◎ 董　胜　陶山山　编著

数值计算方法

——原理、编程及应用

中国海洋大学出版社

数值计算方法

——原理、编程及应用

董　胜　陶山山　编著

中国海洋大学出版社
·青岛·

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法：原理、编程及应用 / 董胜，陶山山编著
. —青岛：中国海洋大学出版社，2018. 5
ISBN 978-7-5670-1723-8

Ⅰ. ①数… Ⅱ. ①董…②陶… Ⅲ. ①数值计算—计算方法
Ⅳ. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 043903 号

出版发行	中国海洋大学出版社		
社　　址	青岛市香港东路 23 号	**邮政编码**	266071
出 版 人	杨立敏		
网　　址	http://www.ouc-press.com		
电子信箱	coupljz@126.com		
订购电话	0532—82032573(传真)		
责任编辑	李建筑	**电　　话**	0532—85902505
印　　制	日照报业印刷有限公司		
版　　次	2018 年 6 月第 1 版		
印　　次	2018 年 6 月第 1 次印刷		
成品尺寸	170 mm×240 mm		
印　　张	20.5		
字　　数	357 千		
印　　数	1～1000		
定　　价	39.80 元		

前　言

随着计算机的日益发展,科学计算已经成为科学实践的重要手段之一。它在自然科学和社会科学中得到了广泛应用,成为不可或缺的重要工具。与此同时,适用于计算机的数值计算方法逐渐成为理工科大学硕士研究生与本科生的必修课程。目前,国内各大高校相关专业编写数值计算方法的专著及教学用书很多,有的偏重于理论,有的偏重于工程。中国海洋大学工程学院自 1995 年申报设立港口、海岸及近海工程硕士点以来,始终将"数值计算方法"定为必修课程。作者一直从事海洋工程环境条件及其与工程结构相互作用的教学和科研工作。本书在介绍数值分析理论的基础上,注重与计算机应用的结合,通过海洋工程实例,培养读者的工程理念,提高解决实际问题的能力,为我国海洋工程与资源开发培养高素质的工程技术人才。

本书介绍了数学问题数值求解方面基本与常用的方法。全书共分 13 章,主要包括有效数字与误差的相关概念、求解线性方程组的直接方法与迭代方法、插值、函数逼近、数值积分和微分、特征值与特征向量、非线性方程求根、常微分方程初值与边值问题的解法、偏微分方程的数值解法等内容。结合数值计算,对船体结构中杆系计算的位移法、极值波高的分布拟合、短期特征波高计算、年极值水位的灰色马尔科夫预测、串联多自由度系统结构动力特性求解、斯托克斯 5 阶波计算、波浪浅水变形计算、平直岸线泥沙淤积等海洋工程典型问题的求解方法进行了简介。本书除了一定的理论分析,更注重编程思路的介绍,对各种数值算法给出了编程框图和 Matlab 计算程序。各章节均附有例题与习题,以帮助读者巩固和加深对内容的理解与掌握。

本书第 1～3 和 8～13 章和习题由董胜执笔,第 4～7 章由陶山山执笔。全书由董胜统稿、定稿。

在本书的出版过程中,作者得到中国海洋大学工程学院同事们的鼓励与支持;博士研究生殷齐麟、翟金金、林逸凡、焦春硕、黄炜楠、姜逢源、段成林,硕士研究生赵玉良、廖振焜、崔俊男、韩新宇、王浩霖、罗鑫、王浩天、巩艺杰、王迪、陈硕、蒋昕峄完成了部分初稿的文字录入和部分例题的编程绘图工作,在此表示

衷心的感谢。在成书过程中，作者参阅了其他学者的论著，已列入书后的“参考文献”，在此对这些作者一并表示感谢。同时，也要感谢国家自然科学基金项目(51479183)、山东省自然科学基金项目(ZR2014EEQ030)、山东省省级联合培养基地建设项目(SDYJ16002)、山东省本科高校教学改革研究项目(2015Z022)和山东省研究生教育创新计划项目(SDYY12151)对本书出版的资助。

本书可作为海洋、海岸、港航、水利、环境、土木等专业硕士研究生及高年级本科生的教材，亦可作为相关专业科研人员及工程技术人员的参考书。

随着计算技术的迅速发展，新的数值计算方法不断产生，由于作者从事该领域研究的时间短，水平有限，书中难免存在不足甚至错误之处，敬请读者批评指正。

作者

2017 年 11 月

目录

第1章　绪　论

本章介绍数值计算方法的研究对象、内容和特点，讨论误差、有效数字的相关概念，并指出数值计算中应当注意的若干问题。

1.1　数值计算方法的研究对象和特点

随着海洋资源的开发与海洋工程技术的迅速发展，需要大量的复杂计算作为结构设计的前提条件。因此，适合计算机使用的数值计算方法是我们科研工作的重要保证。

用计算机解决工程问题的一般过程，可以概括为图 1.1.1。

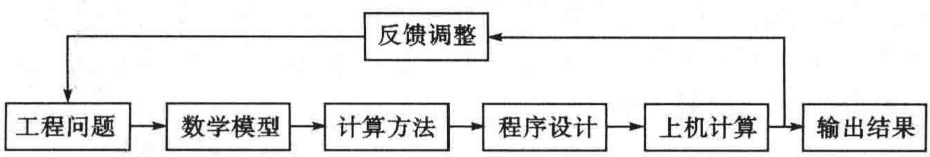

图 1.1.1　利用计算机解决工程问题的流程

为了解决工程问题，通常应用有关科学知识和数学理论建立数学模型，选择合适的计算方法，编制程序，上机算出结果。所谓数值计算方法就是研究用计算机解决数学问题的数值方法及其理论。其内容包括误差理论、线性与非线性方程(组)的数值解、矩阵的特征值与特征向量计算、插值方法、线性拟合与函数逼近、数值积分与数值微分、常微分方程与偏微分方程数值解等。

数值计算方法是一门与计算机使用密切结合的数学课程。它既有纯数学高度抽象性与严密科学性的特点，又有应用广泛性与高度技术性的特点。以求解线性方程组为例，用 Cramer(克拉默)法则求解一个 n 阶线性方程组，要算 $n+1$ 个 n 阶行列式，总共需要 $(n-1)(n+1)n!$ 次乘法。若 n 等于 20，则求解方程组时大约要做 10^{20} 次乘法。如此大的工作量，即使是运算速度为每秒百亿次

的电子计算机，也要连续工作数千年才能完成，显然这是没有实际意义的。而采用消元法，求解一个 n 阶线性方程组大约需要$(n^3/3+n^2)$次乘法。对于一个20阶的方程组，即使是用一台小型计算器也能很快解出来。由此例可知：合适算法的选取是科学计算成败的关键。此外，为了提高效率，应根据方程的特点，研究满足计算机运算精度要求的、节省机时的有效算法及其相关理论。在算法的实现过程中，还要根据计算机的容量、字长、速度等指标，研究具体的求解步骤和程序设计技巧。有的方法在理论上虽不够严密，但通过实际运算和结果的对比分析，证明是行之有效的方法，也应该采用。数值计算方法的特点可归纳如下：

(1)数值算法要面向计算机。算法只能包括加、减、乘、除运算和逻辑运算，这些是计算机能直接处理的。

(2)数值算法要有可靠的理论分析。在此基础上，能达到精度要求，保证算法的收敛性，还要对误差进行分析。

(3)数值算法要有好的计算复杂性。时间复杂性好是指节省时间，空间复杂性好是指节省存储量，这关系到算法能否在计算机上实现。

(4)数值算法要有数值试验。任何一个算法除了从理论上要满足上述三点外，还应通过数值试验证明其有效性。

根据上述特点，在实际应用时，要注意方法处理的技巧及其与计算机的结合，要重视误差分析、收敛性及稳定性的基本理论，通过算例，掌握各种解决实际工程问题的数值计算方法。

1.2 误差的基本概念

数值计算往往是近似计算，即实际计算结果与理论结果之间存在着差值，此值称为误差。数值分析的目的之一是将误差控制在容许范围内或者对误差有所估计。

1.2.1 误差的来源

误差有多种类型。用计算机解决科学计算问题首先要建立数学模型，它是对被描述的实际问题进行抽象、简化而得到的，因而是近似的，我们把数学模型与实际问题之间的误差称为模型误差。由于这种误差难于用数量表示，通常都假定数学模型是合理的，这种误差可忽略不计。

在数学模型中往往还有一些根据观测得到的物理量，如波高、周期、结构尺寸等，这些参量受测量工具及手段的影响，测量的结果不可能绝对正确，这种误差称为观测误差。

在数学模型不能得到精确解时，通常要用数值方法求它的近似解，其近似解与精确解之间的误差称为截断误差。例如，函数 $f(x)$ 用 Taylor（泰勒）多项式

$$P_n(x)=f(0)+f'(0)x+\frac{1}{2!}f''(0)x^2+\cdots+\frac{1}{n!}f^{(n)}(0)x^n \tag{1.2.1}$$

近似代替时，有误差

$$R_n(x)=f(x)-P_n(x)=\frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi)x^{n+1} \tag{1.2.2}$$

式中，ξ 在 0 与 x 之间。这种误差就是截断误差。

有了求解数学问题的计算公式以后，用计算机进行数值计算时，由于计算机的字长有限，由此产生的误差和计算过程可能产生的新的误差称为舍入误差。例如，用 3.141 6 近似代替 π 产生的误差。

