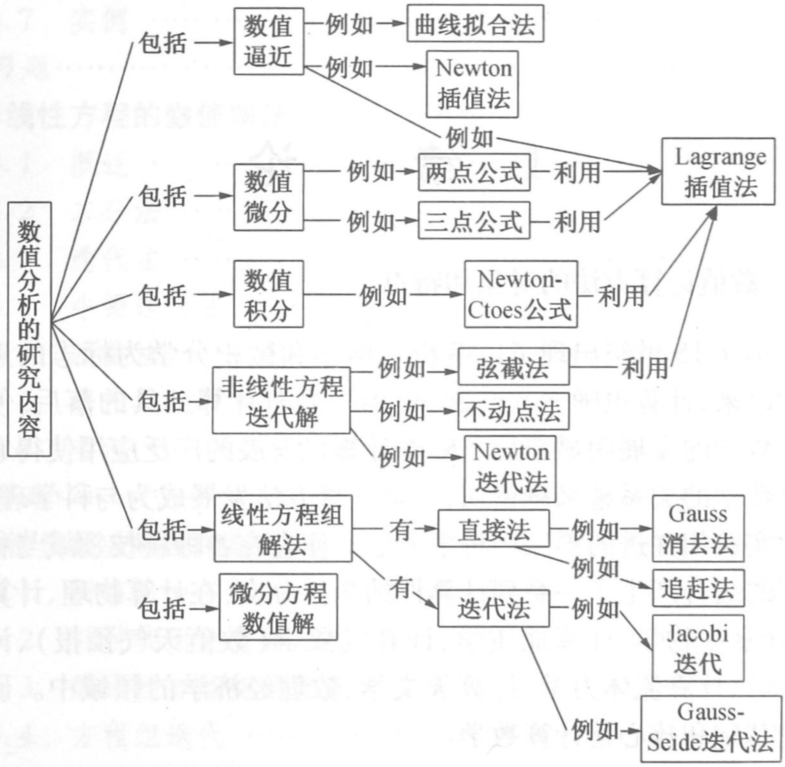

图1-1　数值分析的研究内容

算方法以及与此相关的理论分析。收敛性,稳定性,误差分析等。是把理论与计算紧密结合起来,其方法的近似性是建立在严密的理论基础之上。

此外,它还有以下几个基本特点。

1.1.1　采用"构造性"方法

数值方法中许多问题的存在性证明都是以"构造性"方法为基础。所谓用构造性方法来证明一个问题的存在性,是指具体地把这个问题的计算公式构造出来。这种方法不但证明了问题的存在性,而且有了具体的计算公式,就便于编制程序上机计算。

【例1-1】证明二次方程 $ax^2+bx+c=0$ 的根。

采用构造性证明:当 $x\neq0$ 是方程改写为

$$x^2+\frac{b}{a}x+\frac{c}{a}=0$$

因此对任意的 x,a,b 和 c 都有

$$x^2+\frac{b}{a}x+\frac{c}{a}=\left(x+\frac{b}{2a}\right)^2-\left(\frac{b}{2a}\right)^2+\frac{c}{a}$$

$$=x^2+\frac{b}{a}x+\left(\frac{b}{2a}\right)^2-\left(\frac{b}{2a}\right)^2+\frac{c}{a}$$

故 x 是方程根的充要条件是

$$\left(x+\frac{b}{2a}\right)^2=\left(\frac{b}{2a}\right)^2-\frac{c}{a}$$

当且仅当 $\left(\frac{b}{2a}\right)^2-\frac{c}{a}\geqslant 0$，即 $b^2-4ac\geqslant 0$ 时，x 是方程的根，即

$$\begin{cases} x=-\dfrac{b}{2a}\pm\dfrac{\sqrt{b^2-4ac}}{2a} & (b^2-4ac\geqslant 0) \\ x=-\dfrac{b}{2a}\pm i\dfrac{\sqrt{|b^2-4ac|}}{2a} & (b^2-4ac<0) \end{cases} \tag{1-1}$$

