高等学校教材

SHU ZHI JI SUAN FANG FA

数值计算方法

合肥工业大学数学与信息科学系 编

合肥工业大学出版社

高等学校教材

数值计算方法

合肥工业大学数学与信息科学系　编

合肥工业大学出版社

内容提要

本书是为理工科大学很多专业普遍开设的“数值分析”或“计算方法”课程编写的教材。主要内容有：数值逼近(包括插值与样条，平方逼近与一致逼近等)，数值微积分，线性方程组与非线性方程(组)的数值解法，矩阵特征值问题的数值解法及常微分方程的数值解法等。每章都有相当数量的例题和习题，并附有习题答案；书末还配有计算实习题，供学生上机实习选用。全书结构严谨、脉络分明、深入浅出，介绍方法与阐明原理并重，传授知识与培养能力兼顾，便于教学和自学。

本书也是理工科大学各专业研究生学位课程的教材，还可作为从事科学计算的科技工作者的参考资料。

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/合肥工业大学数学与信息科学系编. —合肥：合肥工业大学出版社，2004.3

ISBN 7-81093-074-5

Ⅰ.数… Ⅱ.合… Ⅲ.数值计算—计算方法—高等学校—教材 Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 020012 号

出　版：	合肥工业大学出版社
地　址：	合肥市屯溪路 193 号
电　话：	总编室：0551-2903038　发行部：0551-2903198
版　次：	2004 年 3 月第 1 版　2004 年 3 月第 1 次印刷
开　本：	850×1168　1/32
印　张：	10.375　字　数：240 千字
发　行：	全国新华书店
印　刷：	合肥创新彩印厂
邮　编：	230009
网　址：	www.hfutpress.com.cn　E-mail：press@hfutpress.com.cn

ISBN 7-81093-074-5/O·9　定价：14.00 元

前　言

在现代科学研究与工程设计中，电子计算机的应用日益普及，科学计算的重要性已被愈来愈多的人所认识。作为理工科大学的学生，应当具备一定的科学计算的知识和能力。因此，目前各理工科院校都将“数值计算方法”（有的叫“计算方法”或“数值分析”）列为很多专业本科生的必修课程和硕士研究生的学位课程，同时它还被列为信息与计算科学专业的主干课程。

几年前，合肥工业大学著名教授朱功勤先生在为信息与计算科学专业的学生讲授“科学计算方法”时，编写了《数值计算方法》的讲义。该讲义一直在信息与计算科学专业本科生及全校工科研究生中试用，获得了较好的效果。现根据学生的反馈意见及授课老师的建议，结合教学实践，由朱功勤教授和朱晓临博士在原讲义稿的基础上，进行加工、整理和充实，形成了本书。

编者在编写本书时，尽量做到便于教学和自学。在选材方面，突出基本理论和方法以及它们的应用背景，注重对计算数学最新理论和方法的介绍，强化解决问题能力的培养；在文字叙述方面，力求做到深入浅出，通俗易懂。书中每章都配备了较多的例题和习题，尤其对那些读者比较难以理解和掌握的理论和方法，通过例题从多角度给予详尽的解答，同时注意各种方法的比较，书末还附有习题答案。每章后的小结部分均对所学内容做了高度的概括和总结，使读者更容易掌握其中的脉络和精髓，起到了画龙点睛的作用。“数值计算方法”是一门实践性很强的课程，为加强上机计算实习，书后还配有较多的计算实习题，可供读者选用。

全书共有九章，主要内容有：数值逼近（包括插值与样条，平方逼近与一致逼近等），数值微积分，线性方程组与非线性方程（组）的数值解法，矩阵特征值问题的数值解法及常微分方程的数值解

法等。全书讲授课时要求为80学时，如果少于要求学时，可以少讲每章的部分内容，也可以不讲矩阵特征值问题的数值解法及解微分方程的有限元法。

限于水平，书中不当乃至错误之处，尚祈读者指正，编者将不胜感激。

编 者

2004年2月

目　录

第一章 绪 论

在现代科学研究与工程设计中，计算机已成为人们普遍使用的有力工具．对于由实际问题产生的大量课题，需要采用数学方法，借助计算机来获得所需要的数据结果．用计算机解决实际问题的一般过程是：**首先根据实际问题建立数学模型，再根据数学模型提出数值计算方法，然后对构造出的算法编制程序，最后上机计算求出结果并分析所得结果**．由实际问题建立数学模型因为要涉及多门学科的知识，因此本书对其不做讨论．但由数学模型提出数值计算方法，直到编程上机计算求出结果，这一过程是计算数学的任务，也是本课程研究的对象．

