

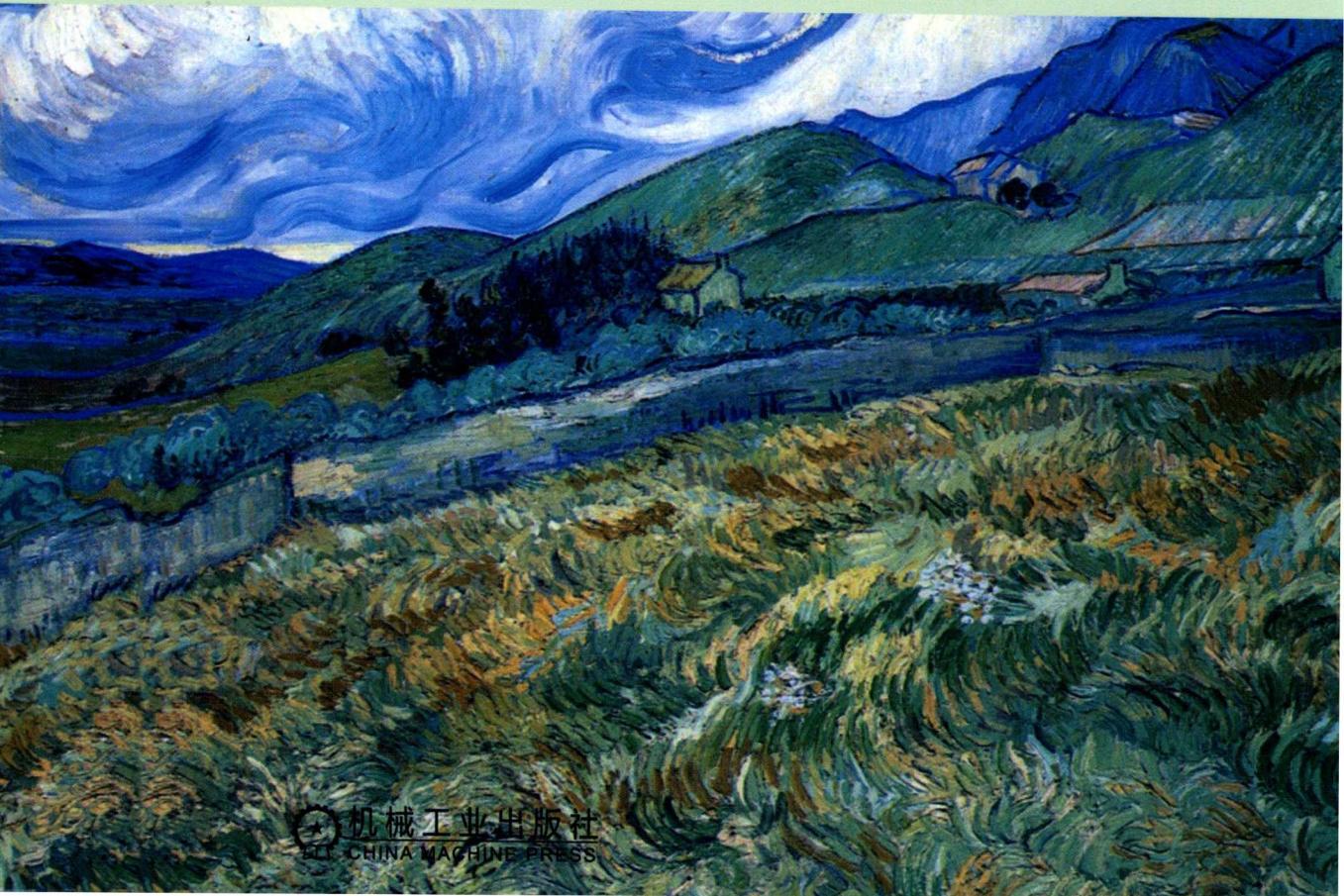
“十三五”国家重点出版物出版规划项目

■ 名校名家基础学科系列

Textbooks of Basic Disciplines from Top Universities and Experts

高等工程数学

郑洲顺 张鸿雁 王国富 编



机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

国家重点出版物出版规划项目
E 名校名家基础学科系列
Textbooks of Base Disciplines from Top Universities and Experts

高等工程数学

郑洲顺 张鸿雁 王国富 编



机械工业出版社

本书通过实际工程案例引申出数学模型以及计算方法，然后再着重讲解理论结果，并以问题导向来进行编写。全书共 13 章，通过城市供水量的预测模型、湘江流量计算问题、养老保险问题、小行星轨道方程计算问题、产品的次品率的推断、屈服点与含碳量和含锰量的关系、灯丝配料对灯泡寿命的影响等问题，分别介绍了插值与拟合算法、数值积分法、非线性方程求根的数值解法、线性方程组的数值解法、线性方程组求解的迭代法、估计与检验、回归分析、方差分析与正交试验设计、线性规划模型与理论、线性规划的单纯形算法、线性规划的对偶问题、最优化问题数学建模专题等内容，这有助于学生通过解决实际问题来掌握理论内容。

本书可作为工科（特别是工程类）硕士研究生的教材或学习参考书，也可供相关专业的教师和工程技术人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