这证明了方程存在两个实根和一对共轭复根，并且根据式(1-1)，在给出证明的同时又得到了计算根的方法。

1.1.2 采用“离散化”方法

把求连续变量问题转化为求离散变量问题，称为离散化。

一个连续的数学问题要上机计算，必须进行离散化。它是数值计算中最基本的概念和方法之一。

例如把定积分离散成求和，把微分方程离散成差分方程等。

【例 1-2】计算定积分。

$$I=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \tag{1-2}$$

解 对于求定积分的数学问题，根据求定积分中“大化小，常代变，近似和”的思想。我们将求定积分的运算转化为求函数值的运算。在后面的学习中采用复合梯形公式近似计算。

即

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(\xi_i)\Delta x_i = \sum_{i=0}^{n}\left\{\frac{x_{i+1}-x_i}{2}[f(x_i)+f(x_{i+1})]\right\}$$

$$=\frac{b-a}{n}\left[\frac{1}{2}(f(x_0)+f(x_n))+f(x_1)+\cdots f(x_{n-1})\right] \tag{1-3}$$

其中 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ 是 n 等分区间 $[a,b]$ 的分点，$f(x_0)$，$f(x_1)$，…，$f(x_n)$ 是被积函数在各分点的函数值。

式(1-3)就是把定积分离散为求和运算。

1.1.3 采用“递推化”方法

所谓递推化，其基本思想就是将一个复杂的计算过程归结为简单过程的多次重复，由于递推化算法便于编写计算机程序，所以数值计算中许多数值方法常常采用“递推化”方法。

【例 1-3】求多项式的值。

$$P_n(x)=a_n\cdot x^n+a_{n-1}\cdot x^{n-1}+\cdots+a_2\cdot x^2+a_1\cdot x+a_0$$

解 利用递推公式

$$\begin{cases} S_0=a_n \\ S_k=S_{k-1}x+S_{n-k} \end{cases} \tag{1-4}$$

对 $k=1,2,\cdots,n$ 反复执行式(1-4)，最终得到的 S_n 就是多项式 $P_n(x)$ 的值。以上算法称为秦九韶算法。

1.1.4 采用“近似替代”方法

我们知道对于计算机的计算必须在有限次停止，所以在计算数学中，常表现为对无穷过程的截断，即把求解一个无限运算的数学问题，转化为满足条件限定误差要求的有限步来近似完成。

【例 1-4】计算无理数 e 的近似值。

根据泰勒公式得：

$$e^x=1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots\frac{x^n}{n!}+\cdots \tag{1-5}$$

取 $x=1$，则

$$e=1+1+\frac{1}{2!}+\cdots+\frac{1}{n!}+\cdots$$

这是一个无限过程,计算机无法实现,只能在式(1－5)中取有限项计算,再估计误差。

若取 $e \approx 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \cdots + \frac{1}{n!}$,其误差为:

$$|R_n| < \frac{e}{(n+1)!} < \frac{3}{(n+1)!}$$

1.2　误差

许多数值方法给出的解答仅仅是所要求的真解的某种近似,因而研究数值方法,必须注重误差分析、分析误差的来源,误差的传播情况以及对计算结果给出合理的误差估计。误差的来源是多方面的(图1－2)。

