○ 高等学校教材

数值计算方法

○ 丁丽娟　程杞元　编著

高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

数值计算方法

Shuzhi Jisuan Fangfa

丁丽娟　程杞元　编著

高等教育出版社·北京
HIGHER EDUCATION PRESS　BEIJING

内容提要

本书是根据理工科数值计算方法课程的基本要求，结合作者多年的教学实践经验和成果编写而成的。在编写过程中注重数值计算方法的实用性，并介绍了各类方法的新发展，以 MATLAB 为平台，强调计算效率。

全书内容包括数值代数、数值逼近与常微分方程数值解法的基本内容。各章均配备了丰富的例题与应用实例，给出了各种基本算法的计算机实现过程。书末还附有 MATLAB 数学软件简介，便于读者编程进行数值实验。

本书可作为工科专业研究生及理科各专业本科生的数值计算课程教材，也可供相关工程技术人员参考。

图书在版编目（CIP）数据

数值计算方法/丁丽娟，程杞元编著. —北京：高等教育出版社，2011.8

ISBN 978-7-04-032465-5

Ⅰ.①数… Ⅱ.①丁… ②程… Ⅲ.①数值计算-计算方法-高等学校-教材 Ⅳ.①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2011）第 128931 号

策划编辑	张长虹	责任编辑	张长虹	封面设计	王凌波	责任印制	胡晓旭
版式设计	余 杨	插图绘制	尹 莉	责任校对	殷 然		

出版发行	高等教育出版社	咨询电话	400-810-0598
社　　址	北京市西城区德外大街 4 号	网　　址	http://www.hep.edu.cn
邮政编码	100120		http://www.hep.com.cn
印　　刷	北京四季青印刷厂	网上订购	http://www.landraco.com
开　　本	787mm×960mm　1/16		http://www.landraco.com.cn
印　　张	23.25	版　　次	2011 年 8 月第 1 版
字　　数	430 千字	印　　次	2011 年 8 月第 1 次印刷
购书热线	010-58581118	定　　价	36.20 元

物 料 号　32465-00

前　　言

随着计算机的广泛使用与科学技术的迅速发展，科学计算已成为科学研究和工程应用领域中的一种重要研究工具，它是与理论分析、科学试验并驾齐驱的一种科学研究方法。科学计算能力也成为理工科大学生必需具备的基本素质之一。数值计算方法课程是计算科学的重要基础课程，是理工科院校各专业本科生和工科专业硕士研究生的学位课，主要内容是引导科学计算的入门、介绍数值计算的基本方法以及如何利用现代计算工具高效率解决数值计算问题。

本书是作者团队根据数值计算方法课程的基本要求，在多年的教学实践和原有教材基础上编写而成的，包含了数值代数、数值逼近和常微分方程数值解法的基本内容。力求全面、系统地介绍求解各类数学问题近似解的最基本、最常用的方法，并且着重阐明构造算法的基本思想与原理。根据“重概念、重方法、重应用、重能力”的培养原则，我们在编写中强调以下几点：

1. 注重数值计算基本方法的介绍，简明介绍数值计算中的“病态”问题和工程计算应用中常见问题的处理方法。如病态线性方程组和稀疏分块方程组的求解、二维数据插值拟合、重积分的数值计算、刚性微分方程(组)的求解等。

2. 注重方法的实用性。精编了一些例题，各章配备了应用实例，以各章的数值方法为工具，比较各类数值方法的优劣性并帮助读者如何选择数值方法求解问题，更好地体会应用数值计算方法有效地解决工程技术问题。

3. 注重提高计算效率，以 MATLAB 为平台，培养学生的编程能力。教材附录中简单介绍了 MATLAB 软件的基本功能，同时各章中介绍实现各种数值方法的函数命令和程序，使学生在了解数值计算方法的原理之后，快速实现算法并能编程求解工程计算问题。

4. 注重各类数值方法的发展。本书对每一章的数值计算方法作了简要的评述，介绍近几年发展起来的计算效率高的各种数值方法，并给出参考书目，以便读者自学。

全书讲授约需60学时，也可根据具体学时选择部分章节讲授。在本书的编写过程中，我们参考了许多国内外相关教材和专著，并将它们列在参考文献中，在此表示衷心的感谢。由于编者水平有限，书中不当之处难免，恳请读者批评指正。