高等工程数学/郑洲顺，张鸿雁，王国富编. —北京：机械工业出版社，2018. 11

“十三五”国家重点出版物出版规划项目 名校名家基础学科系列

ISBN 978-7-111-61846-1

I. ①高… II. ①郑…②张…③王… III. ①工程数学－研究生－教材
IV. ①TB11

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 010781 号

机械工业出版社（北京市百万庄大街 22 号 邮政编码 100037）

策划编辑：汤 嘉 责任编辑：汤 嘉 郑 玮

责任校对：刘雅娜 封面设计：鞠 杨

责任印制：张 博

河北鑫兆源印刷有限公司印刷

2019 年 2 月第 1 版第 1 次印刷

184mm × 260mm · 19. 25 印张 · 1 插页 · 468 千字

标准书号：ISBN 978-7-111-61846-1

定价：49. 80 元

凡购本书，如有缺页、倒页、脱页，由本社发行部调换

电话服务

网络服务

服务咨询热线：010 - 88379833

机 工 官 网：www.cmpbook.com

读者购书热线：010 - 88379649

机 工 官 博：weibo.com/cmp1952

教育服务网：www.cmpedu.com

封面无防伪标均为盗版

金 书 网：www.golden-book.com

前　　言

“高等工程数学”课程是中南大学面向全校各理工科硕士的数学基础课程，共48学时3学分。本书为该课程的配套用书，书中以数学建模思想、方法为主线，有机融入科学计算、应用统计、最优化方法的理论与方法，集科学计算方法、现代数学、计算机技术与实际问题求解于一体，采用研究型教学与探索型学习相结合的编写方式，主要讲授数学建模、科学计算、应用统计、最优化方法的基本方法，以实际问题为背景，采用案例式编写方式，渗透数学建模思想，介绍数学建模的步骤和方法，建立描述实际问题的数学模型，用模型的求解引入科学计算、应用统计、最优化方法的基本知识和一般方法，主要内容包括：数学建模与科学计算方法的基本概念及其相互关系、误差分析理论、函数插值与拟合方法、数值积分方法、方程求解数值方法、应用统计方法、最优化方法、以及数学建模案例分析等。

本书强调实际应用，以学生为本，突出实验与实践性教学环节，实现课内课外相结合，重视学生自主学习能力、创新能力和课外实践能力的培养，内容编排充分考虑学生的数学基础，同时进一步拓展学生的数学知识面，可以适用于不同专业和不同层次学生的教学要求。本书编写的重要目标之一是提高学生应用数学知识解决实际问题的能力旨在全面训练学生运用数学工具建立数学模型、应用科学计算方法解决实际问题的技能与技巧，突出学生的自主学习和自主实践，提高学生的科学计算能力、数学建模能力，培养学生从事现代科研活动的能力和相关素质。

感谢在本书编写过程中学校有关领导给予的支持和鼓励，感谢同行教师给出的中肯意见和建议，感谢给予我们帮助的家人和朋友们。由于编者水平和经验有限，书中不免有一些疏漏和不当之处，请各位专家和广大同行批评指正。

编　　者

目 录

前 言

第1章 数学建模与误差分析	1
1.1 数学与科学计算	1
1.2 数学建模及其重要意义	1
1.2.1 数学建模的过程	1
1.2.2 数学建模的一般步骤	2
1.2.3 数学建模的重要意义	3
1.3 数值方法与算法评价	4
1.4 误差的种类及其来源	6
1.4.1 模型误差	6
1.4.2 观测误差	6
1.4.3 截断误差	6
1.4.4 舍入误差	7
1.5 绝对误差和相对误差	7
1.5.1 绝对误差和绝对误差限	7
1.5.2 相对误差和相对误差限	8
1.6 误差的传播与估计	9
1.6.1 误差传播估计的一般公式	9
1.6.2 误差在算术运算中的传播	11
1.6.3 算法误差实例分析	12
习题1	16
第2章 城市供水量的预测模型——插值与拟合算法	18
2.1 城市供水量的预测问题	18
2.2 求未知函数近似表达式的插值法	18
2.2.1 求函数近似表达式的必要性	18
2.2.2 插值多项式的存在唯一性	19
2.3 求插值多项式的拉格朗日 (Lagrange) 法	20
2.3.1 拉格朗日插值基函数	20
2.3.2 拉格朗日插值多项式	20
2.3.3 插值余项	22
2.3.4 插值误差的事后估计法	23
2.4 求插值多项式的牛顿法	24
2.4.1 向前差分与牛顿向前插值 公式	24
2.4.2 向后差分与牛顿向后插值	

公式	26
2.4.3 差商与牛顿基本插值多项式	27
2.5 求插值多项式的改进算法	29
2.5.1 分段低次插值	29
2.5.2 三次样条插值	31
2.6 求函数近似表达式的拟合法	36
2.6.1 曲线拟合的最小二乘法	37
2.6.2 加权最小二乘法	44
2.6.3 利用正交函数作最小二乘法 拟合	45
2.7 城市供水量预测的简单方法	47
2.7.1 供水量增长率估计与数值 微分	47
2.7.2 利用插值多项式求导数	48
2.7.3 利用三次样条插值函数求导	49
2.7.4 城市供水量预测	50
习题2	54
第3章 湘江流量计算问题——数值 积分法	56
3.1 数值积分公式的构造及代数精度	56
3.1.1 数值求积的必要性	56
3.1.2 构造数值求积公式的基本方法	56
3.1.3 求积公式的余项	57
3.1.4 求积公式的代数精度	57
3.2 数值求积的牛顿-柯特斯方法	58
3.2.1 牛顿-柯特斯公式	59
3.2.2 复合牛顿-柯特斯公式	60
3.2.3 误差的事后估计与步长的自动 选择	63
3.2.4 复合梯形法的递推算式	64
3.3 龙贝格算法	66
3.3.1 龙贝格算法的基本原理	66
3.3.2 龙贝格算法计算公式的简化	68
3.4 高斯型求积公式与测量 位置的优化选取	69
3.4.1 高斯型求积公式的 定义	69

