吕同富 康兆敏 方秀男 编著

数值计算方法

（第2版）

清华大学出版社

数值计算方法

（第2版）

吕同富 康兆敏 方秀男 编著

清华大学出版社

内 容 简 介

本本书介绍了数值计算方法. 内容涉及数值计算方法的数学基础，数值计算方法在工程、科学和数学问题中的应用以及MATLAB程序，涵盖了经典数值分析的全部内容：包括非线性方程的数值解法；线性方程组的数值解法；矩阵特征值与特征向量的数值算法；插值方法；函数最佳逼近；数值积分；数值微分；常微分方程数值解法等. 基于MATLAB是本书的特色，对书中所有的数值方法都给出了MATLAB程序，有大量翔实的应用实例可供参考，有相当数量的习题可供练习.

本书可作为理工科本科生、研究生数值计算方法课程教材或参考书，也可作为科技人员使用数值计算方法和MATLAB的参考手册.

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/吕同富，康兆敏，方秀男编著. --2版. --北京：清华大学出版社，2013
ISBN 978-7-302-32699-1

Ⅰ.①数… Ⅱ.①吕… ②康… ③方… Ⅲ.①数值计算－计算方法 Ⅳ.①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 125551 号

责任编辑：佟丽霞
封面设计：常雪影
责任校对：刘玉霞
责任印制：沈　露

出版发行：清华大学出版社
网　　址：http://www.tup.com.cn，http://www.wqbook.com
地　　址：北京清华大学学研大厦 A 座　　邮　　编：100084
社 总 机：010-62770175　　邮　　购：010-62786544
投稿与读者服务：010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn
质量反馈：010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn
印 刷 者：三河市君旺印装厂
装 订 者：三河市新茂装订有限公司
经　　销：全国新华书店
开　　本：185mm×230mm　　印　　张：22　　字　　数：500 千字
版　　次：2008 年 10 月第 1 版　2013 年 8 月第 2 版　　印　　次：2013 年 8 月第 1 次印刷
印　　数：1~3000
定　　价：42.00 元

产品编号：052116-01

序

在全国大学生数学建模的活动中，我认识了吕同富老师. 在多次交往中，我发现吕老师是个非常勤奋的人，闲暇时，他总是在编辑自己的图书. 去年4月，他送我一本他的书《数值计算方法》，我翻翻目录，内容正是学生实践活动中对建立的数学模型需要应用数值方法和数学软件，尤其MATLAB进行验证时所需要的，正好成为我带领学生们学习其中的内容并利用这些知识解决实际问题的教材和参考书. 通过使用，我和研究生们对这本书有共同的印象：不仅内容翔实、全面，而且实用；既有数学理论的抽象性和严谨性，又有实用性和实验性的技术特征，是一本理论性和实践性都很强的书籍. 去年9月，他给我这本书的第2版电子版本，希望我看后能为本书写序. 坦率地说我很犹豫，这本书，尽管我们使用起来非常好，但我毕竟不是这方面的专家，序写得不好会给本书带来不好的影响，所以一直拖着. 但我无论如何也无法拒绝吕老师的请求，相反我很想为他和他的书叫好. 一个在高校很有影响的教授，放弃休息时间，执着地著书立说、传播知识，对这样一位教授的请求，似乎谁也没有理由拒绝！

我是从事偏微分方程理论研究的，由于近十年参加数学建模的培训、指导，越来越喜欢数学建模，逐步地将数学建模与自己的科学研究结合起来，越来越感到科学研究仅有纯粹的理论研究部分是不够的，完成理论分析后必须进行数值计算和模拟，这样才算是一个完整的研究过程。实际上，现代科学都在走向定量化和精确化，并形成了一系列计算性的学科分支，如计算物理、计算化学、计算生物学、计算地质学、计算气象学和计算材料学等. 计算能力是计算工具和计算方法的效率的乘积，提高计算方法的效率与提高计算机硬件的效率同样重要. 数值计算方法是一种研究和求解数学问题数值近似解的方法，是在计算机上使用的解数学问题的方法. 在科学研究和工程技术中要用到各种计算方法. 例如：在航空航天、地质勘探、汽车制造、桥梁设计、天气预报和汉字字样设计等都有数值计算方法的应用，科学计算已用到科学技术和社会生活的各个领域中. 如今，随着计算机技术的迅速发展和普及，数值计算方法课程已经成为所有理工科和经济管理学科学生的必修课程.

随着计算机的不断发展和进步，优秀的数学软件MATLAB应运而生，MATLAB一问世就以它强大的功能，被广大科技工作者公认为科学计算最好的软件之一. 为使数值计算方法与计算机更好地结合，吕同富教授编写了《数值计算方法》. 一年来，我带领研究生们应用本书，发现这本书与国内外同类教材相比有以下特点：

(1)内容相对系统完整而简捷，精练的论述几乎涵盖了经典数值分析的全部内容：包括非线性方程的数值解法；线性方程组的数值解法；矩阵特征值与特征向量的数值算法；插值方法；函数逼近；数值积分；数值微分；常微分方程数值解等.

(2)本书重点讲述了数值计算方法的思想和原理，尽可能避免了过深的数学理论和过于繁杂

的算法细节的描述，便于理解、阅读与应用.

(3)本书对所有经典的数值计算方法都给出了 MATLAB 程序，这在国内外同类教材中是少见的，也是本书的亮点. 这不仅有助于读者利用 MATLAB 的超强功能解决科学计算问题，更有助于避免那种学过数值计算方法但不能上机解决实际问题的现象发生.

以上就是我对吕老师的看法以及我和同学们对本书的看法，姑且当作本书第 2 版的序，相信同仁们看了用了本书后一定赞成我的观点.

谭忠

厦门大学

2013 年 6 月

前　言

从 2008 年《数值计算方法》出版以来，得到了很多老师的关注，收到了很多读者的 E-mail，给了很多的肯定和鼓励，同时也对书中的内容、体系、讲法等方面提出了很多宝贵的修改意见，借此再版之机，向关心和支持作者工作的广大读者朋友表示深切谢意．此次再版，根据广大读者的建议，对原《数值计算方法》的内容作了适当的增删，在保持原《数值计算方法》特色的前提下，对体例、格式、叙述、内容等方面作了较大的修改，力求使原《数值计算方法》的优点得到发展，缺点得到克服．书中很多章节和例题都重写了，修改后的内容更符合现代《数值计算方法》教学改革实际，既便于教学，又有利于培养学生解决实际问题的能力．此次再版包括：非线性方程的数值解法；线性方程组的数值解法；矩阵特征值与特征向量的数值算法；插值方法；函数最佳逼近；数值积分；数值微分；常微分方程数值解等内容．由于课时体系等原因，删除了一些过时的内容，还有对部分过难的例题和习题作了修改和替换，新增了数字教学资源电子教案 (PPT 版由方秀男制作，PDF 版由吕同富制作)，MATLAB 实验等内容供师生参考 (相关数字教学资源可到清华大学出版社网站上下载，也可以给作者发 E-mail 索取)．本次再版由吕同富教授执笔．另外还有康兆敏副教授、方秀男副教授编写了部分内容及习题和答案．全书由吕同富教授统稿．清华大学出版社佟丽霞编辑，几年来自始至终给作者以支持和鼓励，这次再版又认真编辑审校了书稿，纠正了书中的很多不妥和疏漏．厦门大学谭忠教授百忙之中抽出时间为本书作序推荐．这里向他们及本书所列参考文献的作者们，以及为本书再版给予热心支持和帮助的朋友们，表示衷心的感谢．

本书可作为理工科本科生、研究生数值计算方法课程教材或参考书，也可作为科技人员使用数值计算方法和 MATLAB 的参考手册．

吕同富

ltongfu@126.com

2013 年 7 月

第 1 版前言

数值计算方法与计算机相结合是本书的特点，也是科学计算发展的需要．随着计算机的不断发展和进步，优秀的数学软件 MATLAB 应运而生，MATLAB 一问世就以它强大的功能，被广大科技工作者公认为科学计算最好的软件之一．为使数值分析与 MATLAB 更好地结合，我们以最新版 MATLAB 为平台，编写了新版《数值计算方法》，这也是数值计算方法教材发展进步的必然结果．

本书介绍了数值计算方法．内容涉及数值计算方法的数学基础、数值计算方法在工程、科学和数学问题中的应用以及 MATLAB 程序等，涵盖了经典数值分析的全部内容：非线性方程的数值解法；线性方程组的数值解法；矩阵特征值与特征向量的数值算法；插值方法；函数逼近；数值积分；数值微分；常微分方程数值解等．重点讲述数值分析方法的思想和原理，尽可能避免过深的数学理论和过于繁杂的算法细节．基于 MATLAB 是本书的特色．数值计算方法与科学计算软件 MATLAB 相结合，有助于读者更有效地利用 MATLAB 的超强功能，来处理科学计算问题，有助于避免那种学过数值计算方法但不能上机解决实际问题的现象发生．

在编写过程中，参考了国内已出版的同类教材 (参考文献 [1 ～ 25])，吸收了他们的许多精华和优点，在题材的选取上作了一些变动，适当地增加了一些新内容，对书中所有的数值方法都给出了 MATLAB 程序，有大量翔实的应用实例可供参考，有相当数量的习题可供练习．

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．

全书内容由吕同富教授主持编写．具体分工：方秀男编写第 1 章和第 2 章；康兆敏编写第 3 章；吕同富编写第 4 章至第 9 章．吉林大学周蕴时教授、哈尔滨工业大学吴勃英教授认真地阅读了本书，纠正了书中很多错误，并提出了许多宝贵的修改意见；吉林大学马富明教授审定了书稿．这里向他们及本书所列参考文献的作者们，清华大学出版社的佟丽霞和王海燕，以及为本书出版给予热心支持和帮助的朋友们，表示衷心的感谢．

本书可作为理工科本科生研究生数值计算方法课程教材或参考书，也可作为科技人员使用数值计算方法和 MATLAB 的参考手册．

出好书，使千百万莘莘学子受益，一直是作者追求的目标．但由于水平所限，尽管作了很大努力，可能还会有很多不妥甚至是错误，望广大读者给予批评指正，谢谢．

吕同富
2008 年 3 月

目　录

第1章 绪 论

学习目标与要求

1. 了解科学计算的一般过程.
2. 了解数值计算方法的研究内容和特点.
3. 理解数值计算误差的有关概念.
4. 掌握数值计算误差的控制方法.

1.1 科学计算的一般过程

科学计算是人类从事科学研究和工程技术活动不可缺少的手段之一，在科学计算与计算机飞速发展的今天，为使计算机能更好地应用于科学研究和工程技术领域，必须按照下面的步骤进行：实际问题 → 数学模型 → 数值方法 → 程序设计 → 上机计算 → 分析结果.

1.1.1 对实际工程问题进行数学建模

应用有关学科知识和数学理论，将实际工程问题，用精练准确的数学语言对其核心部分进行描述并给出数学模型，这一过程常称为数学建模. 一个好的数学模型须符合以下两方面要求：一是数学模型要能真实而准确地反映实际工程问题的本质；二是数学模型所用的数学算法能在计算机上实现，这两者缺一不可. 工程中的数学模型，按数学性质，可分为确定型与随机型；按表达形式，可分为连续型与离散型. 这些数学模型，有的能用确定的数学解析式描述，有的不能用确定的数学解析式描述，数值计算方法，主要讨论能用确定的数学解析式描述的实际工程计算问题.

1.1.2 对数学问题给出数值计算方法

计算机无论如何先进，它所能执行的计算也不过是简单的算术运算和逻辑运算，要想使计算机能够解决科学和工程计算问题，需把从科学和工程实际问题中建立的数学模型数值化，也就是根据不同的数学问题，寻求不同的数值计算方法. 数值计算方法只能用算术运算和逻辑运算，否则计算机将无法计算，这将直接关系到能否把计算机用于实际问题. 可见，数值计算方法在现代科学研究和工程技术计算中具有重要地位. 数值计算方法的优劣，显然速度和精度是两个重要的指标，一个好的数值计算方法不仅精度高而且速度快. 速度快，尽管就适当规模的问题而言，这一优势因计算机的能力而被削弱殆尽，但对于规模大的问题，速度仍是重要的因

素，慢的数值计算方法由于不实用而被淘汰.

1.1.3 对数值计算方法进行程序设计

一个好的数值计算方法要通过程序设计才能在计算机上实现. 程序设计要求用最简练的计算机语言、最快的速度、最少的存储空间来实现某种要求的计算结果. 要达到这样的要求，程序设计者不仅要掌握数值计算方法，而且要熟悉并能熟练使用计算机语言，准确无误地描述每一个算法，并能以最快的速度发现和解决计算过程中出现的各种问题.

1.1.4 上机计算并分析结果

前面三个阶段工作的结果如何？还需上机实验后才能得出结论. 上机计算的结果是否与工程实际相符合？所做研究是否具有推广价值？都是必须关注的问题. 若与工程实际不相符合，则需找出原因，回到前面三个阶段，继续研究，直到得出正确结论为止.

1.2 数值计算方法的研究内容与特点

1.2.1 数值计算方法的研究内容

科学技术发展到今天，计算机的应用已渗透到社会生活的各个领域. 而数值计算方法是计算机处理实际问题的一种重要手段，从宏观天体运动学到微观分子细胞学，从工程系统到非工程系统，无一能离开数值计算方法. 数值计算方法这门学科的诞生，使科学发展产生了巨大飞跃，它使各学科领域从定性分析阶段走向定量分析阶段，从粗糙走向精密.

数值计算方法是数学的一个分支，它以计算机为工具，以数值代数 (线性方程组、矩阵特征值特征向量、非线性方程与方程组的数值解法)，数值逼近 (各种函数逼近问题数值解、数值积分、数值微分)，常微分方程数值解，偏微分方程数值解、最优化理论与方法等为研究内容.

1.2.2 数值计算方法的特点

先来看几个实例.

例 1.1 线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的行列式解法 Cramer 法则，理论上可用来求解线性方程组，用这种方法解一个 n 元线性方程组，要计算 $n+1$ 个 n 阶行列式的值，按 Laplace 展开法计算 n 阶行列式，总共要计算

$$n!\left(1+\frac{1}{2!}+\frac{1}{3!}+\cdots+\frac{1}{(n-1)!}\right)$$

次乘法，不计加法，解一个 n 元线性方程组，需计算 $n!(n+1)$ 次乘法. 当 n 充分大时，计算量是很大的，如一个 20 元的线性方程组，大约要算 $21!\approx 5.1\times 10^{19}$ 次以上的乘法，每秒可做百万次乘法的计算机，每年可做 $365\times 24\times 3\,600\times 10^{6}\approx 3.15\times 10^{13}$ 次乘法，所以，在每秒可做上百万次乘法的计算机上，用 Cramer 法则解 20 元的线性方程组，所需的计算时间是 $(5.11\times 10^{19})\div(3.15\times 10^{13})=1.62\times 10^{6}\approx 162$ 万年，这当然是没有实际意义的. 其实解线性方程组有很多方法，如 Gauss 消去法，一个 20 元的线性方程组乘法次数不超过 3 000 次，即使

用一台微型计算机，只需几秒钟就能完成计算，这个例子说明研究数值计算方法很有必要，因为数值计算方法所研究的正是在计算效率上最佳的或近似最佳的方法，而不是像 Cramer 法则这样的方法.

例 1.2 计算积分 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x$.

解 通过直接计算可产生递推公式

$$I_n = -5I_{n-1} + \frac{1}{n}, I_0 = \ln\frac{6}{5} \approx 0.182\,322. \tag{1.1}$$

由经典积分知识可推得 I_n 具有如下性质：

(1) $I_n > 0$;

(2) I_n 单调递减；

(3) $\lim\limits_{n\to\infty} I_n = 0$;

(4) $\frac{1}{6n} < I_n < \frac{1}{5n}(n > 1)$.

下面用两种算法计算 I_n.

算法 A：递推关系，$I_n = -5I_{n-1} + \frac{1}{n}, I_0 = \ln\frac{6}{5} \approx 0.182\,322$.

MATLAB 程序 1.1 计算定积分

```
x=0.182 322 2
for n=1:20      n     x=-5*x+1/n     end
```

按算法 A 自 $n = 1$ 计算到 $n = 20$ 产生如下计算结果 (见表1.1).

表 1.1 计算结果

n	I_n	n	I_n	n	I_n	n	I_n
1	0.088 4	6	0.034 4	11	−31.392 5	16	9.814 5e + 4
2	0.581 0	7	−0.029 0	12	157.045 7	17	−4.907 3e + 5
3	0.043 1	8	0.270 1	13	−785.151 6	18	2.453 6e + 6
4	0.347 0	9	−1.239 3	14	3.925 8e + 3	19	−1.226 8e + 7
5	0.026 5	10	0.296 7	15	−1.962 9e + 4	20	6.134 1e + 7

由表1.1可见，该算法产生的数值解自 $n = 7$ 开始出现负值，且绝对值逐渐增加，这显然与 I_n 固有的性质相矛盾，因此本算法所得的数值解不符合问题的要求.究其原因，在构造算法时未能充分考虑原积分模型的性态，即由式 (1.1)，其计算从 I_{n-1} 到 I_n 每向前推进一步，其计算值的舍入误差 (见 1.3 节内容)便增长 5 倍，误差由此积蓄传播导致最终数值解与原问题相悖的结果．为了克服这一缺点改进算法 A 为算法B：

算法 B：递推关系：$I_{n-1} = -\frac{1}{5}I_n + \frac{1}{5n}, I_{20} \approx \dfrac{\frac{1}{6\times 21} + \frac{1}{5\times 21}}{2} = 0.008\,730\,16$.