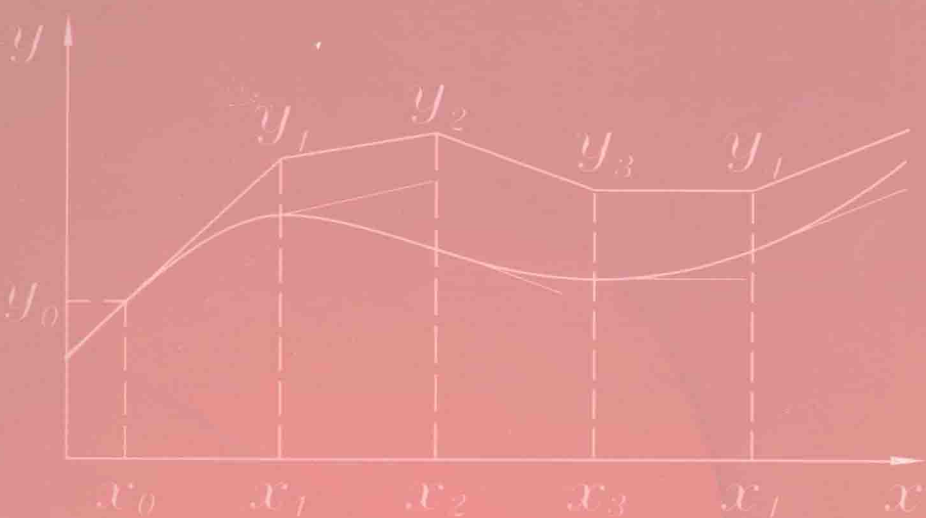
高等学校数学类规划教材



数值计算方法

主　编　张卫国
副主编　龙熙华　李占利

西安电子科技大学出版社
http://www.xduph.com

学类规划教材

数值计算方法

Numerical Computing Method

主　编　张卫国
副主编　龙熙华　李占利

西安电子科技大学出版社

内容简介

本书系统地介绍了科学与工程计算中常用的数值计算方法，主要内容包括数值计算与误差分析的基础知识、非线性方程的数值求解、方程组的迭代解法、线性方程组的直接解法、插值方法、曲线拟合与函数逼近、数值积分与数值微分、常微分方程的数值解法以及矩阵特征值的数值计算等。每章末均附有本章小结和一定数量的习题。

本书结构合理、层次清晰、逻辑严谨、取材精炼，同时注重数值计算方法思想的阐述，突出实用性，强调数值算法的实现与应用。

本书可作为高等学校本科理工类专业及硕士工科类专业计算方法或数值分析课程的教材或教学参考书，也可作为在职工程硕士科学与工程计算基础课程的教材或教学参考书，还可供从事科学与工程计算的科技人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/张卫国主编. —西安：西安电子科技大学出版社，2014.8
高等学校数学类规划教材
ISBN 978-7-5606-3457-9

Ⅰ. ① 数… Ⅱ. ① 张… 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(2014)第 168427 号

策划编辑 李惠萍
责任编辑 雷鸿俊 李惠萍
出版发行 西安电子科技大学出版社(西安市太白南路 2 号)
电　　话 (029)88242885 88201467 邮　　编 710071
网　　址 www.xduph.com 电子邮箱 xdupfxb001@163.com
经　　销 新华书店
印刷单位 陕西华沭印刷科技有限责任公司
版　　次 2014 年 8 月第 1 版 2014 年 8 月第 1 次印刷
开　　本 787 毫米×960 毫米 1/16 印张 15
字　　数 304 千字
印　　数 1～3000 册
定　　价 24.00 元
ISBN 978-7-5606-3457-9/O

XDUP 3749001-1

前　言

随着计算机技术的飞速发展及其在科技、工程、医学、国防、经济等领域的广泛应用，现代科学已呈现出理论科学、实验科学和计算科学三足鼎立的局面，掌握基本的数值计算方法已经成为理工科学生必备的技能之一。本书是在培养学生创新能力和动手能力要求的背景下，集几位多年从事数值计算方法课程教学的老师的经验与体会，合力编写而成的。

数值计算方法课程的宗旨是使学生了解数值计算方法的重要性及其主要内容，掌握基本数值算法并会用计算机实现；懂得构造算法、分析算法、选取算法、改进算法的数学理论，培养和提高独立处理数值计算问题的能力。本书在编写过程中注重数值计算方法思想的阐述；对数值计算公式的构造采用由浅入深、由一般到抽象的模式；分析数值算法的优缺点，以便为算法的选取提供依据；强调数值算法的实现与应用；追求概念准确、逻辑严谨、条理清晰、语言流畅。

本书共 9 章，分别介绍数值计算与误差分析的基础知识、非线性方程的数值求解、方程组的迭代解法、线性方程组的直接解法、插值方法、曲线拟合与函数逼近、数值积分与数值微分、常微分方程的数值解法以及矩阵特征值的数值计算等内容。每章末均附有本章小结和习题。讲授全书内容需 50～70 学时，实验需 16～20 学时。

本书由张卫国任主编，龙熙华、李占利任副主编。第 1、2、8 章由李占利编写，第 3、4、9 章由龙熙华编写，第 5、6、7 章由张卫国编写。

本书的出版得到了西安科技大学及西安电子科技大学出版社的大力支持，特别是责任编辑李惠萍和雷鸿俊为提高书稿质量付出了辛勤的劳动，在此一并表示诚挚的感谢。

限于编者水平和时间，书中难免有疏漏之处，恳请读者和专家批评指正。

编　者

2014 年 5 月

目　录

第1章 绪　　论

计算机科学的发展为科学计算提供了高速度和高精度的计算工具，使众多的学科都向定量化和精确化方向发展并产生了一系列计算性的学科分支，如计算物理学、计算化学、计算生物学、计算地质学、计算气象学、计算材料学等，数值计算方法则是它们之间的联系纽带和共性基础，是理论到实践的桥梁。由于计算机只能机械地执行人的指令，它本身不会主动地进行思维，也不可能发挥任何创造性，因此，用计算机解决实际问题的先决条件是给出解决问题的方法和步骤，数值计算方法就是研究如何利用计算机更好地解决各种数学问题。数值计算方法的任务是以从各种不同背景的实际问题经抽象而构建的数学模型为出发点，构造求解科学和工程各领域中所提出的数学问题的计算方法，研究算法的数学机理和复杂性，在计算机上设计和进行计算实验，分析这些数值实验的误差，并与相应的理论及可能的实验相对比和印证，因而也称作数值分析。如今，科学计算已经和两种传统的科学方法(即理论和实验)相并列，成为现代科学的第三种科学方法。在许多情况下，或者是理论模型复杂甚至理论尚未建立，或者是实验费用昂贵甚至不能进行实验，科学计算就成为解决问题的唯一或主要手段。科学计算极大地增强了人们从事科学研究的能力，加速了把科技转化为生产力的过程，深刻地改变着人类认识世界和改造世界的方法与途径，推动着当代科学和高新技术向纵深发展。数值计算方法是数学的一个分支，只是它不像纯数学那样仅研究数学本身的理论，而是把理论与计算紧密结合，着重研究用计算机解决数学问题的方法与理论。

1.1　数值计算及其特点

1.1.1　数值问题与数值计算

在科学与工程计算的实际中，尽管有些数学问题的求解有现成的公式解析法，理论上可以求出它们的准确解析解，如5次以下的多项式方程有公式解析法，计算定积分有牛顿-莱布尼兹公式解析法等，但绝大部分数学问题，或者就没有解析法可以求解，如5次以上的多项式方程就没有公式解析法，所有的超越方程更没有公式解析法，或者虽然有解析法，但其对问题求解并不适宜和难以实现，如当被积函数的原函数不能用初等函数表示时，就无法使用牛顿-莱布尼兹公式来计算定积分，而且即使原函数存在，在计算机上也无

法实现用解析法计算定积分。

能够在计算机上使用数值方法求解的数学问题称为数值问题。要利用计算机求解数学问题就必须把数学问题转化为数值问题。有些数学问题本身就是数值问题，可以直接用数值方法求解，如线性方程组；而有些数学问题必须离散化或截断极限过程转化为数值问题后，才能够用数值方法求解，如常微分方程或定积分。用数值方法求解数学问题有许多值得研究的方面，如：怎样把关于连续变量的问题化为离散变量的问题，这两种问题的解有多大差异；数值计算过程中的每一步对于数都不是做精确的运算，在大量进行近似运算之后又会产生怎样的结果，这些结果是否还有效；一个给定的数值问题可以用多种不同的数值方法给出近似解，这些数值方法所需的计算量和所得到的近似解的精确程度有何不同等。

在数学中，解析方法通常意味着通过方程的方法来解决问题，当然这个方程必须通过导数、微积分、微分方程或其他方法来给出它的解，而数值方法仅利用代数的方法(即加、减、乘、除运算和逻辑运算)就能得出问题的答案。由于这些运算恰恰是计算机所能做的，所以计算机和数值计算是密切相关的，可以说数值计算方法就是构造在计算机上可实现的算法的一个数学分支。

1.1.2　数值计算的特点

数值计算的主要特点如下：

(1) 理论上的精确运算与实际运算之间存在差异。

例如，某计算机系统具有 7 位有效数字，在计算几个量的和时，如果采用不同的运算次序，就会得到不同的结果。如取

$$A=10^{12},\ B=1,\ C=-10^{12}$$

则下面两个式子的结果不同，即

$$A+B+C=10^{12}+1+(-10^{12})=0$$

$$A+C+B=10^{12}+(-10^{12})+1=1$$

而在数学上 $A+B+C$ 与 $A+C+B$ 是等价的。

这是因为在数值计算中参加运算的数有时数量级相差很大，而计算机位数有限，会产生舍入误差，如不注意运算次序和避免两个相近的数相减，就可能出现大数“吃掉”小数的现象，影响计算结果的可靠性。

(2) 理论上的解题方案与实际能用性之间存在差异。

有些方法理论上可行，但在实际操作中会由于计算量和其他原因而无法真正实现，例如克莱姆法则可以用于求解线性方程组，但对于 20 个未知量的线性代数方程组，若用克莱姆法则来求解，使用每秒 12.5 万次乘除法的计算机计算，约需要 24 000 万年，即使用每秒 10 亿次乘除法的银河Ⅱ巨型计算机计算，也需要 3 万年。因此，对于求解规模较大的线性

方程组，理论上可行的克莱姆法则并不实用。即使有的看起来很简单的正确计算过程，如果不注意，也会导致无效的结果。例如，线性方程组

$$\begin{cases}0.000\ 01x_1+x_2=1\\2x_1+x_2=2\end{cases}$$

的准确解为

$$x_1=\frac{1.000\ 00}{1.999\ 99}=0.500\ 002\ 5$$

$$x_2=\frac{1.999\ 98}{1.999\ 99}=0.999\ 995$$

现在四位浮点数下用消去法求解，上述方程写成

$$\begin{cases}10^{-4}\times0.1000x_1+10^1\times0.1000x_2=10^1\times0.1000\\10^1\times0.2000x_1+10^1\times0.1000x_2=10^1\times0.2000\end{cases}$$

若用$\frac{1}{2}(10^{-4}\times0.1000)$除第一个方程减第二个方程，则出现很小的数作除数，得到

$$\begin{cases}10^{-4}\times0.1000x_1+10^1\times0.1000x_2=10^1\times0.1000\\10^6\times0.2000x_2=10^6\times0.2000\end{cases}$$

由此解出 $x_1=0$，$x_2=10^1\times0.1000=1$，显然严重失真。

若反过来用第二个方程消去第一个方程中含 x_1 的项，则避免了大数除以小数，得到

$$\begin{cases}10^1\times0.1000x_2=10^1\times0.1000\\10^1\times0.2000x_1+10^1\times0.1000x_2=10^1\times0.2000\end{cases}$$

由此求得相当好的近似解

$$x_1=0.5000，x_2=1.0000$$

(3) 尽管数值解是一种近似，但它可以达到需要的精度。

通常，解析方法给出的是在特定情形下可以赋值的函数解形式，这种函数解的特点和性质通常是明显的，数值结果则不同，但是数值解可以画出展示解的特点。数值解和解析解的最大区别就是数值解永远是一种近似。尽管数值解是一种近似，但它可以达到具体应用问题所需要的精度。为了达到高精度，必须执行非常多的单独运算，而由于计算机可以快速做到这一点，因此看似很多的运算并不是问题。解析解就自身而言并不一直是有意义的，如边长为 1 的正方形的对角线的长度是$\sqrt{2}$，$\sin30^\circ=\sqrt{3}/2$，方程 $x^3-x^2-3x+3=0$ 的一个实根是$\sqrt{3}$等，对解析方法而言这些结果已经足够了，但在实际使用中仍无法精确地获得这些结果的值，只能用近似值替代。常微分方程的解析解与数值解就明显地体现了这一区别。

1.2 误差分析

使用数值计算方法在计算机上求解各类问题得到的结果一般都是近似结果，因此需要对所得到的近似结果进行分析，用以判断所得计算结果的近似程度及其可用性和判断所使用的数值计算方法是否有效与可行。数值算法分析主要包括误差分析、稳定性分析、时间复杂性和空间复杂性分析等。本节介绍绝对误差、相对误差和有效数字等概念。

1.2.1 误差的来源

利用计算机对一个实际问题进行数值求解的过程可以概括为由实际问题建立数学模型、针对数学模型构造和选择数值计算方法、在计算机上实现数值计算求解这几个环节，而在这些环节中都会产生误差。

根据误差来源的不同，误差通常可分为以下四种类型：

(1) 模型误差。将实际问题用数学语言描述，建立一个合适的数学模型。但在将实际问题归纳和抽象为数学问题时，通常总要加上许多限制，并且要忽略一些次要因素，以便建立起一个理想化的数学模型。因此，这样得到的数学模型只是客观现状的一种近似描述，而这种描述一般会产生实际问题的真解与数学模型准确解之间的误差，称这种误差为**模型误差**。

(2) 观测误差。在数值方法的计算公式中，通常总会包括一些通过观测或实验得到的参数值，它们实际上是相关参数的近似值，其与参数的真值之间会有一定的差异，从而给计算带来一定的误差。这种观测的参数值与其真值之间的误差称为**观测误差**或**测量误差**。

(3) 截断误差。在构造数值计算方法时，由于许多数学运算(如微分、积分与无穷级数求和等)是通过极限过程来定义的，而实际上计算机只能完成有限次算术运算与逻辑运算，因此实际应用时，还要将解题过程加工成算术运算与逻辑运算的有限序列，通常采用的手段是将无限过程截断为有限过程或者将连续问题转化为离散问题。例如，用数值积分公式计算定积分，实际上是去掉了和式的取极限过程，用有限的部分和作为定积分(极限)的近似。又如，用差商值近似导数值是将连续问题的计算转化为离散问题的计算(其本质依然是截断了极限过程)。这种在构造数值计算方法时因无穷过程的截断而产生的误差称为**截断误差**，又称为**方法误差**或**余项**。

(4) 舍入误差。在数值运算时，由于计算机的字长有限，原始数据在计算机中只能表示为数据真实值的近似值，由此产生了误差，而且计算过程中也可能产生误差，这种误差称为**舍入误差**。例如，在计算中用 3.141 59 近似表示 π，就会产生舍入误差：

$$R=\pi-3.141\,59=0.000\,002\,6\cdots$$

在数值计算的误差分析中，不讨论模型误差，只研究截断误差和舍入误差，观测误差

看做初始数据的舍入误差处理，同时也从整体来讨论舍入误差的影响。截断误差会影响数值算法的收敛性，而舍入误差会影响数值算法的稳定性。针对不同的数值算法，误差估计的侧重点也不同。例如，在线性方程组的数值算法中，主要讨论输入数据的误差和舍入误差的传播；而在数值积分中，重点分析各种方法的截断误差。