3.4.2 高斯型求积公式的构造与应用	70	5.3.6 列主元消元法	101
3.5 湘江流量的估计	72	5.3.7 高斯-约当消元法	103
习题3	72	5.3.8 高斯消元法的变形	105
第4章 养养老保险问题——非线性方程求根的数值解法	74	5.3.9 平方根法	107
4.1 养养老保险问题	74	5.3.10 追赶法	109
4.1.1 问题的引入	74	5.4 迭代法	112
4.1.2 模型分析	74	5.4.1 雅可比迭代法	113
4.1.3 模型假设	74	5.4.2 高斯-赛德尔迭代法	114
4.1.4 模型建立	74	5.4.3 迭代法的收敛性	115
4.1.5 模型求解	75	5.4.4 超松弛迭代法	121
4.2 非线性方程求根的数值方法	75	5.5 误差分析	124
4.2.1 根的搜索相关定义	75	5.5.1 矩阵的条件数及误差分析	124
4.2.2 逐步搜索法	75	5.5.2 迭代改善法	128
4.2.3 二分法	76	5.5.3 舍入误差分析	130
4.2.4 迭代法	77	5.6 小行星轨道方程问题的模型求解	130
4.2.5 牛顿公式	82	习题5	131
4.2.6 牛顿法的几何意义	82	第6章 常微分方程数值解法	133
4.2.7 牛顿法的局部收敛性	83	6.1 实际问题的微分方程模型	133
4.2.8 牛顿法应用举例	84	6.2 简单的数值方法与基本概念	134
4.2.9 牛顿下山法	85	6.2.1 常微分方程初值问题	134
4.2.10 弦截法与抛物线法	86	6.2.2 欧拉法及改进的欧拉法	135
4.2.11 多项式求值的秦九韶算法	88	6.2.3 截断误差与算法精度的阶	137
4.2.12 代数方程的牛顿法	89	6.3 线性多步法	140
4.2.13 牛顿法对重根的处理	89	6.3.1 数值积分法	140
4.3 养养老保险模型的求解	90	6.3.2 待定系数法	142
习题4	91	6.4 非线性单步法——龙格-库塔法	144
第5章 小行星轨道方程计算问题——线性方程组的数值解法	92	6.4.1 泰勒展开法	144
5.1 小行星轨道方程问题	92	6.4.2 龙格-库塔法	145
5.1.1 问题的引入	92	6.5* 一阶方程组和高阶方程的初值问题	150
5.1.2 模型的分析	92	6.6* 常微分方程边值问题的数值解法	151
5.1.3 模型的假设	93	6.6.1 试射法	151
5.1.4 模型的建立	93	6.6.2 差分法	153
5.2 线性方程组数值解法概述	93	习题6	156
5.3 直接解法	94	第7章 产品的次品率的推断——估计与检验	157
5.3.1 高斯消元法	94	7.1 问题的提出	157
5.3.2 矩阵的三角分解	97	7.2 基本概念和重要结论	157
5.3.3 高斯消元法的计算量	99	7.3 估计方法	161
5.3.4 高斯主元素消元法	99	7.3.1 点估计	161
5.3.5 完全主元素消元法	100	7.3.2 区间估计	163

7.4 假设检验	165	图解法	220
7.4.1 参数假设检验	165	10.4 线性规划的基本概念和 基本定理	222
7.4.2 分布假设检验	169	10.4.1 可行解、可行域	222
习题 7	171	10.4.2 最优解、无界解	223
第 8 章 屈服点与含碳量和含锰量的关系 ——回归分析	174	10.4.3 基本可行解	223
8.1 问题的提出	174	10.4.4 凸集	226
8.2 一元线性回归	174	10.5 线性规划的基本定理	228
8.2.1 回归分析的基本思想和一般 步骤	174	习题 10	229
8.2.2 模型和参数估计	176	第 11 章 线性规划的单纯形算法	232
8.2.3 模型检验	178	11.1 单纯形法原理	232
8.2.4 预测	179	11.1.1 枢轴运算	232
8.2.5 控制	180	11.1.2 典范型线性方程组	233
8.3 多元线性回归	181	11.1.3 单纯形法的一般步骤	233
8.3.1 模型和参数估计	181	11.1.4 判别数、最优判别定理	235
8.3.2 模型检验	184	11.2 表格单纯形方法	237
8.3.3 预测	185	11.3 人工变量及初始基本可行解	246
8.3.4 变量选择及多元共线性问题	186	11.3.1 人工变量大 M 单纯形法	247
8.3.5 线性回归的推广	191	11.3.2 人工变量两阶段单纯形法	248
习题 8	193	习题 11	251
第 9 章 灯丝配料对灯泡寿命的影响—— 方差分析与正交试验设计	195	第 12 章 线性规划的对偶问题	253
9.1 问题的提出	195	12.1 对称的对偶规划	253
9.2 一元方差分析	195	12.1.1 对偶问题的提出	253
9.3 二元方差分析	197	12.1.2 (LP)、(LD) 的对偶 定理	256
9.3.1 无重复试验的方差分析	197	12.2 非对称及混合型对偶规划	260
9.3.2 重复试验的方差分析	200	12.2.1 (SLP) 的对偶规划	260
9.4 正交试验设计	204	12.2.2 (SLP)、(SLD) 的对偶定理	261
9.4.1 方差分析法的推广和正交试验法的 提出	204	12.2.3 混合型对偶线性规划	262
9.4.2 正交表及直观分析法	205	12.3 对偶单纯形法	264
9.4.3 正交试验法的方差分析法	208	12.3.1 什么是对偶单纯形法	264
9.4.4 考虑交互作用的正交设计	210	12.3.2 对偶单纯形法的迭代原理	264
习题 9	212	12.3.3 人工约束方法	267
第 10 章 线性规划模型与理论	215	12.4 对偶问题的经济意义——影子 价格	272
10.1 线性规划的数学模型	215	习题 12	275
10.2 线性规划的标准形式	218	第 13 章 最优化问题数学建模	
10.2.1 标准形式	218	专题	277
10.2.2 化线性规划问题为标准 形式	219	13.1 引言	277
10.3 两个变量线性规划问题的		13.2 最优化问题数学建模	278
		13.3 最优化问题的基本概念	280
		13.4 二维问题的图解法	282