观测误差和原始数据的舍入误差，就其来源说有所不同，就其对计算结果的影响看，完全一样，数学描述和实际问题之间的模型误差，往往是计算工作者不能独立解决的，甚至是尚待研究的课题。基于这些原因，在数值计算方法课程中所涉及的误差，一般指舍入误差和截断误差。讨论它们在计算过程中的传播和对计算结果的影响；研究控制它们的影响以保证最终结果有足够的精度；既希望解决数值问题的算法简便而有效，又想使最终结果准确而可靠。

1.2.2 绝对误差和相对误差

设变量的精确值用 x 表示，其近似值为 x^*，记

$$e(x^*)=x^*-x \tag{1.2.3}$$

称 $e(x^*)$ 为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。当 $e(x^*)>0$ 时，近似值 x^* 偏大，叫作强近似值；当 $e(x^*)<0$ 时，近似值 x^* 偏小，叫作弱近似值。

准确值 x 一般是未知的，因而绝对误差 $e(x^*)$ 也是未知的，但通常可以估计出绝对误差的一个上界，即可以找出一个正数 η，使

$$|e(x^*)|\leqslant\eta \tag{1.2.4}$$

实践中用 $|e(x^*)|$ 尽可能小的上界 $\varepsilon(x^*)$ 估计 x^* 的误差，称 $\varepsilon(x^*)$ 为 x^* 的绝对误差限（或误差限）。

例 1.2.1 $x=\pi=3.141\ 592\ 65\cdots$，若取 $\pi^*=3.14$，则

$$|e(x^*)|\leqslant 0.002$$

则 $\varepsilon(x^*)=0.002$ 就可以作为用 π^* 近似表示 π 的绝对误差限。

显然，误差限总是正数，且

$$|e(x^*)|\leqslant\varepsilon(x^*) \tag{1.2.5}$$

式(1.2.5)在应用上可采用如下写法：

$$x=x^*\pm\varepsilon(x^*) \tag{1.2.6}$$

例 1.2.2 某观测尺的读数刻度为厘米，测某一水位 x 时，如果该值接近某一刻度 x^*，则 x^* 作为 x 的近似值时

$$|e(x^*)|=|x^*-x|\leqslant 0.5\ \text{cm} \tag{1.2.7}$$

它的误差限是 $\varepsilon(x^*)=0.5$ cm。如果读出的水位值为 $x^*=344$，则有 $|344-x|\leqslant 0.5$，据此我们仍然不知道 x 的准确值，只知道 x 的测量值位于区间 $[343.5,344.5]$ 内。

绝对误差不能完全说明近似值的精确程度，例如，有 $x_1=10\pm1$，$x_2=50\pm2$ 两个量，虽然 x_1 的绝对误差限比 x_2 的绝对误差限小，但 $\varepsilon(x_2^*)/x_2^*=2/50=4\%$ 要比 $\varepsilon(x_1^*)/x_1^*=1/10=10\%$ 小，说明 $x_2^*=50$ 作为 x_2 的近似值远比 $x_1^*=10$ 作为 x_1 的近似值的近似程度好得多。所以，除考虑误差的大小外，还应考虑准确值 x 本身的大小。我们把近似值的误差 $e(x^*)$ 与准确值 x 的比值记作

$$e_r(x^*)=\frac{e(x^*)}{x}=\frac{x^*-x}{x} \tag{1.2.8}$$

称为近似值 x^* 的相对误差。

实际计算时，由于真值 x 总是未知的，且由于

$$\frac{e(x^*)}{x}-\frac{e(x^*)}{x^*}=\frac{e(x^*)(x^*-x)}{xx^*}=\frac{[e(x^*)]^2}{x[x+e(x^*)]}=\frac{[e_r(x^*)]^2}{1+e_r(x^*)}$$

是 $e_r(x^*)$ 的二次项，故当 $e_r(x^*)$ 较小时，常取

$$e_r(x^*)=\frac{e(x^*)}{x^*}=\frac{x^*-x}{x^*} \tag{1.2.9}$$

相对误差可正可负，它的绝对值的上界称为该近似值的相对误差限，记作 $\varepsilon_r(x^*)$，即

$$|e_r(x^*)|\leqslant\frac{\varepsilon(x^*)}{|x^*|}=\varepsilon_r(x^*) \tag{1.2.10}$$

1.2.3 有效数字

如果近似值 x^* 的误差限是某数位的半个单位，该位到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位，则称 x^* 有 n 位有效数字。

例 1.2.3 $x=\pi=3.141\,592\,65\cdots$，取 $x^*=3.14$ 时