编者

2011年3月

郑重声明

目　　录

第一章 数值计算中的误差

§1.1 数值计算的内容与特点

数值计算方法是研究求解数学问题(数学模型)近似解的方法、过程及其理论的一个数学分支,由于它所研究的数学问题往往来源于科学研究与工程计算问题,故数值计算方法也称为科学计算方法. 随着计算机技术的发展,使用计算机通过数值计算或数值模拟的手段解决工程实际问题和科学研究中关键问题已成为越来越不可缺少的重要环节,在某些领域内代替甚至超过了工程实验所起的作用. 数值计算与模拟已成为与理论研究、科学实验同样重要和有效的第三种手段. 目前,掌握和运用科学计算的基本方法已是各学科科学研究者和工程技术人员的必备知识.

从科学与工程计算中抽象出的数学问题常常涉及求解微分方程、线性与非线性代数方程系统、微分与积分计算、特征值计算、数据拟合与函数逼近问题以及数据处理问题,数值计算方法利用离散、迭代、插值与拟合等最基础的方法,介绍针对各个问题的基本数值算法,再编程计算,得到数学问题的近似解. 进一步分析数值算法的误差、精确度、稳定性和收敛性,建立相关的计算数学理论. 数值计算方法不同于纯数学,它不仅具有数学的抽象性和严密性,又具有广泛的应用性和实验技术性. 它是一门与计算机紧密结合的、实用性很强的、有着自身研究方法与理论体系的数学课程.

学习数值计算方法时,首先应掌握各种数值计算方法的基本原理和思想,学会运用各种方法的处理技巧,了解各种方法的优缺点,并会利用数学计算软件编程计算,求得数学问题的数值解. 目前流行的数值计算软件有 Maple, MATLAB, Mathematica 等,更多的软件可以在http://www.netlib.org, http://gmas.nist.gov, http://sourceforge.net 等网站上查询,本书中的计算实例用 MATLAB 编程实现.

§1.2 误差的基本概念

实际问题的精确解与数值计算所得的近似解之间的差别称为误差. 在科学

计算中,误差是不可避免的.由于用数学方法解决实际问题时,常按以下过程进行:

$$\boxed{\text{实际问题}} \xrightarrow{\text{抽象、简化}} \boxed{\text{数学模型}} \xrightarrow{\text{数值计算}} \boxed{\text{问题近似解}}$$

从而引起误差的因素很多,主要有以下几种:

1. 模型误差

实际问题的解与数学模型的解之差称为"模型误差"

2. 观测误差

数学问题中所出现的一些参量,其值往往由观测得到,而观测不可能绝对准确,由此产生的误差称为"观测误差".

3. 截断误差

一般数学问题常常难以求出精确解,需要简化为较易求解的问题,以简化问题的解作为原问题解的近似.如求一个收敛的无穷级数之和,总是用它的部分和作为近似值,也就是截去该级数后面的无穷多项.这样由于简化问题所引起的解的误差称为"截断误差"或"方法误差".例如

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

当 $|x|$ 很小时,可以用 $1 - \frac{x^2}{2}$ 作为 $\cos x$ 近似值.由交错级数判敛的莱布尼茨(Leibniz)准则,它的截断误差的绝对值不超过 $\frac{x^4}{24}$.

4. 舍入误差

在计算过程中往往要对数字进行舍入.如受机器字长的限制,无穷小数和位数很多的数必须舍入成一定的位数.这样产生的误差称为"舍入误差".

本课程中只讨论截断误差与舍入误差对计算结果的影响.

1.2.1 绝对误差与相对误差

设 x^* 为准确值 x 的一个近似值,称

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

为近似值 x^* 的绝对误差,简称误差.一般情况下准确值 x 难以求出,从而也不能算出绝对误差 $e(x^*)$ 的准确值,但可以根据测量工具或计算的情况估计出它的取值范围,即估计出误差绝对值的一个上界 ε

$$|e(x^*)| = |x - x^*| \leqslant \varepsilon \tag{1-2}$$

通常称 ε 为近似值 x^* 的绝对误差限,简称误差限.显然,误差限不是唯一的.