13.5 二次函数	284
13.6 梯度与 Hesse 矩阵	286
13.6.1 多元函数的可微性和梯度	286
13.6.2 梯度的性质	287
13.6.3 Hesse 矩阵	289
13.7 多元函数的泰勒展开公式	291
13.8 极小点及其判定条件	291
13.8.1 极小点的概念	291
13.8.2 局部极小点的判定条件	292
13.9 下降迭代算法及其收敛性	292
13.9.1 下降迭代算法	292
13.9.2 迭代算法中直线搜索及其性质	294
13.9.3 收敛速度	294
13.9.4 非线性最优化算法简介	295
习题 13	295
参考文献	297

第1章 数学建模与误差分析

1.1 数学与科学计算

数学是科学之母，科学技术离不开数学，它通过建立数学模型与数学产生紧密的联系，数学又以各种形式应用于科学技术的各领域中。数学擅长处理各种复杂的依赖关系，精细刻画量的变化以及对可能性进行评估。它可以帮助人们探讨原因、量化过程、控制风险、优化管理、合理预测。几十年来由于计算机以及科学技术的快速发展，求解各种数学问题的数值方法即计算数学也越来越多地应用于各个领域，新的计算性交叉学科分支纷纷兴起，如计算力学、计算物理、计算化学、计算生物、计算经济学等。

科学计算是指利用计算机来完成科学研究和工程领域中提出的数学问题的计算，是一种使用计算机解释和预测实验中难以验证的、复杂现象的方法。科学计算是伴随着电子计算机的出现而迅速发展并获得广泛应用的新兴交叉学科，是数学和计算机应用于高科技领域的必不可少的纽带和工具。科学计算涉及数学的各分支，研究它们适合于计算机编程的数值计算方法，就是计算数学的任务，它是各种计算性学科的纽带和共性基础，是兼有基础性、应用性和边缘性的数学学科。它面向的是数学问题本身而不是具体的模型，但它又是各计算学科共同的基础。

随着计算机技术的飞速发展，科学计算在工程技术中发挥着越来越大的作用，已成为继科学实验和理论研究之后科学研究的第三种方法。在实际应用中所建立的数学模型其完备形式往往不能方便地求出精确解，于是只能将其转化为简化模型，如将复杂的非线性模型通过忽略一些次要因素而简化为线性模型，但这样做往往不能满足精度要求。因此，目前使用数值方法来直接求解较少简化的模型，可以得到满足精度要求的结果，这使科学计算发挥了更大的作用。了解和掌握科学计算的基本方法、数学建模的过程和基本方法已成为科技人才必需的技能。因此，科学计算与数学建模的基本知识和方法是工程技术人才必备的数学素质。

1.2 数学建模及其重要意义

数学作为一门研究现实世界数量关系和空间形式的科学，在它产生和发展的历史长河中，一直与人们生活的实际需要密切相关。用数学方法解决工程实际和科学技术中的具体技术问题时，首先必须将具体问题抽象为数学问题，即建立起能够描述并等价代替该实际问题的数学模型，然后将建立起的数学模型，利用数学理论和计算方法进行推演、论证和计算，得到欲求解问题的解析解或数值解，最后用求得的解析解或数值解来解决实际问题。本篇主要介绍数学建模技术和求解数学问题的数值方法。

1.2.1 数学建模的过程

数学建模过程就是从现实对象到数学模型，再从数学模型回到现实对象的循环，一般经



过表述、求解、解释、验证几个阶段完成，数学建模过程和数学模型求解方法分别如图 1.2.1 和图 1.2.2 所示。

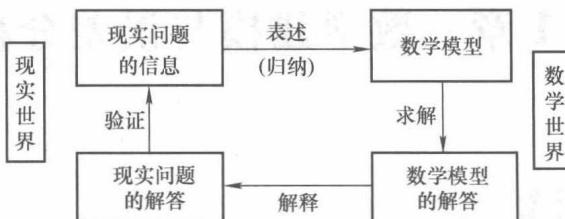


图 1.2.1 数学建模过程示意图

表述 将现实问题“翻译”成抽象的数学问题，属于归纳。数学模型的求解方法则属于演绎。归纳是依据个别现象推出一般规律；演绎是按照普遍原理考察特定对象，导出结论。演绎利用严格的逻辑推理，对现象给出科学解释，具有重要意义，但是它需要以归纳的结论作为公理化形式的前提，只有在这个前提下才能保证其正确性。因此，归纳和演绎是辩证统一的过程：归纳是演绎的基础，演绎是归纳的指导。

解释 把数学模型的解答“翻译”回到现实对象，给出分析、预报、决策或控制的结果。最后作为这个过程重要的一个环节，这些结果需要用实际的信息加以验证。

图 1.2.1 也揭示了现实问题和数学建模的关系。一方面，数学模型是将现实生活中的现象加以归纳、抽象的产物，它源于现实，又高于现实。另一方面，只有当数学模型的结果经受住现实问题的检验时，才可以用来指导实际，完成实践→理论→实践这一循环。