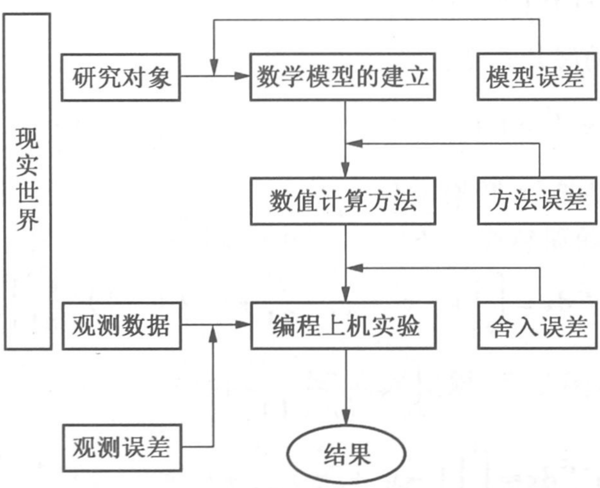

图1－2　误差的来源

1.2.1　误差的来源

1. 模型误差

用计算机解决科学计算问题,首先要建立数学模型,由实际问题建立的数学模型,通常都要简化和近似,这就不可避免地要产生

误差。建立数学模型的解与实际问题的解之间出现的误差称为模型误差。

2. 观测误差

在数学模型中通常总包含一些观测数据，这些数据的值是由观测或实验确定，由于观测不可能绝对准确，这时会产生观测误差或参数误差。

3. 截断误差（也称为方法误差）

数学模型确定确定后，在设计算法时，必然要近似处理，寻求一些简化。当数学模型不能得到准确解时，需要某种数值方法进行计算，即使计算过程中绝对准确，但计算的结果与这种模型的准确解，因此方法本身会引起截断误差或方法误差。

例如，计算$\int_0^1 e^{-x^2}dx$

由泰勒展开式知：

$$e^{-x^2}=1+(-x^2)+\frac{(-x^2)^2}{2!}+\frac{(-x^2)^3}{3!}+\cdots+\frac{(-x^2)^n}{n!}+\frac{(-x^2)^{n+1}}{(n+1)!}e^{-\theta x^2}$$

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx=\int_0^1\left[1-x^2+\frac{x^4}{2!}-\frac{x^6}{3!}+\cdots+(-1)^n\frac{x^{2n}}{n!}\right]dx+\int_0^1+\frac{(-x^2)^{n+1}}{(n+1)!}e^{-\theta x^2}$$

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx\approx\int_0^1\left[1-x^2+\frac{x^4}{2!}-\frac{x^6}{3!}+\cdots+(-1)^n\frac{x^{2n}}{n!}\right]dx$$

$\int_0^1+\frac{(-x^2)^{n+1}}{(n+1)!}e^{-\theta x^2}$为此方法的截断误差或方法误差。

4. 舍入误差

进行数值计算时，计算机的字长是有限的，对于参与运算的数字的位数都有限制，超过位数的数字需进行舍入。而每一步运算均需四舍五入，便会产生误差，称为舍入误差或计算误差。

上述几种误差都会影响计算结果的准确性,数值计算中除了研究求解数学问题的数值方法外. 还要研究计算结果的误差是否满足精度要求,这就是误差估计问题,数值计算中不考虑这两种误差即模型误差和观测误差,主要研究的是截断误差与舍入误差对计算结果的影响。

重视误差分析和控制误差扩散是十分重要的,没有误差分析的计算结果是不可信的。

1.2.2 绝对误差、相对误差和有效数字

我们常用绝对误差、相对误差或有效数字来说明一个近似值的准确程度。

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。

注意:误差 e 是有量纲的,可正可负。

定义 1-2 设 x 为准确值,x^* 是近似值,则称 $e_r=\dfrac{e}{x}=\dfrac{x^*-x}{x}$ $(x\neq0)$ 为近似值 x^* 的相对误差。

通常我们无法得到准确值 x,也不可能得到 x^* 的绝对误差 e 的真值,只能根据测量的情况,估计出误差的绝对值的一个上界 ε。

即
$$|e|=|x^*-x|\leqslant\varepsilon$$
这个正数 ε 通常叫做近似值 x^* 的绝对误差限,有了绝对误差限,就可知道真值 x 的范围

$$x^*-\varepsilon\leqslant x\leqslant x^*+\varepsilon$$

绝对误差的大小,在许多情况下还不能完全刻划一个近似值的准确程度,例如测量 1 km 和 1 m 两个长度,若它们的绝对误差都是 1 cm,显然前者的测量比较准确。

所以,决定一个量的近似值的精确度,除了考虑绝对误差的大小外,还需要考虑该量本身的大小,为此引入相对误差的概念。

相对误差可正可负,它的绝对值上界叫做相对误差限,即如果

有正数$|e_a|\leqslant e_r$，即$\frac{|x-x^*|}{|x|}\leqslant\frac{\varepsilon}{|x^*|}\leqslant\varepsilon_r$，则称 e_r 为 x^* 的相对误差限。

由于真值 x 一般是不知道的，但当 e_r 较小时，e_r 中分母 x 可用 x^* 代替，其两者之差关于 e_r 的高阶无穷小。所以在实际计算中，用$\frac{|x-x^*|}{|x|}=\frac{\varepsilon}{|x^*|}$作为 x^* 的相对误差。另外在误差分析中，相对误差比绝对误差更重要。

1.2.3 有效数字

为了从近似数的有限位小数表示本身就能知道近似数的精度，引入有效数字概念。当 x 有很多位数字时，我们常按照“四舍五入”原则，取 x 的前几位数字作为 x 的近似值 x^*。例如：$x=1.41421356237\cdots$若只取到小数后四位数字得 $x^*=1.4142$，其误差为$0.00001356\cdots$，误差限为$0.00005=0.5\times10^{-4}$。称 x^* 准确到小数后第 4 位，并称由此位算起的前 5 位数字 1.4142 为 x^* 的有效数字。

一般说来，若近似值 x^* 的误差不超过某位数字的半个单位，而从该位数字到 x^* 最左边的那个非零数字（即自左向右看，第一个出现的非零数字）共有 n 位，那么这 n 位数字都称为 x 的有效数字，即

$$x^*=\overbrace{\times_{\text{自左向右看，第一个非零数}}\cdots\times_{\text{误差不超过该位数的半个单位}}}^{n\text{位}}$$

并称近似值 x^* 具有 n 位有效数字。

例如：$\pi=3.141592653589793\cdots$，取 $x_3=3.14$，$|\pi-x_3|=0.00159265358\cdots\leqslant0.005=\frac{1}{2}\times10^{-2}=\varepsilon(x_3)$具有 3 位有效数字。

具有 n 位有效数字的近似值 x^* 也可以用指数形式写成

$$x^*=\pm a_1a_2a_3\cdots a_n\times10^m$$

其中，a_1 是 1 到 9 中的一个数字，$a_2\cdots a_n$ 是 0 到 9 中的一个数字，m 为整数，且 x^* 的绝对误差为

$$|e_a| < |x - x^*| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

$a_1 a_2 a_3 \cdots a_n$ 是 x^* 的 n 位有效数字。

例如对十进制数：$(x_n)_{10} = \pm\left(\frac{a_1}{10} + \frac{a_2}{10^2} + \cdots + \frac{a_n}{10^n}\right) \times 10^m$，误差界为：$|x - x^*| \leqslant \varepsilon = \frac{1}{2} \times 10^m \times \frac{1}{10^n} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$。

同一个准确值的不同近似值，有效数字越多，它的绝对误差和相对误差就越小。

有了有效数字概念，3.14 和 3.1400 这两个 3.140011 的近似值的写法是有区别的：前者是 3 位有效数字，后者则表示 5 位有效数字。

1.2.4 有效数字与绝对误差限的关系

若某数 x 的近似值 x^* 有 n 位有效数字，则此近似值 x^* 的绝对误差限为

$$|x - x^*| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

注：当 m 一定时，有效数字位数 n 越多，其绝对误差限越小。

1.2.5 有效数字与相对误差限的关系

定理 1－1 设近似值 $x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$ 有 n 位有效数字，则其相对误差限为

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

定理 1－2 设近似值 $x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$ 的相对误差限不大于 $\frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$ 则它至少有 n 位有效数字。

【例 1－5】要使 $\sqrt{20}$ 的近似值的相对误差小于 1%，问至少应取几位有效数字？

解 设取 n 位有效数字，由定理 2 可得

$$\frac{\left|x^{*}-\sqrt{20}\right|}{\sqrt{20}} \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}=\frac{1}{2 \times(4+1)} \times 10^{-(n-1)}<10^{-2}$$

解得：$n>2$。故至少取 3 位有效数字就可满足要求。

1.2.6 和差积商及一元函数和多元函数误差限

1. 和的误差限

和的误差限等于误差限之和 $\varepsilon(x^{*}+y^{*})=\varepsilon(x^{*})+\varepsilon(y^{*})$

证明 设 x,y 是精确值， x^{*},y^{*} 是它的一个近似值，x^{*} 的误差限为 $\varepsilon(x^{*})$，y^{*} 的误差限为 $\varepsilon(y^{*})$，$x^{*}+y^{*}$ 的误差限为 $\varepsilon(x^{*}+y^{*})$，则

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

2. 差的误差限

差的误差限等于误差限之和 $\varepsilon(x^{*}-y^{*})=\varepsilon(x^{*})+\varepsilon(y^{*})$

3. 积的误差限

$$\varepsilon(x^{*} \cdot y^{*}) \approx \varepsilon(x^{*}) \cdot |y^{*}|+\varepsilon(y^{*}) \cdot |x^{*}|$$

4. 商的误差限

$$\varepsilon\left(\frac{x^{*}}{y^{*}}\right) \approx \frac{\varepsilon(x^{*}) \cdot |y^{*}|+\varepsilon(y^{*}) \cdot |x^{*}|}{|y^{*}|^{2}}$$

5. 一元函数误差限

设 $f(x)$ 是一元函数，x 的近似值为 x^{*} 以 $f(x^{*})$ 近似 $f(x)$，则计算函数的误差限：

$$\varepsilon(f(x^{*})) \approx |f'(x^{*})| \cdot \varepsilon(x^{*})$$

6. 多元函数误差限

设 $A=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，$x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的近似值是 $x_1^{*},x_2^{*},\cdots,x_n^{*}$ 则 A 的近似值是 $A^{*}=f(x_1^{*},x_2^{*},\cdots,x_n^{*})$，则计算函数的误差限：

$$\varepsilon(A^{*}) \approx \sum_{k=1}^{n}\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^{*}\right| \cdot \varepsilon(x_k^{*})$$

计算函数的相对误差限：

$$\varepsilon_r(A^*)=\frac{\varepsilon(A^*)}{A^*}\approx\sum_{k=1}^{n}\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*\right|\cdot\frac{\varepsilon(x_k^*)}{|A^*|}$$

【例 1－6】若 $a=1.1062$，$b=0.947$ 是经过舍入后得到的近似数，$a+b$ 有几位有效数字？

解 因为 $\varepsilon(a^*)=\frac{1}{2}\times10^{-4}$，$\varepsilon(b^*)=\frac{1}{2}\times10^{-3}$，所以

$$\varepsilon(a^*+b^*)=\varepsilon(a^*)+\varepsilon(b^*)$$

$$\varepsilon(a^*+b^*)=\frac{1}{2}\times10^{-4}+\frac{1}{2}\times10^{-3}=0.55\times10^{-3}$$

$$=0.055\times10^{-2}\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-2}$$

根据有效数字的定义，$a+b$ 有 3 位有效数字，即 $a+b=2.05$。

【例 1－7】已测得某场地长 l 的值为 $l^*=110$ m，宽 d 的值为 $d^*=80$ m，已知长的误差不超过 0.2 m，宽的误差不超过 0.1 m，求该场地的面积的误差限和相对误差限。

解 设面积为 S，则 $S=ld$ 于是$\frac{\partial S}{\partial l}=d$，$\frac{\partial S}{\partial d}=l$，则面积的误差限为

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

$$=|d^*|\cdot\varepsilon(l^*)+|l^*|\cdot\varepsilon(d^*)$$

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

面积的相对误差限为

$$\varepsilon_r(S^*)=\frac{\varepsilon(S^*)}{|S^*|}=\frac{\varepsilon(S^*)}{l^*d^*}\approx\frac{27}{8800}=0.31\%$$

1.3 数值计算中应注意的问题

以上讨论可知，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