研究生(非数学类)数学系列规划教材

应用计算方法教程

COMPUTATIONAL METHODS

张晓丹◎主编

机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

研究生（非数学类）数学系列规划教材

应用计算方法教程

主　编　张晓丹
副主编　郑连存　郑　权
参　编　丁　军　卫宏儒
主　审　李庆扬

机 械 工 业 出 版 社

本书是作者在多年为理工科硕士研究生讲授计算方法课程的基础上编写而成的。全书共分11章，内容包括：计算方法概论，数值计算理论基础，非线性方程求根，线性与非线性方程组的数值解法，矩阵特征值与特征向量的计算，插值与逼近，数值积分与微分，常微分方程初值问题与边值问题的数值解法。本书选编了较多不同层次的例题和习题供教师选择，并在各章引入数学软件 Matlab 的应用实例，以提高学生的学习兴趣和应用能力。对某些较深入的内容，本书以附录形式放在相应章节的后面，教师可以根据学时选讲或不讲，不影响整个体系。

本书内容丰富，阐述简明易懂，注重理论联系实际。可作为理工科大学非计算数学专业的研究生或高年级本科生的教材（适合 36 ~ 64 学时），也可作为科技工作者的参考书。

图书在版编目（CIP）数据

应用计算方法教程/张晓丹主编. —北京：机械工业出版社，2008.4
（研究生（非数学类）数学系列规划教材）
ISBN 978-7-111-23311-4

Ⅰ.应… Ⅱ.张… Ⅲ.计算方法-研究生-教材 Ⅳ.0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2008）第 005861 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：郑 丹 责任编辑：张继宏 责任校对：姚培新
封面设计：王伟光 责任印制：邓 博
北京京丰印刷厂印刷
2008年5月第1版·第1次印刷
169mm×239mm·11.125印张·432千字
标准书号：ISBN 978-7-111-23311-4
定价：30.00元

凡购本书，如有缺页、倒页、脱页，由本社发行部调换
销售服务热线电话：（010）68326294
购书热线电话：（010）88379639 88379641 88379643
编辑热线电话：（010）88379711

序

近年来，我国研究生教育有很大发展。随着国家经济建设的多方面需求和科学技术的飞速发展，高校研究生的数学课不仅规模上均有所扩大，而且在内容上也需要不同程度的更新。在加强基础课教学的同时，为了适应不同专业的发展，也需要开设一些新课程。数学教师们经过多年的教学实践，为适应研究生教育发展的新形势，在教学改革方面做了许多努力和尝试，包括在教学基础方面编写了不少研究生数学教材。这些教材的出版，对于进一步改进研究生数学教育，提高年轻教员的素质和加强各专业的数学知识和能力，无疑是十分有益的。

机械工业出版社多年来对高等学校的数学教育非常重视，在编译国内外数学教材等方面做了许多有益的工作。北京数学会和北京教学会数学研究会也十分关注研究生的数学教育和培养，在组织北京地区教师编写教材方面花了很大力气。北京地区高校资源丰富，联系密切，在教学改革和相互交流促进方面有好的基础和条件。另一方面，北京地区研究生人数多，专业面广，改进研究生数学教学的任务也十分重要和迫切。这次机械工业出版社和北京高教学会数学研究会联手，组织一批非数学专业的研究生教材，对于加强和改进研究生数学教育是一件十分有益的事情。我希望今后能把这项工作持续做下去，使研究生得到更好的数学教育，使数学成为他们的一种重要的工具和思考方式，在今后各种不同工作领域中发挥威力，产生出高水平和创新性的数学研究与应用成果。

冯克勤

2007 年 9 月于清华园

前　言

随着现代科学与计算机技术的迅猛发展，数值计算的原理及方法已在各学科得到越来越广泛的应用。掌握数值计算方法，提高科学计算能力已成为当今高层次人才综合素质中不可缺少的重要方面。近年来，越来越多的理工科大学将计算方法或数值分析作为高年级本科生的必修课或研究生的学位课。