1.2.2 数学建模的一般步骤

一般说来，建立模型需要经过哪几个步骤并没有一定的模式，通常与问题的性质和建模的目的等因素有关。下面介绍建立数学模型的一般过程，如图 1.2.3 所示。

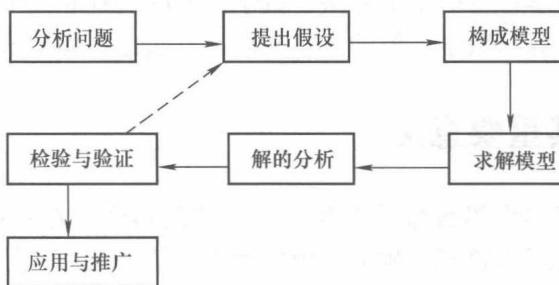


图 1.2.3 数学建模的一般步骤

分析问题 了解问题的实际背景，明确建模目的，搜集必要的信息，如数据和现象等，弄清楚所要研究对象的主要特征，就是找出与问题相关的所有因素，形成一个比较清晰的“数学问题”。

提出假设 根据现象的特征和建模的目的，抓住问题的本质、忽略次要因素，给出必要



的、合理的、简化的假设，并且要在合理和简化之间做出恰当的取舍。通常建立假设的依据，一是出于对问题内在规律的认识，二是来自对现象、数据的分析，以及二者的结合。

构成模型 根据模型的假设，用数学的语言、符号描述对象的内在规律，建立包含常量、变量等的数学模型，如优化模型、微分方程模型、差分方程模型、图论模型等。在建模过程中要遵循尽量采用简单的数学工具这一原则，以便更多的人了解和使用。

求解模型 采用解方程、画图形、优化方法、数值计算、统计分析等各种数学方法，特别是利用当前迅猛发展的数学软件和计算机技术，求出模型的解。

解的分析 对求解结果进行数学上的分析，如模型解的误差分析、统计分析、模型对数据的灵敏性分析、对假设的强健性分析等。解的分析就是分析模型解的可靠性。

检验与验证 把求解和分析的结果翻译回实际问题中，与实际的现象、数据比较，检验模型的合理性和适用性。如果结果与实际不符，问题常常出现在模型假设上，此时应该修改、补充假设，重新建立模型求解。

应用与推广 应用是指将经过检验与实际问题相符的解再应用于解决或指导实际问题，应用的方式与问题性质、建模目的以及最终的结果有关；推广是指将所得到的解决问题的方法用于求解类似问题或采用新知识、新方法和新技术等对原问题进行研究。应当指出的是，并不是所有问题的建模都要经过这些步骤，有时几个步骤之间的界限也不是那么分明，建模时不要拘泥于形式，要采用灵活的表述形式。

1.2.3 数学建模的重要意义

作为用数学方法解决实际问题的第一步，数学建模自然有着与数学同样悠久的历史。进入20世纪以来，随着数学以空前的广度和深度向其他领域渗透，以及计算机的出现和飞速发展，数学建模越来越受到人们的重视，数学建模在现实世界中有着重要的意义。

(1) 在一般工程技术领域，数学建模仍然大有用武之地。

在以声、光、热、力、电这些物理学科为基础的诸如机械、电机、土木、水利等工程技术领域中，数学建模的普遍性和重要性不言而喻。虽然这里的基本模型是已有的，但是由于新技术、新工艺的不断涌现，提出许多需要用数学方法解决的新问题；随着高速、大型计算机的飞速发展，使得过去即便有了数学模型也无法求解的课题（如大型水坝的应力计算，中长期天气预报等）迎刃而解；建立在数学模型和计算机模拟基础上的CAD技术，以其快速、经济、方便等优势，大量地替代了传统工程设计中的现场实验、物理模拟等手段。

(2) 在高新技术领域，数学建模几乎是必不可少的工具。

无论是发展通讯、航天、微电子、自动化等高新技术本身，还是将高新技术用于传统工业区创造新工艺、开发新产品，计算机技术支持下的建模和模拟都是经常使用的有效手段。数学建模、数值计算和计算机图形学等相结合形成的计算机软件，已经被固化在产品中，并在许多高新技术领域起着核心作用，被认为是高新技术的特征之一。在这个意义上，数学不仅作为一门科学，是许多技术的基础，而且直接走向了技术的前端。有人认为“高新技术本质上是一种数学技术”。

(3) 数学迅速进入一些新领域，为数学建模开拓了更多新的应用领域。

随着数学向诸如经济、人口、生态、地质等所谓非物理领域的渗透，一些交叉学科如计量经济学、人口控制论、数学生态学、数学地质学等学科也应运而生。当用数学方法研究许



多领域中的定量关系时，数学建模就成为首要的、关键的步骤，同时也是这些学科发展与应用的基础。在这些领域里建立不同类型、不同方法、不同深浅程度的模型的选择相当多，为数学建模提供了广阔的新天地。马克思说过：“一门科学只有成功地运用数学时，才算达到了完善的地步。”展望 21 世纪，数学必将大踏步地进入所有学科，数学建模将迎来蓬勃发展的新时期。

美国科学院一位院士总结了将数学转化为生产力过程中的成功和失败，得出了“数学是一种关键的、普遍的、可以应用的技术”的结论，认为数学“由研究到工业领域的技术转化，对加强经济竞争力是有重要意义的”，因而“计算和建模重新成为中心课题，它们是数学科学技术转化的主要途径”。