1.2.2 绝对误差与相对误差

1. 绝对误差

定义 1－1 设 x^* 为准确值，x 为 x^* 的一个近似值，称 $e^*=x-x^*$ 为近似值 x 的绝对误差，或简称误差。

通常由于准确值 x^* 是未知的，所以绝对误差也无法确定。但一般可以通过某种手段估计出误差绝对值的一个上界 ε，称其为近似值 x 的绝对误差限，即有

$$|e^*|=|x-x^*|\leqslant\varepsilon$$

一个近似值的误差限不唯一，通常取满足 $|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^n$ 的最小值。

例如，用毫米刻度的米尺测量出物体长度的误差限 ε 可估计为 0.5 mm。

通常也把绝对误差限 ε 简称为绝对误差。有了绝对误差限以后，显然准确值 x^* 的范围为

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

但是，绝对误差的大小还不能完全反映近似值的准确程度。例如，测量出 8 km 的长度误差限是 0.5 cm，测量出 8 m 的长度误差限也是 0.5 cm，显然前者的近似程度要远远好于后者。这表明刻划近似值的准确程度，除了考虑误差限外，还应考虑准确值的大小。

2. 相对误差

定义 1－2 称比值

$$\frac{e^*}{x^*}=\frac{x-x^*}{x^*}$$

为近似值 x 的相对误差，其绝对值的上界称为近似值 x 的相对误差限，用 δ 表示。

由于 x^* 一般未知，实际使用中以 x 代替 x^* 来估计相对误差限 δ，即

$$\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\approx\frac{|x-x^*|}{|x|}\leqslant\delta$$

于是绝对误差限 ε 与相对误差限 δ 有如下关系：

$$\delta=\left|\frac{\varepsilon}{x}\right|$$

例 1－1 设函数 $y=f(x)$ 在 x^* 附近可导，x 是 x^* 的一个近似值。若要用 $f(x)\approx f(x^*)$，试推导出近似函数值 $f(x)$ 的误差估计式。

解 由微分中值定理，有

$$f(x)-f(x^*)=f'(\xi)(x-x^*)$$

若记 $|x-x^*|\leqslant\varepsilon_x$，且设 $f'(\xi)$变化不大，则有

$$\varepsilon_f = |f(x)-f(x^*)| \approx |f'(x)|\,|x-x^*| \leqslant |f'(x)|\varepsilon_x \tag{1-1}$$

据此又可得

$$\delta_f = \left|\frac{\varepsilon_f}{f(x)}\right| \leqslant \left|\frac{f'(x)}{f(x)}\right|\varepsilon_x \tag{1-2}$$

对于多元函数 $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$，若 $x_1, x_2, \cdots, x_n$是 $x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*$ 的近似值，由于

$$|f(x_1, x_2, \cdots, x_n)-f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)| \approx \left|\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial f(x_1, x_2, \cdots, x_n)}{\partial x_k}(x_k-x_k^*)\right|$$

则由多元函数值得误差估计式

$$\varepsilon_f \approx \sum_{k=1}^{n}\left|\frac{\partial f(x_1, x_2, \cdots, x_n)}{\partial x_k}\right|\varepsilon_k \qquad (|x_k-x_k^*|\leqslant\varepsilon_k) \tag{1-3}$$

例 1-2 设 $x_1\approx6.1065$，$x_2\approx80.115$ 均有 5 位有效数字。若用其计算 x_1x_2，试估计计算结果的绝对误差。

解 设 $z=f(x_1, x_2)=x_1x_2$，由题设知 $\varepsilon_{x_1}=\frac{1}{2}\times10^{-4}$，$\varepsilon_{x_2}=\frac{1}{2}\times10^{-3}$，于是由公式(1-3)有

$$\begin{aligned}\varepsilon_f &\approx |x_2\varepsilon_{x_1}+x_1\varepsilon_{x_2}| \leqslant |x_2\varepsilon_{x_1}|+|x_1\varepsilon_{x_2}|\\ &=80.115\times\frac{1}{2}\times10^{-4}+6.1065\times\frac{1}{2}\times10^{-3}\\ &=7.057\times10^{-3}\end{aligned}$$

1.2.3 有效数字

要把一个位数很多的数表示成一定位数的近似值，常按四舍五入的原则，例如：

$$\pi=3.141\,592\,65\cdots$$

取 3 位近似，

$$x_3=3.14,\quad |\pi-x_3|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-2}$$

取 5 位近似，

$$x_5=3.1416,\quad |\pi-x_5|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4}$$

在这里，从四舍五入的原则出发考虑，它们的误差限都是用自身的末位数字的半个单位来表示的，即 $\varepsilon_3=\frac{1}{2}\times10^{-2}$，$\varepsilon_5=\frac{1}{2}\times10^{-4}$。如果我们约定近似值的误差限仅用某一位上的半个单位来表示，则有下述定义。

定义 1-3 若近似值 x 的误差限是其某一数位的半个单位，而由该数位到 x 的第一个非零数字共有 n 位，就称近似值 x 有 n 位有效数字。

如前述 x_3 具有 3 位有效数字，x_5 具有 5 位有效数字。又如，对 0.020 300 3，若其近似值写成 0.0203，则表示其具有 3 位有效数字；若其近似值写成 0.020 300，则表示其具有 5 位有效数字。前者隐喻其绝对误差不超过 $\frac{1}{2}\times10^{-4}$，而后者隐喻其绝对误差不超过 $\frac{1}{2}\times10^{-6}$。

显然，一个近似值的有效数字位数越多，其准确程度越好。精确值认为有无穷位有效数字。通常在书写一个近似值时，可以有两种方式：

一是注明该近似值 x 的绝对误差 ε，即将近似值写成 $x\pm\varepsilon$。

二是在不注明该近似值的绝对误差时，默认该近似值准确到其末位数字，隐含着近似值的绝对误差限是该末位数字所在数位的半个单位。

例 1-3 求 $\sqrt{101}/2$ 的近似值。若要使得计算结果的相对误差限为 0.01%，则至少要取几位有效数字？

解 设计算结果应取 n 位有效数字，由于 $\sqrt{101}/2$ 的第一位非零数字是 5，因此计算结果的绝对误差是 $\frac{1}{2}\times10^{-(n-1)}$。于是相对误差为

$$\frac{\frac{1}{2}\times10^{-(n-1)}}{\frac{\sqrt{101}}{2}}<\frac{10^{-(n-1)}}{\sqrt{100}}=10^{-n}\leqslant10^{-4}$$

所以 $n\geqslant4$，即要满足给定相对误差的要求，计算结果至少要取 4 位有效数字。

例 1-4 取 $\sqrt{101}$ 的 7 位有效数字近似值 $x=10.049\,88$。计算 $10-\sqrt{101}$，则其计算结果的有效数字是几位？如果按 $10-\sqrt{101}$ 的等价式子 $\frac{-1}{10+\sqrt{101}}$ 计算，则所得结果的有效数字是几位？

解 设 $x^*=\sqrt{101}$，x 是其具有 7 位有效数字的近似值，则 $\varepsilon_x=\frac{1}{2}\times10^{-5}$。又由函数值的误差估计式(1-1)知，$\varepsilon_f=|f(x)-f(x^*)|\leqslant|f'(x)|\varepsilon_x$。

(1) 设 $f(x)=10-x$，则

$$\varepsilon_f\leqslant\varepsilon_x=\frac{1}{2}\times10^{-5}$$

由于 $10-\sqrt{101}=-0.050\,11\cdots$，所以其计算结果至少有 4 位有效数字。

(2) 设 $f(x)=\frac{1}{10+x}$，则

$$\varepsilon_f\leqslant\frac{1}{(10+x)^2}\varepsilon_x<\frac{1}{(10+10)^2}\varepsilon_x=\frac{1}{8}\times10^{-7}$$

由此可知，$\frac{-1}{10+\sqrt{101}}$ 的计算结果至少有 6 位有效数字。