本书是作者在多年为理工科硕士研究生讲授计算方法课程的基础上编写而成的。全书共分11章，内容包括：计算方法概论，数值计算理论基础，非线性方程求根，线性与非线性方程组的数值解法，矩阵特征值与特征向量的计算，插值与逼近，数值积分与微分，常微分方程初值问题与边值问题的数值解法。对某些问题或内容的深入探讨，本书以附录形式放在相应章节的后面。

本书从实用的角度介绍现代科学技术与工程计算中常用的数值方法和理论，着重讲清原理，突出算法的构造和分析，并对计算量、收敛性、稳定性、误差估计、适用范围等进行简要的论证和评述。同时，本书注重理论联系实际，应用Matlab软件作为基本计算工具，在每章最后一节介绍Matlab求解相关问题的常用函数及实际问题的求解范例。

本书内容丰富，翔实，例题充分，每章最后都有小结，并附有适当数量的习题，书后给出部分习题的参考答案。本书的使用对象为理工科大学非计算数学专业的研究生或高年级本科生，也可作为科技工作者的参考书。读者可以根据不同的学习对象和学习目的，适当选择章节进行学习（适合36~64学时）。编者提供如下不同方案供读者参考：

（1）初学者48学时

第1章（1.1~1.5）；第2章（2.2~2.3）；第3章（3.1~3.4，3.5(3.5.1)）；第4章(4.1~4.3)；第5章(5.1~5.2)；第7章(7.1~7.6)；第8章(8.1~8.4)；第9章(9.1~9.4，9.6)；第10章(10.1~10.6)。其中较长证明可省略。

36学时者可在上述内容的基础上根据需要适当删减。

（2）初学者64学时

在48学时内容的基础上，增加第4章(4.4)；第5章(5.3)；第6章(6.1~6.4)；第11章简介。

(3) 已学过36学时，再续学36学时

在复习学过内容的基础上，完成其余未学内容。

本书由张晓丹编写第1，2，3章；卫宏儒编写第4、5章；丁军编写第6、9章；郑权编写第7、8章；郑连存编写第10，11章；张晓丹负责全书的统稿。在本书的编写过程中，清华大学的李庆扬教授认真审阅了书稿，提出了许多宝贵的意见和建议，在此表示衷心的感谢。本书的写作得到了北京科技大学研究生院教材出版基金的资助。

由于作者的水平有限，本书的缺点错误在所难免，敬请读者批评指正。

编　者

目　录

第 1 章　计算方法概论

计算方法又称数值分析，是计算数学的一个重要组成部分，它主要研究来自科学和工程中数学问题的算法设计与相关理论。

本章首先介绍计算方法的意义、任务，其次介绍计算数学的一些基本概念，包括算法与效率、计算机中数的浮点运算、误差、问题的性态以及算法的数值稳定性等。上述概念将贯穿到本教程的全部内容中。

1.1　引言

1.1.1　计算方法的意义

计算机是 20 世纪科学发展的最大成就之一，它极大地扩展了数学的应用范围与能力，使得科学计算平行于理论分析和科学实验成为人类探索未知领域、研究现代科学技术的第三种手段。对于理论或实验方法难于完成的研究，计算机模拟可以大大增强对所研究问题的认识。数值天气预报是利用计算机成功进行科学计算的早期例子。天体物理学中，两个黑洞的碰撞过程，地学中的地壳运动等都难以进行实验，却可以用计算机根据数学模型，通过科学计算来模拟和求解，从而对各种理论进行检验。但是这方面的实践使人们几乎从一开始就认识到：科学计算的成败不仅与计算工具的先进性有关，而且与所用计算方法的效能密切相关，计算方法对于计算速度的提高与增强计算结果的准确性来说，与计算机硬件同等重要。这就导致了计算方法研究领域的空前活跃，并形成了一门以原来分散在数学各分支的计算方法为基础的新的数学分支——**计算数学**。一系列与计算数学相关的边缘学科，如计算力学、计算物理、计算电磁学、计算化学、计算生物、计算地质与计算经济学等，也都相继出现了。