1.3 数值方法与算法评价

数值计算已成为科学研究所的第三种基本手段。所谓数值方法，是指将欲求解的数学模型（数学问题）简化成一系列算术运算和逻辑运算，以便在计算机上求出问题的数值解，并对算法的收敛性和误差进行分析、计算。这里所说的“算法”，不只是单纯的数学公式，还包括由基本的运算和运算顺序的规定所组成的整个解题方案和步骤。一般可以通过框图（流程图）来直观地描述算法的全貌。

选定适合的算法是整个数值计算中非常重要的一环。例如，当计算多项式

$$P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

的值时，若直接计算 $a_i x^i$ ($i = 0, 1, \dots, n$) 再逐项相加，共需做

$$1 + 2 + \cdots + (n-1) + n = \frac{n(n+1)}{2}$$

次乘法和 n 次加法。 $n=10$ 时需做 55 次乘法和 10 次加法。若用著名秦九韶（我国宋朝数学家）算法，将多项式 $P(x)$ 改写成

$$P(x) = (((\dots((a_n x + a_{n-1}) x + a_{n-2}) x + \cdots + a_2) x + a_1) x + a_0$$

来计算时，只要做 n 次乘法和 n 次加法即可。

对于小型问题，计算速度的快慢和占用计算机内存的多少似乎影响不大。但对于复杂的大型问题而言，却起着决定性的作用。算法选取得不恰当，不仅会影响到计算的速度和效率，还会由于计算机计算的近似性和误差的传播、积累直接影响到计算结果的精度，甚至直接影响到计算的成败。不合适的算法会导致计算误差达到不能容许的地步，从而使得计算最终失败，这就涉及算法的数值稳定性问题。

数值计算过程中会出现各种误差，它们可分为两大类：一类是由于计算者在工作中的粗心大意而产生的，例如笔误或误用公式等，这类误差称为“过失误差”或“疏忽误差”。它完全是人为造成的，只要工作中仔细、谨慎，是完全可以避免的；而另一类为“非过失误差”，在数值计算中这往往是无法避免的，例如近似误差、模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差等。对于“非过失误差”，应该设法尽量降低其数值，尤其要控制住经多次运算后误差的积累，以确保计算结果的精度。

下面是一个简单的算例，可以看出近似值带来的误差和算法的选择对计算结果所产生的巨大影响。



例 1.3.1 计算 $x = \left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1} \right)^3$

可以用下面四种算式算出：

$$x = (\sqrt{2}-1)^6, x = 99 - 70\sqrt{2}, x = \left(\frac{1}{\sqrt{2}+1} \right)^6, x = \frac{1}{99 + 70\sqrt{2}}$$

如果 $\sqrt{2}$ 不取近似，且计算过程没有误差，则上面四个算式的计算结果是相等的；但是如果分别用近似值 $\sqrt{2} \approx 7/5 = 1.4$ 和 $\sqrt{2} \approx 17/12 = 1.4166 \dots$ 按上面四种算式计算 x 值，其结果如表 1.3.1 所示。

表 1.3.1 四种算式的计算结果

序号	算式	计算结果	
		$\sqrt{2} \approx \frac{7}{5}$	$\sqrt{2} \approx \frac{17}{12}$
1	$(\sqrt{2}-1)^6$	$\left(\frac{2}{5}\right)^6 = 0.004096$	$\left(\frac{5}{12}\right)^6 = 0.005233$
2	$99 - 70\sqrt{2}$	1	$-\frac{1}{6} = -0.166667$
3	$\left(\frac{1}{\sqrt{2}+1}\right)^6$	$\left(\frac{5}{12}\right)^6 = 0.005233$	$\left(\frac{12}{29}\right)^6 = 0.005020$
4	$\frac{1}{99 + 70\sqrt{2}}$	$\frac{1}{197} \approx 0.005076$	$\frac{12}{2378} \approx 0.005046$

由表 1.3.1 可见，按不同算式和近似值计算出的结果各不相同，甚至出现了负值，这真是差之毫厘，谬以千里。可见近似值和算法的选择对计算结果的精确度影响很大。因此，在研究算法的同时，还必须正确掌握误差的基本概念、误差在数值运算中的传播规律、误差分析的基本方法和算法的数值稳定性。否则，即便选择了合理的算法也可能会得出错误的结果。

衡量一个算法的好坏时，计算时间的多少是非常重要的一个指标。由于实际的执行时间依赖于计算机的性能，因此算法所花时间是用它执行的所有基本运算的总次数来衡量的，这样时间与运算的次数直接联系起来了。当然，即使用一个算法计算同一类型的问题时，由于各种问题的数据不同，计算快慢也会不同，一般讨论最坏情况下所花的时间。设输入数据的规模是 l （在网络问题中， l 一般与节点数及弧数有关，而对一般的极值问题， l 往往与变量数及约束数有关）。设在最坏情况下运算次数是 $f(l)$ ，则 $f(l)$ 称为算法的计算复杂性。

具有什么样计算复杂性的算法被认为是有好的呢？目前计算机科学中广为接受的观点是：多项式时间算法，即 $f(l)$ 是关于 l 的一个多项式，或者是以一个多项式为上界的。例如， $l^2 + l$, l^3 , $l \lg l$ 等是好的算法；而指数时间算法，即 $f(l)$ 是关于 l 的指数式或以一个指数式为下界的，例如 3^l , $l!$ 等情况，则是坏的算法。这个看法的依据是很显然的，因为当 l 增大时，指数函数的计算量比多项式函数的计算量增长快很多。