计算数学是数学的一个重要分支，它主要研究用计算机求解各种数学问题的数值方法及其理论，以及软件实现．数值计算方法（也称数值分析或计算方法）是计算数学的一个主要部分，它不同于纯数学那样研究数学本身的理论，而是一门把数学理论与计算机紧密结合起来进行研究的实用性很强的基础学科，它主要研究用计算机解决数学模型的理论与方法．本书涉及的主要内容包括：数值逼近，数值微分与数值积分，线性方程组与非线性方程（组）以及矩阵特征值的数值解法，常微分方程（组）的数值解法等．

第一节 可行、有效的计算方法

我们知道计算机只能对有限位数进行加、减、乘、除与逻辑运算，因此对给定的数学模型提出的数值计算方法也只能包含上述五种运算．对于具体算法还要考虑计算机的内存大小、数字字长、运算速度等．有的算法从纯数学的观点看不够严格和完善，但通

过实际计算、对比分析等手段证明是行之有效的也常被采用．特别是随着计算机的飞速发展，一些算法在老的计算机上无法实现，而在新型计算机上却可以实现．总之，对于给定的数学模型，在构造算法时要面向计算机．因此，**一个可行、有效的算法应该是符合计算机要求的数值方法**．

由于计算机只能近似地表示实数，不论计算机中的数是定点表示，还是浮点表示，它所表示的数的位数都是有限的，且任一算法只能在有限的时间内通过有限次运算来完成．这说明用计算机运算得到的结果都是近似的，因此需要考虑算法的精确度问题．在理论上我们还要研究用计算机运算得到的结果是否收敛到实际问题的解．此外，我们还要考虑算法的数值稳定性问题．因此，**一个可行、有效的算法应该是在理论上收敛、稳定，在实际计算中精确度高的数值方法**．

从实际需要出发，我们还需要考虑计算量的大小，即所谓计算复杂性问题．它是由以下两个因素决定的：使用中央处理器(CPU)的时间，这主要由四则运算的次数决定；占用内存储器的空间，这主要由使用的数据量来决定．有时也称之为时间与空间的复杂性，简称计算复杂性．例如，解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，若 $\det\boldsymbol{A}\neq 0$，则可用 Cramer 法则来解．设 $\boldsymbol{A}$ 为 20 阶矩阵，计算一个 20 阶行列式需要的乘法运算量为 $19\times 20!$，需计算 21 个 20 阶的行列式，总的乘法运算量为

$$21\times 19\times 20!\approx 9.71\times 10^{20}.$$

若用 10 亿次/秒的计算机来运算，则一年可完成的乘法运算量为

$$10^{9}\times 365\times 24\times 3600\approx 3.15\times 10^{16}.$$

也就是说解 20 阶的方程组所需乘法运算的时间约为三万零八百年，显然这个运算时间在实际中是不可接受的．而在实际问题中，例如大型水利工程、天气预报等，需要解的大型方程组的阶数一般都远远大于 20，若用上述方法显然无法解决．这个例子说明解线性方程组的 Cramer 法则在理论上虽然可行，但在实际应用中却

不可行．有人可能说，随着计算机的发展、运算速度提高、内存增大以及新结构计算机的涌现，以前认为过于复杂而不能求解的问题将会得到解决．但是，不论计算机如何发展，使用计算机的代价，即计算复杂性，都是要考虑的．也就是说，**一个可行、有效的算法应该是计算复杂性尽可能小的数值方法**．

对于给定的数学模型，可能有多种算法，应通过计算机进行数值试验，进行分析、比较来选定算法．对新提出的算法，有的在理论上虽然还未证明其收敛性，但可以从具体试验中发现其规律，为理论证明提供线索．

总之，对于给定的数学模型所提出的可行、有效的算法应该是符合计算机的要求，在理论上收敛、稳定，在实际计算中精确度高、计算复杂性小、能通过试验验证的数值方法．

第二节　误差分析

对于实际问题，应用计算机求解，显然是近似解，因此有必要了解有关误差分析知识．

一、误差的来源

在上一节我们指出，用计算机解决实际问题得到的是实际问题精确解的近似值，在数学上将精确值与近似值之差称为误差．对于一个实际问题用计算机求解的误差来源是多方面的，但主要是以下四个方面．

1．模型误差

一般来说，生产和科学研究中遇到的实际问题是比较复杂的，要用数学模型来描述，需要进行必要的简化，忽略一些次要的因素，这样数学模型与实际问题之间必然存在误差，这就是所谓的**模型误差**．

2. 数据误差

数学模型中通常包含一些由观测(实验)得到的数据,例如用 $s(t)=\frac{1}{2}gt^2$ 来描述初始速度为 0 时自由落体下落时距离和时间关系中,重力加速度 $g\approx 9.8$ 米/秒^2 是由实验得到的,它和实际重力加速度大小是有出入的. 这种由实验或计算得到的数据与实际数据之差,称为**数据误差**.

3. 截断误差

在解决实际问题时,数学模型往往比较复杂,不易求出它的解析解,这就需要建立一套行之有效的数值方法,这种数学模型的精确解与数值方法得到的近似解之间的误差称为**方法误差**或**截断误差**. 例如,计算积分 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$,而 $f(x)$ 的原函数不能用初等函数表示,为了计算积分,最简单的方法就是将 $f(x)$ 进行 Taylor 展开

$$f(x)=f(0)+f'(0)x+\cdots+\frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n+\cdots,$$

用它的有限项的和

$$p_n(x)=f(0)+f'(0)x+\cdots+\frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n$$

近似替代 $f(x)$,便可求出积分的近似值,这时的截断误差是

$$R_n(x)=\frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi)x^{n+1},\xi \text{ 位于 } 0 \text{ 与 } x \text{ 之间}.$$

4. 舍入误差

由于计算机只能对有限位数进行有限次运算,所以参加运算的数只能是有限位的,如果计算公式中含有 π、$\sqrt{2}$、$\sqrt{3}$ 等,在实际计算时只能取有限位数,而对有限位后的数进行四舍五入处理,这种由四舍五入产生的误差称为**舍入误差**.

上面几种误差都会影响计算结果的准确性. 由于在本课程中我们总是假定数学模型是合理的,所以对模型误差、数据误差不作详细讨论,主要讨论截断误差和舍入误差对计算准确性的影响.

二、误差的基本概念

1. 绝对误差和绝对误差限、相对误差和相对误差限

定义 1 设 x^* 为准确值，x 是 x^* 的近似值，称

$$e = x^* - x \tag{2.1}$$

为近似值 x 的**绝对误差**，简称**误差**.

显然误差 e 既可为正，也可为负. 一般来说，准确值 x^* 是不知道的，因此误差 e 的准确值无法求出. 不过在实际工作中，可根据相关领域的知识、经验及测量工具的精度，事先估计出误差绝对值不超过某个正数 ε，即

$$|e| = |x^* - x| \leqslant \varepsilon, \tag{2.2}$$

则称 ε 为近似值 x 的**绝对误差限**，简称**误差限**，或简称**精度**.

由(2.2)得

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

这表示准确值 x^* 在区间 $[x-\varepsilon, x+\varepsilon]$ 内，有时将准确值 x^* 写成

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

例如用卡尺测量一个圆杆的直径为 $x = 350$ 毫米，它是圆杆直径的近似值，由卡尺的精度知道这个近似值的误差不会超过半个毫米，则有

$$|x^* - x| = |x^* - 350| \leqslant 0.5(\text{毫米}).$$

于是该圆杆的直径为

$$x^* = 350 \pm 0.5(\text{毫米}).$$

用 $x^* = x \pm \varepsilon$ 表示准确值可以反映它的准确程度，但不能说明近似值的好坏. 例如，测量一根 10 厘米长的圆钢时发生了 0.5 厘米的误差，和测量一根 10 米长的圆钢时发生了 0.5 厘米的误差，其绝对误差都是 0.5 厘米，但是，后者的测量结果显然比前者要准确得多. 这说明决定一个量的近似值的好坏，除了要考虑绝对误差的大小，还要考虑准确值本身的大小，这就需要引入相对误差的概念.

定义 2 设 x^* 为准确值，x 是 x^* 的近似值，称

$$e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*} \tag{2.3}$$

为近似值 x 的**相对误差**.

在实际计算中，由于准确值 x^* 总是未知的，因此也把

$$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x^* - x}{x} \tag{2.4}$$

称为近似值 x 的**相对误差**.

在上面的例子中，前者的相对误差是 $0.5/10 = 0.05$，而后者的相对误差是 $0.5/1000 = 0.0005$. 一般来说，相对误差越小，表明近似程度越好. 与绝对误差一样，近似值 x 的相对误差的准确值也无法求出. 仿绝对误差限，称相对误差绝对值的上界 ε_r 为近似值 x 的**相对误差限**，即

$$|e_r| = \left|\frac{x^* - x}{x}\right| \leqslant \varepsilon_r \tag{2.5}$$

注 绝对误差和绝对误差限有量纲，而相对误差和相对误差限没有量纲，通常用百分数来表示.

2. 有效数字、有效数字与相对误差限的联系

用 $x \pm \varepsilon$ 表示一个近似值，这在实际计算中很不方便. 当在实际运算中遇到的数的位数很多时，如 π, e 等，常常采用四舍五入的原则得到近似值，为此引进有效数字的概念.

定义 3 设 x 是 x^* 的近似值，如果 x 的误差限是它的某一位的半个单位，那么称 x 准确到这一位，并且把从这一位起直到左边第一个非零数字为止的所有数字称为 x 的**有效数字**. 具体来说，就是先将 x 写成规范化形式

$$x = \pm 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n \times 10^m, \tag{2.6}$$

其中 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$ 是 0 到 9 之间的自然数，$\alpha_1 \neq 0$，m 为整数. 如果 x 的误差限

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-l}, \quad 1 \leqslant l \leqslant n \tag{2.7}$$