1.1.2　计算方法的特点与任务

计算方法研究各种数学问题的数值求解，它不仅仅是一些数值方法的简单积累，而且包含不同方法设计与分析的相关理论。其特点既有较强的理论性与实用性，又有广泛的应用性与实践性，是一门与计算机密切结合的数学课程。

理论性体现在构造算法与分析算法需要坚实的数学理论：**逼近，离散化，迭代**是构造算法的三大要素。掌握扎实的数学理论，才能很好地设计计算法。此外，

对近似算法要保证收敛性和数值稳定性，还要对误差进行分析，这些都建立在相应数学理论的基础之上。

实用性体现在构造的算法要在计算机上实际可行。评价一个算法的优劣，不能只看它的理论是否完美，还要看它的计算效率与数值稳定性。例如，Cramer法则是求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$（其中方阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异）的著名方法，其理论结果很完美，但是这种方法的计算工作量太大，不适于计算机求解线性方程组。

一元二次方程 $ax^2+bx+c=0$ 的求根公式 $x_{1,2}=\dfrac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$ 是理论上很成熟的公式，但是在4位字长的计算机上求解方程 $x^2-(10^5+6)x+6\times10^5=0$，得到的结果为 $x_1=0.1000\times10^6$，$x_2=0$，带入验证，显然 x_2 结果是错误的。究其原因在于该公式数值不稳定。因此，构造算法一定要在计算机上切实可行。

广泛的应用性体现在各行各业对计算方法的需求。多数来自于科学、工程技术领域的数学问题往往得不到解析解，因此，要得到可靠的数值结果，就离不开计算数学。特别是来自天体物理、分子生物、集成电路设计和天气预报等领域的大规模复杂数学问题只能依赖于在高速计算机上的大型数值计算。

实践性体现在计算方法的学习方法上。一个数值方法是否有效，最终要通过大量的数值实验来检验。学习计算方法不能仅满足于会构造算法，更重要的是应用所学方法上机解决实际问题。因此学生要具备编程计算的能力。否则，再好的算法也只能是纸上谈兵。

计算方法内容广泛，包括函数的数值逼近、数值微分与数值积分、非线性方程与方程组的数值解法、数值代数、微分方程与微分方程组的数值解法，等等。

根据“计算方法”课程的特点，学习时我们首先要注意理解方法的数学背景、基本原理，掌握误差分析方法并注重与计算机的结合。本书要求学生会用目前流行的数学软件—Matlab，学生利用该软件可以很容易地实现各种算法。最后，为了掌握本书的内容，还应做一定数量的习题与数值实验。

1.2 算法与效率

1.2.1 算法

利用计算机解决实际问题，首先必须建立算法。算法按其构造原理，可分为**确定型算法**与**非确定型算法**；按其功能可分为**数值算法**与**非数值算法**；按面向的对象（串行计算机与并行计算机）可分为**串行算法**与**并行算法**。一般来讲，进行科学计算，需构造确定型数值算法。由于计算机只会做加、减、乘、除四则运算与逻辑运算，因此，一个**确定型数值算法**可定义为：**从给定的已知量出发，按**

指定的运算顺序，经过有限次的四则运算及逻辑运算，可求出给定问题的数值解的完整的计算步骤。

传统的计算方法是根据计算机的串行处理指令而研究的，因此称为串行算法。而新的面向并行处理计算机的数值方法，则称为并行算法。本书研究串行算法，并用 Matlab 语言描述算法。

例 1-1 设矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbf{R}^{m \times s}$，$\boldsymbol{B} \in \mathbf{R}^{s \times n}$，给出求 $\boldsymbol{AB}$ 的算法。

算法 1-1

```
% input   A∈R^(m×s),B∈R^(s×n)
% output   C = AB
for i = 1:m
      for j = 1:n
      C(i,j) = A(i,1:s) * B(1:s,j);
      end
end
disp(C)
```