注意：在理论上证明是好的算法不一定在实际中有效，在理论上证明不是多项式时间的算法在实际中也不一定就效果不好。如关于线性规划问题的算法有如下的特殊性：

- (1) 单纯形法是时间复杂性为指数阶的算法，但它却是非常有效的算法；
- (2) 椭球法从理论上是一项重大突破，是第一个多项式算法，遗憾的是广泛的实际检



验表明其计算效果比单纯形方法差，因而，它在实际使用中不能取代单纯形法；

(3) Karmarker 方法是求解线性规划的另一种多项式算法，从理论上说，Karmarker 算法的阶比椭球法有所降低，从实际效果来说也好得多，因而引起了学术界的广泛注意。

1.4 误差的种类及其来源

在数值计算中，除了可以避免的过失误差外，还有不少来源不同而又无法避免的非过失误差存在于数值计算过程中，这其中主要有如下几种：

1.4.1 模型误差

在建模（建立数学模型）过程中，欲将复杂的物理现象抽象、归纳为数学模型，往往需要忽略一些次要因素的影响，对问题进行某些必要的简化。这样建立起来的数学模型实际上必定只是所研究的复杂客观现象的一种近似的描述，它与真正客观存在的实际问题之间有一定的差别，这种误差称为“模型误差”。

1.4.2 观测误差

在建模和具体运算过程中所用到的一些初始数据往往都是通过人们实际观察、测量得来的，由于受到所用观测仪器、设备精度的限制，这些测得的数据都只能是近似的，即存在着误差，这种误差称为“观测误差”或“初值误差”。

1.4.3 截断误差

在不少数值运算中常遇到超越计算，如微分、积分和无穷级数求和等，它们需用极限或无穷过程来求得。然而计算机却只能完成有限次算术运算和逻辑运算，因此需将解题过程化为一系列有限的算术运算和逻辑运算。这样就要对某种无穷过程进行“截断”，即仅保留无穷过程的前段有限序列而舍弃它的后段无限序列。这就带来了误差，称它为“截断误差”或“方法误差”。例如，函数 $\sin x$ 和 $\ln(1+x)$ 可分别展开为如下的无穷幂级数：

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots, \quad (1.4.1)$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots \quad (-1 < x \leq 1). \quad (1.4.2)$$

若取级数的起始若干项的部分和作为函数值的近似，例如取

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!}, \quad (1.4.3)$$

$$\ln(1+x) \approx x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3}, \quad (1.4.4)$$

则由于它们的第四项和以后各项都被舍弃了，自然就产生了误差。这就是由于截断了无穷级数自第四项起的后段而产生的截断误差。式 (1.4.3) 和式 (1.4.4) 的截断误差是很容易估算的，因为幂级数 (1.4.1) 和幂级数 (1.4.2) 都是交错级数，当 $x < 1$ 时的各项的绝对值又都是递减的，因此，这时它们的截断误差 $R_4(x)$ 可分别估计为：



$$|R_4(x)| \leq \frac{x^7}{7!},$$

和

$$|R_4(x)| \leq \frac{x^4}{4}.$$

1.4.4 舍入误差

在数值计算过程中还会用到一些无穷小数，例如无理数和有理数中某些分数化出的无限循环小数，如

$$\pi = 3.14159265\cdots,$$

$$\sqrt{2} = 1.41421356\cdots,$$

$$\frac{1}{3!} = \frac{1}{6} = 0.166666\cdots$$

由于受计算机机器字长的限制，它所能表示的数据只能是有限位数，这时就需把数据按四舍五入舍入成一定位数的近似有理数来代替。由此引起的误差称为“舍入误差”或“凑整误差”。

综上所述，数值计算中除了可以完全避免的过失误差外，还存在难以避免的模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差。数学模型一旦建立，进入具体计算时所要考虑和分析的就是截断误差和舍入误差。在计算机上经过千百次运算后所积累起来的总误差不容忽视，有时可能会大得惊人，甚至达到“淹没”欲求解真值的地步，而使计算结果失去其根本意义。因此，在讨论算法时，有必要对其截断误差的估算和舍入误差的控制给出适当的分析。

1.5 绝对误差和相对误差

1.5.1 绝对误差和绝对误差限

定义 1.5.1 设某一个准确值（称为真值）为 x ，其近似值为 x^* ，则 x 与 x^* 的差

$$\varepsilon(x) = x - x^* \quad (1.5.1)$$

称为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。当 $\varepsilon(x) > 0$ 时，称为亏近似值或弱近似值，反之则称为盈近似值或强近似值。

由于真值往往是未知的，因此， $\varepsilon(x)$ 的准确值（真值）也就无法求出，但一般可估计此绝对误差的上限，即可以求出一个正值 η ，使

$$|\varepsilon(x)| = |x - x^*| \leq \eta, \quad (1.5.2)$$

此 η 称为近似值 x^* 的绝对误差限，简称误差限，或称精度。有时也用

$$x = x^* \pm \eta \quad (1.5.3)$$

来表示式 (1.5.2)，这时等式右端的两个数值 $x^* + \eta$ 和 $x^* - \eta$ 代表了 x 所在范围的上限和下限。 η 越小，表示该近似值 x^* 的精度越高。

例 1.5.1 用刻有 mm 刻度的尺测量不超过 1m 的长度 l ，读数方法如下：

如长度 l 接近于 mm 刻度 l^* ，就读出该刻度数 l^* 作为长度 l 的近似值。显然，这个近似



值的绝对误差限就是 $\frac{1}{2}$ mm，则有

$$|\varepsilon(l)| = |l - l^*| \leq \frac{1}{2} (\text{mm}).$$

如果读出的长度是 513 mm，则有

$$|l - 513| \leq 0.5 (\text{mm}).$$

这样，虽仍不知准确长度 l 是多少，但由式 (1.5.3) 可得到不等式

$$512.5 \leq l \leq 513.5 (\text{mm}),$$

这说明 l 必在 [512.5, 513.5] mm 区间内.

