21世纪高等院校教材

现代数值计算方法

(MATLAB版)

马昌凤　林伟川　编著

科学出版社
www.sciencep.com

21世纪高等院校教材

现代数值计算方法
(MATLAB版)

马昌凤　林伟川　编著

福建师范大学教材建设基金资助

科学出版社
北京

内 容 简 介

本书阐述了现代数值计算的基本理论和方法，包括数值计算的基本概念、解线性方程组的迭代法和直接法、插值法与最小二乘拟合、数值积分和数值微分、常微分方程的数值解法、非线性方程的迭代解法以及矩阵特征值问题的计算等. 书中有丰富的例题、习题和上机实验题. 本书既注重计算方法的实用性，又注意保持理论分析的严谨性，强调数值方法的思想和原理在计算机上的实现. 选材恰当，系统性强，行文通俗流畅，具有较强的可读性.

本书的建议学时为 72 学时(其中含上机实验 12 学时). 适合作为信息与计算科学、数学与应用数学、计算机科学与技术以及统计学等专业本科生数值分析课程的教材或教学参考书，也可以作为其它理工科专业及工科研究生的数值分析参考用书.

图书在版编目(CIP)数据

现代数值计算方法：MATLAB 版/马昌凤，林伟川编著. —北京：科学出版社，2008

(21 世纪高等院校教材)

ISBN 978-7-03-022314-2

Ⅰ. 现… Ⅱ. ①马… ②林… Ⅲ. ①数值计算-计算方法-高等学校-教材 ②数值计算-应用软件，MATLAB-高等学校-教材 Ⅳ. O241 O245

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008) 第 086738 号

责任编辑：姚莉丽／责任校对：陈玉凤
责任印制：张克忠／封面设计：陈 敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

明辉印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2008 年 6 月第 一 版 开本：B5(720 × 1000)
2008 年 6 月第一次印刷 印张：15
印数：1—4 000 字数：282 000

定价：25.00 元(含光盘)

前 言

科学计算的兴起是 20 世纪最重要的科学进步之一. 随着计算机和计算方法的飞速发展, 科学计算已与科学理论和科学实验鼎立为现代科学的三大组成部分之一. 在各种科学和工程领域中逐步形成了计算性科学分支, 如计算物理、计算力学、计算化学、计算地震学等. 计算在生命科学、医学、系统科学、经济学以及社会科学中所起的作用也日益增大. 在气象、勘探、航空航天、交通运输、机械制造、水利建筑等许多重要工程领域中, 计算已经成为不可缺少的工具. 这些计算性的科学和工程领域, 又以计算方法作为其共性基础和联系纽带, 使得计算数学这一古老的数学科目成为现代数学中一个生机勃勃的分支, 它是数学科学中最直接与生活相联系的部分, 是理论到实际的桥梁.

计算方法也称为数值计算或数值分析, 其主要任务是构造求解科学和工程问题的计算方法, 研究算法的数学机理, 在计算机上设计和进行计算试验, 分析这些数值实验的误差, 并与相应的理论和可能的实验对比印证. 这就是数值计算方法研究的对象和任务.

本书各章节的主要算法都给出了 MATLAB 通用程序. 为了更好地配合本书的教学, 书后编写了两个附录. 附录一介绍了数值实验报告的格式和一些具体的数值实验题目及各个实验的目的要求; 附录二简明扼要地介绍了数学软件 MATLAB 的入门知识和必要的程序设计和绘图等基本技能技巧. 在使用本教材之前教师可先介绍这部分内容, 也可以安排学生在授课前自学这部分内容.

本书具有如下特点:

1. 讲述数值分析中最重要最基础的理论与方法, 它们是研究各种复杂的数值计算问题的基础和工具.

2. 全书根据给定算法采用当前最流行的数值分析软件 MATLAB 进行编程, 所给的各算法的通用程序都可以直接应用于实际计算. 所有程序都在计算机上经过调试和运行, 简洁而不乏准确.

3. 本书所给的每一通用程序之后都给出了相应的计算实例. 这不仅能帮助学生理解程序里所包含的数值分析理论知识, 而且对培养学生处理数值计算问题的能力也大有裨益.

4. 全书每章都配备了一定数量的习题, 习题分为理论分析题和上机实验题, 以加强学生对所学知识的理解和巩固.

本书建议学时为 72 学时 (其中含上机实验 12 学时). 如果讲授学时少于 60,

可对第 8 章内容进行适当取舍. 与本书配套出版的教学课件含 30 个 PDF 课件和教材中所列算法的全部 MATLAB 源程序, 可供学生和任课教师参考使用.

本书的编写和出版得到了福建师范大学教材建设基金资助项目和国家自然科学基金项目 (编号: 10661005) 的部分资助, 在此作者表示由衷的感谢. 由于编者水平有限, 缺点和错误在所难免, 恳请专家和读者批评指正.

编 者

2008 年 3 月于福州长安山

目 录

第 1 章　数值计算的基本概念

1.1　数值计算的研究对象和内容

数值计算是数学中关于计算的一门学问, 它研究如何借助于计算工具求得数学问题的数值解答. 这里的数学问题仅限于数值问题, 即给出一组数值型的数据 (通常是一些实数, 称为初始数据), 去求另一组数值型数据, 问题的本身反映了这两组数据之间的某种确定关系. 如函数的计算、方程的求根都是数值问题的典型例子.

数值计算的历史源远流长, 自有数学以来就有关于数值计算方面的研究. 古代巴比伦人在公元前 2000 年左右就有了关于二次方程求解的研究, 我国古代数学家刘徽利用割圆术求得圆周率的近似值, 而后祖冲之求得圆周率的高精度的值都是数值计算方面的杰出成就. 数值计算的理论与方法是在解决数值问题的长期实践过程中逐步形成和发展起来的. 但在电子计算机出现以前, 它的理论与方法发展十分缓慢, 甚至长期停滞不前. 由于受到计算工具的限制, 无法进行大量的复杂的计算.

科学技术的发展与进步提出了越来越多的复杂的数值计算问题, 这些问题的圆满解决已远非人工手算所能胜任, 必须依靠电子计算机快速准确的数据处理能力. 这种用计算机处理数值问题的方法, 称为科学计算. 今天, 科学计算的应用范围非常广泛, 天气预报、工程设计、流体计算、经济规划和预测以及国防尖端的一些科研项目, 如核武器的研制、导弹和火箭的发射等, 始终是科学计算最为活跃的领域.

现代数值计算的理论与方法是与计算机技术的发展与进步一脉相承的. 无论计算机在数据处理、信息加工等方面取得了多么辉煌的成就, 科学计算始终是计算机应用的一个重要方面, 而数值计算的理论与方法是计算机进行科学计算的依据. 它不但为科学计算提供了可靠的理论基础, 并且提供了大量行之有效的数值问题的算法.

由于计算机对数值计算这门学科的推动和影响, 使数值计算的重点转移到使用计算机编程算题的方面上来. 现代的数值计算理论与方法主要是面对计算机的. 研究与寻求适合在计算机上求解各种数值问题的算法是数值计算这门学科的主要内容.

1.2　数值算法的基本概念

粗略地说, 数值算法就是求解数值问题的计算步骤. 由一些基本运算及运算顺序的规定构成的一个 (数值) 问题完整的求解方案称为 (数值) 算法.

计算机的运算速度极高, 可以承担大运算量的工作, 这是否意味着人们可以对计算机上的算法随意选择呢?

我们知道, 在线性代数中, 克拉默法则原则上可用来求解线性方程组. 用这种方法求解一个 n 阶方程组, 要计算 $n+1$ 个 n 阶行列式的值, 这意味着总共需要做 $A_n = n!(n-1)(n+1)$ 次乘法. 当 n 充分大时, 这个计算量是相当惊人的. 譬如: 对于一个 20 阶的方程组, 大约需要做 $A_{20} \approx 10^{21}$ 次乘法, 现在假设这项计算用每秒十亿次 (10^9) 的计算机去做, 每年只能完成大约 $3.15 \times 10^{16}(365 \times 24 \times 3600 \times 10^9)$, 故所需时间约为 $10^{21} \div (3.15 \times 10^16) \approx 3.2 \times 10^4$ (年), 即大约需要三万二千年才能完成. 当然, 解线性方程组我们有许多实用的算法 (参看本书的后续章节). 这个简单的例子说明, 能否正确地制定算法是科学计算成败的关键.

计算机虽然是运算速度极高的现代化计算工具, 但它本质上仅能完成一系列具有一定位数的基本的算术运算和逻辑运算. 故而在进行数值计算时, 首先要将各种类型的数值问题转化为一系列计算机能够执行的基本运算.

通常的数值问题是在实数范围内提出的, 而计算机所能表示的数仅仅是有限位小数, 误差不可避免. 这些误差对计算结果的影响是需要考虑的. 如果给出一种算法, 在计算机上运行时, 误差在成千上万次的运算过程中得不到控制, 初始数据的误差, 由中间结果的舍入产生的误差, 这些误差在计算过程中的累计越来越大, 以致淹没了真值, 那么这样的计算结果将变得毫无意义. 相应地, 我们称这种算法是不可靠的, 或者数值不稳定的. 现在的计算机无论在运算速度上还是在存储能力上都是传统计算工具所无法比拟的. 但即使这样, 我们在设计算法时, 也必须对算法的运算次数和存储量大小给予足够的重视. 实际中存在大量这样的问题, 由于所提供的解决这些问题的算法的运算量大得惊人, 即使利用最尖端的计算机也无法在有效时间内求得问题的答案.

那么, 一个好的算法一般应该具备什么特征呢? (1) 必须结构简单, 易于计算机实现; (2) 理论上必须保证方法的收敛性和数值稳定性; (3) 计算效率必须要高, 即计算速度快且节省存储量; (4) 必须经过数值实验检验, 证明行之有效.

1.3　误差的基本理论

1.3.1　误差的来源

误差是描述数值计算中近似值精确程度的一个基本概念, 在数值计算中十分重要, 误差按来源可分为模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差四种.

1. 模型误差

数学模型通常是由实际问题抽象得到的, 一般带有误差. 这种误差称为模型误

差.

2. 观测误差

数学模型中包含的一些物理参数通常是通过观测和实验得到的, 难免带有误差, 这种误差称为观测误差.

3. 截断误差

求解数学模型所用的数值方法通常是一种近似方法, 这种因方法产生的误差称为截断误差或方法误差. 例如, 利用 $\ln(x+1)$ 的 Taylor 公式:

$$\ln(x+1) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4 + \cdots + (-1)^{n-1}\frac{1}{n}x^n + \cdots$$

实际计算时只能截取有限项代数和计算, 如取前 5 项有:

$$\ln 2 \approx 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5}.$$

这时产生误差 (记作 R_5)

$$R_5 = -\frac{1}{6} + \frac{1}{7} - \frac{1}{8} + \frac{1}{9} - \cdots.$$

4. 舍入误差

由于计算机只能对有限位数进行运算, 在运算中像 e, $\sqrt{2}$, 1/3 等都要按舍入原则保留有限位, 这时产生的误差称为舍入误差或计算误差. 关于舍入误差, 以后我们还要讨论.

在数值分析中, 我们总假定数学模型是准确的, 因而不考虑模型误差和观测误差, 主要研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响.

1.3.2 绝对误差和相对误差

1. 绝对误差

给一实数 x, 它的近似值为 x^*, $x^* - x$ 反映了近似值和精确值差异的大小, 因此称

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

为近似数 x^* 的绝对误差. 由于精确值往往是无法知道的, 因此近似数的绝对误差也无法得到, 但有时却能估计出 $\varepsilon(x)$ 的绝对值的一个上限. 如果存在一个正数 η, 使得

$$|\varepsilon(x)| \leqslant \eta,$$

则称 η 为 x^* 的绝对误差限 (或误差界). 此时

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

通常将上式简记为 $x^* = x \pm \eta$.

2. 相对误差

绝对误差通常不能完全反映近似数的精确程度, 它还依赖于此数本身的大小, 因此有必要引进相对误差的概念. 近似数 x^* 的相对误差定义为

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

由于 x 未知, 实际使用时总是将 x^* 的相对误差取为

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

和绝对误差的情况一样, 引进相对误差限 (或相对误差界) 的概念. 如果存在一个正数 δ, 使得

$$|\varepsilon_r(x)|\leqslant\delta,$$

则称 δ 为 x^* 的相对误差限.

根据上述定义可知, 当 $|x^*-x|\leqslant 1\ \mathrm{cm}$ 时, 测量 10 m 物体时的相对误差为

$$|\varepsilon_r(x)|\leqslant\frac{1}{1000}=0.1\%.$$

而测量 100 m 物体时的相对误差为

$$|\varepsilon_r(x)|\leqslant\frac{1}{10000}=0.01\%.$$

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

例 1.1　设 $x^*=4.32$ 是由精确值 x 经过四舍五入得到的近似值, 求 x^* 的绝对误差限和相对误差限.

解　由已知可得: $4.315\leqslant x<4.325$, 所以

$$-0.005\leqslant x-x^*<0.005.$$

因此, 绝对误差限为 $\eta=0.005$, 相对误差限为 $\delta=0.005\div 4.32\approx 0.12\%$.

3. 向量的误差

实际问题中给出的数据 (初始数据) 往往不是一个孤立的数, 有时给出的是一组相关联的实数 $x_1,x_2,\cdots,x_n$, 为了便于统一处理, 通常将它们看成 n 维欧氏空间 $\mathbf{R}^n$ 中的向量或点, 记为 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$. 设 x_i^* 是 $x_i(1\leqslant i\leqslant n)$ 的近似数, $x^*=(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)^{\mathrm{T}}$ 是 x 的近似向量, 反映这两组数据的整体误差可用 x^*-x 的欧氏范数

$$\|x^*-x\|=\left(\sum_{i=1}^{n}(x_i^*-x_i)^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

来表示, 它实际上是向量 x^* 与 x 在 $\mathbf{R}^n$ 上的欧氏距离. 用 $\|x^*-x\|$ 的值表示 x^* 的绝对误差, 类似地用 $\|x^*-x\|/\|x\|$ 表示 x^* 的相对误差. 容易发现, 当 $n=1$ 时, 就化成前述通常的单个数的误差了.

1.3.3 近似数的有效数字

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, 于是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, 我们通常按四舍五入得到 x 的近似值 x^*. 例如无理数

$$\pi = 3.1415926535897\cdots,$$

若按四舍五入原则分别取二位和四位小数时, 则得

$$\pi \approx 3.14, \quad \pi \approx 3.1416.$$

不管取几位得到的近似数, 其绝对误差不会超过末位数的半个单位, 即

$$|\pi - 3.14| \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{-2}, \quad |\pi - 3.1416| \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{-4}.$$

定义 1.1 设数 x^* 是数 x 的近似值, 如果 x^* 的绝对误差限是它的某一数位的半个单位, 并且从 x^* 左起第一个非零数字到该数位共有 n 位, 则称这 n 个数字为 x^* 的有效数字, 也称用 x^* 近似 x 时具有 n 位有效数字.

例 1.2 已知下列近似数

$$a = 24.1357, \quad b = -0.250, \quad c = 2, \quad d = 0.00016$$

的绝对误差限都是 0.0005, 问它们具有几位有效数字?

解 由于 0.0005 是小数点后第 3 数位的半个单位, 所以 a 有 5 位有效数字 2、4、1、3、5, b 有 3 位有效数字 2、5、0, c 有 1 位有效数字 2, d 没有有效数字.

一般地, 任何一个实数 x 经过四舍五入后得到的近似值 x^* 都可以写成如下标准形式

$$x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m. \tag{1.1}$$

所以, 当其绝对误差限满足

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{m-n}$$

时, 则称近似值 x^* 具有 n 位有效数字, 其中 m 为整数, a_1 是 1 到 9 中的某个数字, $a_2,\cdots,a_n$ 是 0 到 9 中的数字.

根据上述有效数字的定义, 不难验证 π 的近似值 3.1416 具有 5 位有效数字. 事实上, $3.1416=0.31416\times 10^1$, 这里 $m=1$, $n=5$, 由于

$$|\pi-3.1416|=0.0000073465\cdots<\frac{1}{2}\times 10^{-4},$$

所以它具有 5 位有效数字.

有效数字与绝对误差、相对误差有如下关系:

定理 1.1　(1) *若有数 x 的近似值 $x^*=\pm 0.a_1a_2\cdots a_n\times 10^m$ 有 n 位有效数字, 则此近似值 x^* 的绝对误差限为*

$$|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{m-n}. \tag{1.2}$$

(2) *若近似数 x^* 有 n 位有效数字, 则其相对误差限满足*

$$|\varepsilon_r(x)|\leqslant\frac{1}{2a_1}\times 10^{-(n-1)}. \tag{1.3}$$

反之, 若近似数 x^* 的相对误差限满足

$$|\varepsilon_r(x)|\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-(n-1)}, \tag{1.4}$$

则 x^* 至少有 n 位有效数字.

证明　(1) 结论显然.

(2) 由 (1.1) 式可知

$$a_1\times 10^{m-1}\leqslant|x^*|\leqslant(a_1+1)\times 10^{m-1},$$

故

$$|\varepsilon_r(x)|=\frac{|x^*-x|}{|x^*|}\leqslant\frac{\frac{1}{2}\times 10^{m-n}}{a_1\times 10^{m-1}}=\frac{1}{2a_1}\times 10^{-(n-1)}.$$

反之, 由

$$|x^*-x|=|x^*|\cdot|\varepsilon_r(x)|\leqslant(a_1+1)\times 10^{m-1}\cdot\frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-(n-1)}=\frac{1}{2}\times 10^{m-n}$$

知, x^* 至少有 n 位有效数字. □

由此可见, 当 m 一定时, n 越大 (即有效数字位数越多), 其绝对误差限越小.

例 1.3　*为使 $\sqrt{26}$ 的近似值的相对误差小于 0.1%, 问至少应取几位有效数字?*

解 $\sqrt{26}$ 的近似值的首位非零数字是 $a_1=5$. 假设应取 n 位有效数字, 则由 (1.3) 式有

$$|\varepsilon_r(x)|\leqslant\frac{1}{2\times5}\times10^{-(n-1)}<0.1\%,$$

解之得 $n>3$, 故取 $n=4$ 即可满足要求. 也就是说, 只要 $\sqrt{26}$ 的近似值具有 4 位有效数字, 就能保证 $\sqrt{26}\approx5.099$ 的相对误差小于 0.1%.

例 1.4 已知近似数 x^* 的相对误差界为 0.0002, 问 x^* 至少有几位有效数字?

解 由于 x^* 首位数未知, 但必有 $1\leqslant a_1\leqslant9$, 则由 (1.4) 式有

$$|\varepsilon_r(x)|\leqslant\frac{1}{2\times(a_1+1)}\times10^{-(n-1)}<0.0002,$$

得

$$10^{n-1}\geqslant\frac{1}{4\times(a_1+1)}\times10^4\geqslant\frac{1}{4\times(9+1)}\times10^4=\frac{1}{4}\times10^3,$$

解之得 $n\geqslant3.3979$, 故取 $n=4$.

1.4 数值算法设计的若干原则

为了减少舍入误差的影响, 设计算法时应遵循如下的一些原则.

1. 避免两个相近的数相减

如果 x^*, y^* 分别是 x, y 的近似值, 则 $z^*=x^*-y^*$ 是 $z=x-y$ 的近似值, 此时有

$$|\varepsilon_r(z)|=\frac{|z^*-z|}{|z^*|}\leqslant\left|\frac{x^*}{x^*-y^*}\right|\cdot|\varepsilon_r(x)|+\left|\frac{y^*}{x^*-y^*}\right|\cdot|\varepsilon_r(y)|,$$

可见, 当 x^* 与 y^* 很接近时, z^* 的相对误差有可能很大. 例如, 当 $x=5000$ 时, 计算

$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}$$

的值, 若取 4 位有效数字计算

$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\sqrt{5001}-\sqrt{5000}=71.72-71.71=0.01.$$

这个结果只有一位有效数字, 损失了三位有效数字, 从而绝对误差和相对误差都变得很大, 严重影响了计算精度. 但如果将公式改变为

$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}=\frac{1}{\sqrt{5001}+\sqrt{5000}}\approx0.006972.$$

它仍然有四位有效数字, 可见改变计算公式可以避免两个相近数相减而引起的有效数字的损失, 从而得到比较精确的计算结果.