有了误差限及近似值,就可以得到准确值的范围

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

即准确值 x 必定在区间 $[x^*-\varepsilon,x^*+\varepsilon]$ 内，也常记作

$$x=x^*\pm\varepsilon$$

容易看出，经过四舍五入得到的数，其误差必定不超过被保留的最后数位上的半个单位，即最后数位上的半个单位为其误差限. 例如，若取 π 的近似值为 3.14，则

$$|\pi-3.14|\leqslant 0.0016\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-2}$$

若取 $\pi\approx 3.142$，则

$$|\pi-3.142|\leqslant 0.00041\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-3}$$

误差限的大小不能完全反映近似值的精确程度. 要刻画近似值的精确程度，不仅要看绝对误差的大小，还必须考虑精确值本身的大小，由此引出了相对误差的概念.

仍设 x^* 为准确值 x 的近似值，称绝对误差与准确值之比为近似值 x^* 的相对误差，记为 $e_r(x^*)$，即

$$e_r(x^*)=\frac{e(x^*)}{x}=\frac{x-x^*}{x}\tag{1-3}$$

由于在计算过程中准确值 x 总是未知的，故一般取相对误差为

$$e_r(x^*)=\frac{e(x^*)}{x^*}$$

可以证明，当 $|e_r(x^*)|$ 很小时，$\dfrac{e(x^*)}{x}-\dfrac{e(x^*)}{x^*}$ 是 $e_r(x^*)$ 的高阶无穷小，可以忽略不计. 所以，取绝对误差与近似值之比为相对误差是合理的.

同样，相对误差也只能估计其上限. 如果存在正数 ε_r，使得

$$|e_r(x^*)|=\left|\frac{e(x^*)}{x^*}\right|\leqslant\varepsilon_r\tag{1-4}$$

则称 ε_r 为 x^* 的相对误差限. 显然，误差限与近似值绝对值之比 $\dfrac{\varepsilon}{|x^*|}$ 为 x^* 的一个相对误差限.

例如，由实验测得光速近似值为 $c^*=2.997925\times 10^5$ km/s，其误差限为 0.1 km/s，于是

$$\frac{\varepsilon}{|c^*|}=\frac{0.1}{2.997925\times 10^5}<4\times 10^{-7}$$

所以 4×10^{-7} 是 c^* 的一个相对误差限.

1.2.2 有效数字

有效数字是近似值的一种表示法. 它既能表示近似值的大小，又能表示其精

确程度.

在计算过程中,常常按四舍五入的原则取数 x 的前几位数 x^* 为其近似值.例如,$x=\sqrt{2}=1.414\ 213\ 562\cdots$,取前四位数得近似值 $x^*=1.414$,取前八位数得近似值 $x^*=1.414\ 213\ 6$,它们的绝对误差

$$|\sqrt{2}-1.414|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}$$

$$|\sqrt{2}-1.414\ 213\ 6|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-7}$$

如果近似值 x^* 的误差限是$\frac{1}{2}\times10^{-n}$,则称 x^* 准确到小数点后第 n 位,并从第一个非零数字到这一位的所有数字均称为有效数字.例如,$\sqrt{2}$的近似值 1.414 准确到小数点后第 3 位,它具有 4 位有效数字.1.414 213 6 作为$\sqrt{2}$的近似值准确到小数点后第 7 位,有 8 位有效数字.一般地,如果近似值 x^* 的规格化形式为

$$x^*=\pm0.a_1a_2\cdots a_n\cdots\times10^m \tag{1-5}$$

其中 m 为整数,$a_1\neq0$,$a_i(i=1,2,\cdots)$为 0 到 9 之间的整数,且

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n} \tag{1-6}$$

则称近似值 x^* 有 n 位有效数字.

例如,$x=0.003\ 400\pm\frac{1}{2}\times10^{-5}$表示近似值 0.003 400 准确到小数点后第 5 位,有 3 位有效数字.

上面的讨论表明,可以用有效数字位数来刻画误差限.形如式(1-5)的数,当 m 一定时,其有效数字位数 n 越大,则误差限越小.例如,若 $x^*=1\ 452.046$ 是具有 7 位有效数字的近似值,则它的误差限为

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}$$

又若 $x^*=1\ 452.0$ 是具有 5 位有效数字的近似值,则其误差限为$\frac{1}{2}\times10^{-1}$.

下面的定理给出了相对误差限与有效数字的关系.

定理 1.1 若 x 的近似值 $x^*=\pm0.a_1a_2\cdots a_n\times10^m(a_1\neq0)$有 n 位有效数字,则$\frac{1}{2a_1}\times10^{-n+1}$为其相对误差限.反之,若 x^* 的相对误差限 ε_r 满足

$$\varepsilon_r\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{-n+1}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

[证明] 由式(1-6)

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

从而有

$$|e_r(x^*)| = \left|\frac{e(x^*)}{x^*}\right| \leqslant \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m} \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$$

所以$\frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$是$x^*$的相对误差限.

若$\varepsilon_r \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1}$,由式(1-4)

$$\begin{aligned}|e(x^*)| &= |x^* e_r(x^*)| \leqslant 0.a_1\cdots a_n\cdots \times 10^m \varepsilon_r \\ &\leqslant (a_1+1) \times 10^{m-1} \times \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}\end{aligned}$$

由式(1-6),x^*至少有n位有效数字.

定理1.1表明,由有效数字位数可以求出相对误差限.如$x^* = 2.72$是$x = \mathrm{e}$的具有3位有效数字的近似值,故其相对误差限为

$$\varepsilon_r = \frac{1}{2 \times 2} \times 10^{-3+1} = 0.25 \times 10^{-2}$$

§1.3 数值计算中误差的传播

1.3.1 基本运算中的误差估计

本节中所讨论的基本运算是指四则运算与一些常用函数的计算.

由微分学,当自变量的改变量(误差)很小时,函数的微分作为函数的改变量的主要线性部分可以近似函数的改变量,故利用微分运算公式可导出误差运算公式.

设数值计算中求得的解与参量(原始数据)$x_1, x_2, \cdots, x_n$有关,记为

$$y = f(x_1, x_2, \cdots, x_n) \tag{1-7}$$

参量的误差必定引起解的误差.设$x_1, x_2, \cdots, x_n$的近似值分别为$x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*$,相应的解为

$$y^* = f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*) \tag{1-8}$$

假定f在点$(x_1^*, \cdots, x_n^*)$处可微,则当数据误差较小时,解的绝对误差为

$$\begin{aligned}e(y^*) &= y - y^* = f(x_1, \cdots, x_n) - f(x_1^*, \cdots, x_n^*) \\ &\approx \mathrm{d}f(x_1^*, \cdots, x_n^*)\end{aligned}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i}(x_i - x_i^*)$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i} e(x_i^*) \tag{1-9}$$

其相对误差为

$$e_r(y^*) = \frac{e(y^*)}{y^*} \approx \mathrm{d}(\ln f)$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i} \frac{e(x_i^*)}{f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i} \frac{x_i^*}{f(x_1^*, \cdots, x_n^*)} e_r(x_i^*) \tag{1-10}$$

特别地,由式(1-9)和式(1-10)可得和、差、积、商之误差公式

$$\begin{cases} e(x_1 \pm x_2) = e(x_1) \pm e(x_2) \\ e_r(x_1 \pm x_2) = \dfrac{x_1}{x_1 \pm x_2} e_r(x_1) \pm \dfrac{x_2}{x_1 \pm x_2} e_r(x_2) \end{cases} \tag{1-11}$$

$$\begin{cases} e(x_1 x_2) \approx x_2 e(x_1) + x_1 e(x_2) \\ e_r(x_1 x_2) \approx e_r(x_1) + e_r(x_2) \end{cases} \tag{1-12}$$

$$\begin{cases} e\left(\dfrac{x_1}{x_2}\right) \approx \dfrac{1}{x_2} e(x_1) - \dfrac{x_1}{x_2^2} e(x_2) \\ e_r\left(\dfrac{x_1}{x_2}\right) \approx e_r(x_1) - e_r(x_2) \end{cases} \tag{1-13}$$

式(1-11)~式(1-13)表明,和、差之误差为误差之和、差,积、商之相对误差为相对误差之和、差. 由以上各式还可得出

$$|e(x_1 \pm x_2)| = |e(x_1) \pm e(x_2)| \leqslant |e(x_1)| + |e(x_2)| \tag{1-14}$$

$$|e_r(x_1 x_2)| \approx |e_r(x_1) + e_r(x_2)| \leqslant |e_r(x_1)| + |e_r(x_2)| \tag{1-15}$$

$$\left| e_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \right| \approx |e_r(x_1) - e_r(x_2)| \leqslant |e_r(x_1)| + |e_r(x_2)| \tag{1-16}$$

因此,和、差的误差限不超过各数的误差限之和,积、商的相对误差限不超过各数的相对误差限之和.

例 1 设 $y = x^n$,求 y 的相对误差与 x 的相对误差之间的关系.

[解] 由式(1-10)得

$$e_r(y) = \mathrm{d}(\ln x^n) = n\mathrm{d}(\ln x) = n e_r(x)$$

所以 x^n 的相对误差是 x 的相对误差的 n 倍. 特别地,$\sqrt{x}$的相对误差是 x 的相对误差的一半.

例 2 假定运算中数据都准确到两位小数,试求 $x^* = 1.21 \times 3.65 - 9.81$ 的绝对误差限和相对误差限,计算结果有几位有效数字?

[解] 由式(1-11)和式(1-12)得

$$e(x^*) = 3.65 \times e(1.21) + 1.21 \times e(3.65) - e(9.81)$$

因为式中数据都准确到两位小数,即其误差限均为$\frac{1}{2} \times 10^{-2}$,故有

$$|e(x^*)| \leqslant 3.65 \times |e(1.21)| + 1.21 \times |e(3.65)| + |e(9.81)|$$

$$\leqslant (3.65 + 1.21 + 1) \times \frac{1}{2} \times 10^{-2} = 0.029\,3$$

$$|e_r(x^*)| = \frac{|e(x^*)|}{|x^*|} \leqslant \frac{0.029\,3}{5.393\,5} \approx 0.005\,4$$

所以,x^* 的绝对误差限为 0.029 3,相对误差限为 0.005 4,计算结果有两位有效数字.

1.3.2 算法的数值稳定性

计算一个数学问题,需要预先设计好由已知数据计算问题结果的运算顺序,这就是算法.例如,计算积分值

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x \quad (n = 0,1,2,\cdots)$$

由关系式

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

且

$$\frac{1}{6(n+1)} < I_n < \frac{1}{5(n+1)}$$

可设计如下两种算法:

算法 I 取 $I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5}\mathrm{d}x = \ln 1.2$, 按公式

$$I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1} \quad (n = 1,2,\cdots) \tag{1-17}$$

依次计算 $I_1, I_2, \cdots$ 的近似值.

算法 II 取 $I_n^* \approx \frac{1}{2}\left[\frac{1}{6(n+1)} + \frac{1}{5(n+1)}\right]$,按公式

$$I_{k-1} = \frac{1}{5}\left(\frac{1}{k} - I_k\right) \quad (k = n, n-1, \cdots, 1) \tag{1-18}$$

依次计算 $I_{n-1}, I_{n-2}, \cdots, I_0$ 的近似值.

分别取

$$I_0^* = 0.182\,321\,55$$

$$I_{14}^* = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{6\times 15}+\frac{1}{5\times 15}\right)\approx 0.012\,222\,22$$

算法Ⅰ,Ⅱ的计算结果见表1-1.

表1-1

n	I_n(按算法Ⅰ计算)	I_n(按算法Ⅱ计算)
0	0.182 321 55	0.182 321 55
1	0.088 392 25	0.088 392 22
2	0.058 038 75	0.058 038 92
3	0.043 139 58	0.043 138 73
4	0.034 302 08	0.034 306 33
5	0.028 489 58	0.028 468 35
6	0.024 218 75 ↓	0.024 324 91 ↑
7	0.021 763 39	0.021 232 60
8	0.016 183 05	0.018 836 99
9	0.030 195 88	0.016 926 17
10	-0.050 979 41	0.015 369 14
11	0.345 806 12	0.014 063 39
12	-0.645 697 26	0.013 016 36
13	8.305 409 38	0.011 841 27
14	-41.455 618 31	0.012 222 22

由表1-1中结果可见,按算法Ⅰ得到$I_{10}^*<0$,这显然是错的,因为对任意$n\geqslant 0$,均有

$$I_n > \frac{1}{6(n+1)} > 0$$

而按算法Ⅱ计算,尽管I_{14}^*取值精度不高,其误差限

$$\varepsilon = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{75}-\frac{1}{90}\right)\approx 0.001\,1$$

但递推计算得到的I_0^*却有8位有效数字.为什么会出现这样的现象?下面的分析说明,这是舍入误差在计算过程中传播所引起的后果.

设I_0^*有误差e_0.假设计算过程中不产生新的舍入误差,则由式(1-17)得