1.5.2 相对误差和相对误差限

用绝对误差还不能完全刻画近似值的精确度. 例如测量 10m 的长度时产生 1cm 的误差与测量 1m 的长度时产生 1cm 的误差是大有区别的. 虽然两者的绝对误差相同，都是 1cm，但是由于所测量的长度要差十倍，显然前一种测量比后一种要精确得多. 这说明要评价一个近似值的精确度，除了要看其绝对误差的大小外，还必须考虑该测量本身的大小，这就需要引进相对误差的概念.

定义 1.5.2 绝对误差与真值之比，即

$$\varepsilon_r(x) = \frac{\varepsilon(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x} \quad (1.5.4)$$

称为近似值 x^* 的相对误差.

在上例中，前一种测量的相对误差为 $\frac{1}{1000}$ ，而后一种测量的相对误差则为 $\frac{1}{100}$ ，是前一种的十倍.

由式 (1.5.4) 可见，相对误差可以由绝对误差求出. 反之，绝对误差也可由相对误差求出，其相互关系式为：

$$\varepsilon(x) = x \cdot \varepsilon_r(x). \quad (1.5.5)$$

相对误差不仅能表示出绝对误差，而且在估计近似值运算结果的误差时，它比绝对误差更能反映出误差的特性，且相对误差是个纯数字，没有量纲. 因此在误差分析中，相对误差比绝对误差更为重要.

相对误差也无法准确求出. 因为式 (1.5.4) 中的 $\varepsilon(x)$ 和 x 均无法准确求得. 也和绝对误差一样，可以估计它的大小范围，即可以找到一个正数 δ ，使

$$|\varepsilon_r(x)| \leq \delta, \quad (1.5.6)$$

δ 称为近似值 x^* 的相对误差限.

例 1.5.2 称 100kg 重的东西若有 1kg 的误差和量 100m 长的东西有 1m 的误差，这两种测量的相对误差都是 $\frac{1}{100}$. 与此相反，由于绝对误差有量纲，上例中两种测量的绝对误差 1kg 和 1m 的量纲不同，两者就无法进行比较.

在实际计算中，由于真值 x 总是无法知道的，因此往往取



$$\varepsilon_r^*(x) = \frac{\varepsilon(x)}{x^*} \quad (1.5.7)$$

作为相对误差的另一定义.

下面比较 $\varepsilon_r^*(x)$ 与 $\varepsilon_r(x)$ 之间的相差究竟有多大:

$$\begin{aligned}\varepsilon_r(x) - \varepsilon_r^*(x) &= \varepsilon(x) \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{x^*} \right) = -\frac{1}{x \cdot x^*} [\varepsilon(x)]^2 \\ &= -\frac{1}{xx^*} [x\varepsilon_r(x)]^2 = -\frac{x}{x^*} [\varepsilon_r(x)]^2 \\ &= -\frac{x}{x - \varepsilon(x)} [\varepsilon_r(x)]^2 \\ &= -\frac{1}{1 - \varepsilon_r(x)} [\varepsilon_r(x)]^2.\end{aligned}$$

一般地, $\varepsilon_r(x)$ 很小, 不会超过 0.5, 这样 $\frac{1}{1 - \varepsilon_r(x)}$ 不大于 2, 于是

$$|\varepsilon_r(x) - \varepsilon_r^*(x)| \leq 2[\varepsilon_r(x)]^2 = o(\varepsilon_r(x)).$$

因此上式右端是一高阶小量, 可以忽略, 故可用 $\varepsilon_r^*(x)$ 来代替 $\varepsilon_r(x)$.

相对误差也可用百分数来表示:

$$\varepsilon_r^*(x) = \frac{\varepsilon(x)}{x^*} \times 100\%,$$

这时称它为百分误差.

1.6 误差的传播与估计

1.6.1 误差传播估计的一般公式

在实际的数值计算中, 参与运算的数据往往都是些带有误差的近似值, 这些数据误差在多次运算过程中会进行传播, 使计算结果产生误差, 而确定计算结果所能达到的精度显然是十分重要的, 但往往很困难. 不过, 对计算误差给出一定的定量估计还是可以做到的. 下面利用函数泰勒 (Taylor) 展开式推出误差传播估计的一般公式.

考虑二元函数 $y=f(x_1, x_2)$, 设 x_1^* 和 x_2^* 分别是 x_1 和 x_2 的近似值, y^* 是函数值 y 的近似值, 且 $y^* = f(x_1^*, x_2^*)$, 函数 $f(x_1, x_2)$ 在点 (x_1^*, x_2^*) 处的泰勒展开式为:

$$\begin{aligned}f(x_1, x_2) &= f(x_1^*, x_2^*) + \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^* (x_1 - x_1^*) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^* (x_2 - x_2^*) \right] + \\ &\quad \frac{1}{2!} \left[\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} \right)^* \cdot (x_1 - x_1^*)^2 + 2 \left(\frac{\partial f}{\partial x_1 \partial x_2} \right)^* \cdot (x_1 - x_1^*)(x_2 - x_2^*) + \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \right)^* \cdot (x_2 - x_2^*)^2 \right] + \cdots.\end{aligned}$$

式中, $(x_1 - x_1^*) = \varepsilon(x_1)$ 和 $(x_2 - x_2^*) = \varepsilon(x_2)$ 一般都是小量值, 如忽略高阶小量, 则上式可简化为:

