21世纪高等院校数学规划系列教材

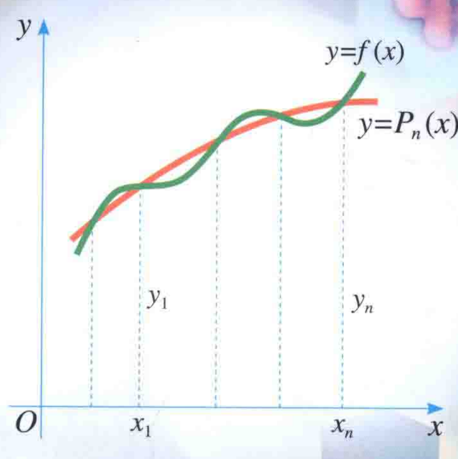
主编 肖筱南

现代数值计算方法

XIANDAI SHUZHI JISUAN FANGFA

第二版

肖筱南 主编



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

现代数值计算方法

（第二版）

主编　肖筱南

编著　肖筱南　赵来军　党林立

北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

图书在版编目 (CIP) 数据

现代数值计算方法 / 肖筱南主编 . — 2 版 . — 北京 : 北京大学出版社 , 2016. 8
(21 世纪高等院校数学规划系列教材)
ISBN 978-7-301-27446-0

Ⅰ . ①现… Ⅱ . ①肖… Ⅲ . ①数值计算—计算方法—高等学校—教材
Ⅳ . ① O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 193701 号

书　　名	现代数值计算方法 (第二版) XIANDAI SHUZHI JISUAN FANGFA
著作责任者	肖筱南　主编
责任编辑	曾琬婷
标准书号	ISBN 978-7-301-27446-0
出版发行	北京大学出版社
地　　址	北京市海淀区成府路 205 号　100871
网　　址	http://www.pup.cn　新浪微博 : @ 北京大学出版社
电子信箱	zpup@pup.cn
电　　话	邮购部 62752015　发行部 62750672　编辑部 62767347
印 刷 者	北京大学印刷厂
经 销 者	新华书店
	787 毫米 × 980 毫米　16 开本　13. 5 印张　280 千字 2003 年 7 月第 1 版 2016 年 8 月第 2 版　2016 年 8 月第 1 次印刷 (总第 12 次印刷)
印　　数	34501—37501 册
定　　价	32. 00 元

内容简介

本书是为高等理工科院校各专业本科生、研究生开设的“数值计算方法”课程而编写的教材.全书系统地介绍了现代科学与工程计算中常用的数值分析理论、方法及有关应用,内容包括:数值计算方法引论、线性方程组的数值解法、非线性方程的数值解法、矩阵的特征值与特征向量的计算、插值法、最小二乘法与曲线拟合、数值微积分、常微分方程的数值解法等.本书取材新颖、阐述严谨、内容丰富、重点突出、推导详尽、思路清晰、深入浅出、富有启发性,便于教学与自学.为了加强对学生基本知识的训练与综合能力的培养,每章末都配备了小结并精选了相当数量的算法与C语言程序设计上机实例、复习思考题及综合练习题,以便读者巩固、复习、应用所学知识.书末附有习题答案与提示,可供教师与学生参考.

本书可作为高等理工科院校各专业本科生、研究生“数值计算方法”课程的教材或教学参考书,也可供从事数值计算的科技工作者学习参考.

“21 世纪高等院校数学规划系列教材”
编审委员会

“21 世纪高等院校数学规划系列教材”书目

高等数学(上册)	林建华等编著
高等数学(下册)	林建华等编著
微积分	曹镇潮等编著
线性代数	许振明等编著
新编概率论与数理统计(第二版)	肖筱南等编著
现代数值计算方法(第二版)	肖筱南　主编

第二版前言

随着科学技术的飞速发展，作为计算科学的基础——数值计算方法越来越显示出它的重要性. 本书作为高等理工科院校各相关专业本科生喜爱的畅销教材，自 2003 年出版以来，一直受到广大读者的热情关怀、支持与好评，并被许多院校广泛采用，致使出版至今，累计印刷 10 余次，方能满足读者需求.

为了进一步满足新世纪对高等理工科院校"数值计算方法"课程培养复合型高素质人才的要求，我们根据多年的教学改革、研究与实践以及教材出版后读者的反馈意见，并按照新形势下课程改革的精神与学生学习"数值计算方法"课程的实际要求，对第一版教材进行了全面的、必要的修订.

经过修订后的教材，结构更加严谨，逻辑更加清晰，比第一版教材更加完整；既保持了第一版教材的结构、系统与风格，又更加简明、实用、易学、易教.

本版由肖筱南教授制订修订方案并负责统稿、定稿. 在修订过程中，充分听取了广大教师所提出的宝贵意见与建议. 周小林老师与许振明老师为本书的再版付出了辛勤劳动. 本次修订得到了北京大学出版社的大力支持与帮助. 在此一并表示诚挚的谢意.

我们期望第二版教材能更加适应新世纪"数值计算方法"课程教学的需要，不足之处，恳请读者批评指正.

编　者

2016 年 5 月

第一版前言

随着科学技术的不断发展与计算机技术的广泛应用，数值计算越来越显示出其重要作用，科学计算的重要性被愈来愈多的人所认识. 而对于当今信息社会的大学生而言，则更应当具备这方面的知识与能力. 事实上，在众多科技与工程领域中，如果没有科学计算，就不可能产生一流的研究成果. 由此可见科学计算在科技发展中的重要性. 正因如此，许多理工科大学都已将“数值计算方法”列为大学生与硕士研究生的必修课程，以便学生将来能为众多的科学与工程技术问题提供准确、有效、可靠、科学的数值计算方法.

为了进一步提高数值计算方法的教学质量，更好地满足新世纪对高等理工科院校培养复合型高素质人才的要求，我们在紧扣教育部最新颁布的工科院校“数值计算方法”教学大纲的前提下，结合多年的教学研究与实践，博采众家之长并针对理工科院校学生学习计算方法的实际需要，几经易稿编写了本书. 在编写过程中，我们既充分考虑到现代科学技术发展的需要，系统地介绍了现代科学与工程计算中常用的数值计算方法、理论及其应用，又充分考虑到理工科院校开设“数值计算方法”课程的教学特点和需要，在遵循本学科科学性与系统性、基础性与实用性并重的前提下，尽量注意贯彻由浅入深、循序渐进、融会贯通的教学原则与直观形象的教学方法，既注意现代数值计算方法基本概念、基本理论和方法的阐述，又注意对学生基本计算、编程能力的训练和分析问题、解决问题能力的培养，以达到使学生真正掌握好这门课程之目的. 此外，本书每章末还都配备了小结、算法及 C 语言程序设计实例、复习思考题和综合练习题，以供读者巩固、复习、应用所学知识. 书末附有习题答案与提示，可供教师与学生参考.

本书可作为高等理工科院校本科生、研究生“数值计算方法”课程的教材或教学参考书. 全书共分八章，内容包括：数值计算中的误差分析，线性方程组的数值解法，非线性方程的数值解法，矩阵的特征值及特征向量的计算，插值法，最小二乘法与曲线拟合，数值微积分，常微分方程的数值解法等. 本书结构严谨、逻辑清晰、深入浅出、分析深刻、富有新意，便于教学与阅读. 书中内容包括了现代科学与工程计算中常用的数值分析理论及方法，本书各章内容具有一定的独立性. 讲授全书约需 72 学时，但根据实际情况与专业需要，删去部分内容，也可适用于 40～60 学时的教学需要.

本书由肖筱南教授主编，编著者为肖筱南教授、赵来军博士与党林立博士. 在本书

的编写过程中,得到了北京大学出版社的大力支持与帮助,责任编辑刘勇副编审为本书的出版付出了辛勤劳动,在此一并表示诚挚的谢意.

我们谨将本书奉献给读者,希望它能成为每位读者学习数值计算方法的良师益友.限于编者水平,书中难免有不妥之处,恳请读者指正.

编　者

2003 年 5 月

目　　录

第一章 数值计算方法引论

数值计算方法是研究数学问题的数值解及其理论的一个数学分支,其应用极为广泛. 数值计算方法是将欲求解的数学模型或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. 但由于数值解与准确解之间往往存在误差,当然人们总是希望其误差越小越好. 因此,误差分析与估计就成为了数值计算方法的重要内容. 本章简要介绍数值计算方法的研究对象、任务与特点,误差的基本理论(包括误差的来源与分类、数据误差的影响)以及数值算法的稳定性与数值算法设计的原则.

§1 数值计算方法的研究对象、任务与特点

一、科学计算的意义

现代科学研究有三大支柱:理论研究、科学实验和科学计算. 科学计算的基础就是数值计算方法. 数值计算方法也称数值分析、数值方法或计算机数学,它是计算数学的一个主要部分. 计算数学是数学科学的一个分支,它研究用计算机求解各种数学问题的数值计算方法及其理论与软件实现,是用公式表示数学问题以便可以利用算术运算和逻辑运算解决这些问题的技术.

数值计算方法是寻求数学问题近似解的方法、过程及其理论的一个数学分支,它主要考虑各种数学模型及其算法. 这些数学模型是为了解决各类应用领域,特别是科学与工程计算领域的实际问题而提出的. 数值计算方法以纯数学作为基础,但却不完全像纯数学那样只研究数学本身的理论,而是看重研究数学问题求解的数值方法及与此有关的理论(包括方法的收敛性、稳定性及误差分析),且是根据计算机的特点研究计算时间和空间(也称计算复杂性)最省的计算方法. 有的方法在理论上虽然还不够完善与严密,但通过对比分析、实际计算和实践检验等手段,被证明是行之有效的方法,这样的计算方法也可采用. 因此,数值分析既有纯数学

的高度抽象性与严密科学性的特点，又有应用的广泛性与实际试验的高度技术性的特点，是一门与计算机密切结合的实用性很强的计算数学课程.

学习数值计算方法，除了具有上述意义，还对解决如下问题具有重要意义：

(1) 在许多情况下，数值计算方法能够解决用传统的解析方法不可能求解的问题. 例如，在处理大型方程组、非线性和复杂几何等问题时，数值方法可以极大地提高问题求解的技能.

(2) 数值计算方法可以让用户更加智慧地使用被视为“黑盒”的“封装过的”软件. 许多问题不能直接用封装的程序解决，如果熟悉数值方法并擅长计算机编程的话，就可以自己设计程序解决问题.

(3) 数值计算方法是学习使用计算机的有效载体，对于展示计算机的强大和不足是非常理想的. 当成功地在计算机上实现了数值方法，然后将它们应用于求解其他难题时，计算机的服务功能便可得到极大的展现. 同时，在数值分析的过程中，我们还会研究如何认识和控制误差. 这是大规模数值计算的组成部分，也是大规模数值计算面临的最大问题.

(4) 数值计算方法提供了一个增强对数学理解的平台，因为数值方法的一个功能就是将数学从高级抽象的理论运算化为基本的算术运算. 从这个独特的角度而言，数值计算方法可以提高对数学问题的理解和认知.

二、数值计算方法的研究对象、任务与特点

随着计算机的普及与发展，数值计算已成为科学研究与工程设计中必不可少的重要手段. 在科学技术高速发展的今天，学习、掌握数值计算方法并会用计算机来解决科研与工程实际中的数值计算问题，已成为广大科技与工程技术人员的迫切需要. 因此，在理工科高等院校的本科生与研究生的教育中，很多专业都将“数值计算方法”列为必修课程.

数值计算方法是研究科学与工程技术中数学问题的数值解及其理论的一个数学分支，它的涉及面很广，如涉及代数、微积分、微分方程的数值解等问题. 自计算机成为数值计算的主要工具以来，数值计算方法的主要任务就是研究适合于在计算机上使用的数值计算方法及与此相关的理论，如方法的收敛性、稳定性以及误差分析等. 此外，还要根据计算机的特点研究计算时间最短、需要计算机内存最少等计算方法问题. 利用计算机解决科学计算问题需经历几个环节：实际问题→数学模型→提出数学问题→设计高效、可靠的数值计算方法→程序设计→上机计算求出结果. 可以看出，由实际问题的提出到上机求得问题解答，整个过程的关键是如何根据数学模型提出求解的数值计算方法直到编出程序上机计算出结果，它既是计算数学的任务，也是数值计算方法的研究对象. 可见，数值计算方法不同于纯数学的是，它既具有数学的抽象性与严格性，又具有应用的广泛性与实际试验的技术性，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系统的计算数学课程. 具体而言，数值计算方法的特点可概括为：应提供能让计算机直接处理的、包括加减乘除运算和逻

辑运算及具有完整解题步骤的、切实可行的有效算法与程序;可用框图、算法语言、数学语言或自然语言来描述,并有可靠的理论分析;能任意逼近且达到精确度要求,对近似算法应保证收敛性和数值稳定性、进行必要的误差分析. 此外,还要注意算法能否在计算机上实现,应避免因数值方法选用不当、程序设计不合理而导致超过计算机的存贮能力,或导致计算结果精确度不高等.

根据“数值计算方法”的特点,学习本课程时,我们首先应注意掌握数值计算方法的基本原理和思想,注意方法处理的技巧及其与计算机的密切结合,重视误差分析、收敛性及稳定性的基本理论;其次,要注意方法的使用条件,通过各种方法的比较,了解各种方法的异同及优缺点;最后,为了学好这门课程,还应通过一定数量的理论与计算练习,培养与提高我们使用各种数值计算方法解决实际计算问题的能力.

§2 误差与数值计算的误差估计

一、误差的来源与分类

在数值计算过程中,估计计算结果的精确度是十分重要的工作. 而影响精确度的因素是各种各样的误差,它们可分为两大类:一类称为“过失误差”,它们一般是由人为造成的,是可以避免的,故在数值计算中我们不讨论它们;而另一类称为“非过失误差”,这类误差在数值计算中往往是无法避免的,也是我们要研究的. 按照非过失误差的来源,它们可分为以下四种:

1. 模型误差

用数值计算方法解决实际问题时,首先必须建立数学模型. 由于实际问题的复杂性,在对实际问题进行抽象与简化时,往往为了抓住主要因素而忽略了一些次要因素,这样就会使得建立起来的数学模型只是复杂客观现象的一种近似描述,它与实际问题之间总会存在一定的误差. 我们把数学模型与实际问题之间出现的这种误差称为**模型误差**.

2. 观测误差

在数学模型中往往包含一些由观测或实验得来的物理量,由于测量工具精确度和测量手段的限制,它们与实际量大小之间必然存在误差,这种误差称为**观测误差**.

3. 截断误差

对于由实际问题建立起来的数学模型,在很多情况下要得到准确解是困难的,通常要用数值方法求出它的近似解. 例如,常常用有限过程逼近无限过程,用能计算的问题代替不能计算的问题. 这种数学模型的精确解与由数值方法求出的近似解之间的误差称为**截断误差**. 由于截断误差是数值计算方法固有的,故又称为**方法误差**.

例如,用函数 $f(x)$ 的泰勒(Taylor)展开式的部分和 $S_n(x)$ 去近似代替 $f(x)$,其余项 R_n 就是真值 $f(x)$ 的截断误差.

4. 舍入误差

用计算机进行数值计算时,由于计算机的位数有限,计算时只能对超过位数的数字进行四舍五入,由此产生的误差称为**舍入误差**. 例如,用 2.71828 作为无理数 e 的近似值产生的误差就是舍入误差. 应请读者注意的是,虽然少量的舍入误差是微不足道的,但在计算机上完成了千百万次运算之后,舍入误差的积累却可能是十分惊人的.

综上所述,数值计算中除了可以完全避免的过失误差外,还存在难以回避的模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差. 而在这四种误差来源的分析中,前两种误差是客观存在的,后两种误差是由计算方法所引起的. 因此,后两种误差将是数值计算方法的主要研究对象,讨论它们在计算过程中的传播和对计算结果的影响,并找出误差的界,对研究误差的渐近特性和改进算法的近似程度具有重大的实际意义.

二、误差与有效数字

1. 绝对误差与绝对误差限

设某一量的精确值为 x,其近似值为 x^*,则称

$$E(x^*)=x-x^*$$

为近似值 x^* 的**绝对误差**,简称**误差**.

当 $E(x^*)>0$ 时,称 x^* 为**弱近似值**或**亏近似值**;当 $E(x^*)<0$ 时,称 x^* 为**强近似值**或**盈近似值**.

一般地,某一量的精确值 x 是不知道的,因而 $E(x^*)$ 也无法求出,但往往可以估计出 $E(x^*)$ 的上界,即存在 $\eta>0$,使得

$$|E(x^*)|=|x-x^*|\leqslant\eta.$$

此时,称 η 为近似值 x^* 的**绝对误差限**,简称**误差限**或**精确度**. η 越小,表示近似值 x^* 的精确度越高. 显然有

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

有时也用

$$x=x^*\pm\eta$$

来表示近似值 x^* 的精确度或精确值 x 的所在范围. 绝对误差是有量纲的.

例如,用毫米刻度的直尺去测量一长度为 x 的物体,测得其近似值为 $x^*=84\,\mathrm{mm}$. 由于直尺以毫米为刻度,所以其误差不超过 0.5 mm,即

$$|x-84\,\mathrm{mm}|\leqslant 0.5\ \mathrm{mm}.$$

这样,虽然不能得出准确值 x 的长度是多少,但从这个不等式可以知道 x 的范围是

$$83.5\,\mathrm{mm} \leqslant x \leqslant 84.5\,\mathrm{mm}.$$

2. 相对误差与相对误差限

用绝对误差来刻画一个近似值的精确程度是有局限性的,在很多场合中它无法显示出近似值的准确程度. 例如,测量 100 m 和 10 m 两个长度,若它们的绝对误差都是 1 cm,显然前者的测量结果比后者的准确. 由此可见,决定一个量的近似值的精确度,除了要看绝对误差的大小外,还必须考虑该量本身的大小. 为此,引入相对误差的概念.

称绝对误差与精确值之比

$$E_r(x^*) = \frac{E(x^*)}{x} = \frac{x - x^*}{x}$$

为近似值 x^* 的**相对误差**. 在实际中,由于精确值 x 一般无法知道,因此往往取

$$E_r(x^*) = \frac{x - x^*}{x^*}$$

作为近似值 x^* 的相对误差.

类似于绝对误差的情况,若存在 $\delta > 0$,使得

$$|E_r(x^*)| = \left|\frac{x - x^*}{x^*}\right| \leqslant \delta,$$

则称 δ 为近似值 x^* 的**相对误差限**. 相对误差是无量纲的数,通常用百分比表示,称为**百分误差**.

根据上述定义可知,当 $|x - x^*| \leqslant 1$ cm 时,测量 100 m 物体时的相对误差为

$$|E_r(x^*)| = \frac{1}{10000} = 0.01\%,$$

测量 10 m 物体时的相对误差为

$$|E_r(x^*)| = \frac{1}{1000} = 0.1\%.$$

可见,前者的测量结果要比后者精确. 所以,在分析误差时,相对误差更能刻画误差的特性.

3. 有效数字

为了能给出一种数的表示法,使之既能表示其大小,又能表示其精确程度,需要引进有效数字的概念. 在实际计算中,当准确值 x 有很多位数时,我们常常按四舍五入的原则得到 x 的近似值 x^*. 例如,对无理数

$$\mathrm{e} = 2.718281828\cdots,$$

若按四舍五入原则分别取三位和六位小数,则得

$$\mathrm{e} \approx 2.72, \quad \mathrm{e} \approx 2.71828.$$

不管取几位小数得到的近似数,其绝对误差都不超过末位数的半个单位,即

$$|\mathrm{e} - 2.72| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2}, \quad |\mathrm{e} - 2.71828| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-5}.$$

下面我们将四舍五入抽象成数学语言,进而引进"有效数字"的概念.

若近似值 x^* 的绝对误差限是某一位的半个单位,就称其"准确"到这一位,且从该位直到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位,则称近似值 x^* 有 n 位**有效数字**.

引入有效数字的概念后,我们规定所写出的数都应该是有效数字,且在同一计算问题中,参加运算的数,都应该有相同的有效数字.

例如,358.467,0.00427511,8.000034,8.000034×10^3 的具有 5 位有效数字的近似值分别是 358.47,0.0042751,8.0000,8000.0.

注意,8.000034 的 5 位有效数字是 8.0000,而不是 8,因为 8 只有 1 位有效数字,前者精确到 0.0001,而后者仅精确到 1,两者相差是很大的. 显然,前者远较后者精确. 由此可见,有效数字尾部的零不能随意省去,以免损失精确度.

一般地,任何一个实数 x 经四舍五入后得到的近似值 x^* 都可写成如下标准形式:

$$x^* = \pm(\alpha_1\times10^{-1}+\alpha_2\times10^{-2}+\cdots+\alpha_n\times10^{-n})\times10^m, \tag{1.2.1}$$

其中 m 为整数,α_1 是 1 到 9 中的一个数字,$\alpha_2,\alpha_3,\cdots,\alpha_n$ 是 0 到 9 中的数字. 所以,当 x^* 的绝对误差限满足

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n} \tag{1.2.2}$$

时,则称 x^* 具有 n 位有效数字.

根据上述有效数字的定义,不难验证 e 的近似值 2.71828 具有 6 位有效数字. 事实上,

$$\begin{aligned}2.71828=(&2\times10^{-1}+7\times10^{-2}+1\times10^{-3}+8\times10^{-4}\\&+2\times10^{-5}+8\times10^{-6})\times10,\end{aligned}$$

这里 $m=1,n=6$. 因为

$$|\mathrm{e}-2.71828|=0.000001828\cdots<\frac{1}{2}\times10^{-5},$$

所以它具有 6 位有效数字.

有效数字不但给出了近似值的大小,而且还给出了它的绝对误差限. 例如,有效数字 3567.82,0.423×10^{-2},0.4230×10^{-2} 的绝对误差限分别为 $\frac{1}{2}\times10^{-2}$,$\frac{1}{2}\times10^{-5}$,$\frac{1}{2}\times10^{-6}$. 必须注意,在有效数字的记法中,0.423×10^{-2} 与 0.4230×10^{-2} 是有区别的,前者只有 3 位有效数字,而后者则具有 4 位有效数字.

还需指出的是,一个准确数字的有效数字的位数,应当说有无穷多位. 例如,不能说 $1/8=0.125$ 只有 3 位有效数字.

有效数字与绝对误差、相对误差有如下关系:

(1) 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

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