例 1-2 给出计算多项式 $p(x) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$ 的一个算法。

算法 1-2

```
% input   x,n,a(1),a(2),…,a(n+1),这里 a(i) = a_(i-1),i = 1,…,n+1
% output   u = p(x)
    t = 1; u = a(1);
    for i = 1:n
    t = x * t; u = u + a(i+1) * t;
    end
disp(u)
```

有许多问题的解，不可能经过有限次四则运算求出。例如计算对数函数值、三角函数值，求非线性方程 $f(x) = 0$ 的根，求一般微分方程的解。这类问题常常采用近似替代的办法，即把它们转化成比较简单的、可用有限次运算求出近似解的问题。

例 1-3 给出计算 ln1.7 的一个算法。

解 $\ln x$ 在 $x_0 = 1$ 的幂级数展开为

$$\ln x = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k}(x-1)^k, \ 0 < x \leqslant 2$$

从而

$$\ln 1.7 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k}(0.7)^k$$

令 $P_n(x)=\sum_{k=1}^{n}\frac{(-1)^{k+1}}{k}(x-1)^k$，我们希望对误差限 Tol 确定 n，使近似值 $P_n(1.7)$ 满足

$$|\ln 1.7-P_n(1.7)|<Tol$$

由级数理论，交错级数 $\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k+1}}{k}(0.7)^k=\sum_{k=1}^{\infty}a_k$ 的余项满足

$$|\ln 1.7-P_n(1.7)|<|a_{n+1}|$$

当 $|a_{n+1}|<Tol$ 时，有 $|\ln 1.7-P_n(1.7)|<Tol$。基于上述讨论，给出如下算法：

算法 1-3

```
% input 自变量 x = 1.7, 误差限 Tol = 10^-5
% output s, s 为 ln1.7 的近似值
1. n = 1; p = x - 1; s = 0; term = p; t = -1      % t 用来定义符号
2. while abs(term) ≥ Tol      % abs(x)表示 x 的绝对值
   2.1  n = n + 1; t = -t; s = s + t * term; p = p * (x - 1); term = p/n;
   end
3. disp(s); disp(n);
```

应用此算法求得：n = 22，s = 0.530633，(ln(1.7) = 0.530628…)。

用简化问题的解作为原来问题的近似解，或构造迭代法逼近问题的解，涉及到方法的收敛性问题。因此构造和分析此类算法，必须讨论它的收敛性和误差估计。

1.2.2 算法的效率

同一个数学问题可能有多种数值算法，我们要做出选择。评价一个算法的好坏主要有两条标准：算法的**计算效率**和**计算结果的精度**。我们自然应该选择计算效率既高又能满足精度要求的算法。算法的计算效率是由它的计算工作量体现的。一般地，将计算机完成一次浮点加（减）法或乘（除）法运算称为一次浮点运算，记作 flop（floating point operation）。我们将**一个算法所需四则浮点运算的总次数定义为它的计算量，单位是 flop**。由于计算机做加减法比做乘除法快得多，故在统计计算量时，可忽略算法所含加减法的运算次数，将算法的计算量简化为**该算法所需乘法和除法运算的总次数**。通常，算法的计算量越小，它的计算效率就越高。

例 1-4 给出计算多项式 $p(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0$ 的一个高效算法。

解 在例 1-2 中，给出了计算多项式的一个算法，其计算量为：$N=2n$ flop。若将多项式改写为 $p(x)=(\cdots((a_nx+a_{n-1})x+a_{n-2})x+\cdots+a_1)x+a_0$，则得递推

公式

$$\begin{cases} b_n = a_n \\ b_k = a_k + xb_{k+1}, k = n-1, n-2, \cdots, 1, 0 \end{cases}$$

易验证 $p(x) = b_0$。上述递推公式可写成如下算法：

算法 1-4 秦九韶(Horner)算法

```
% input   x,n,a(1),a(2),…,a(n+1), 这里 a(i) = a_{i-1},i=1,…,n+1
% output  b(1) = p(x)
1. b(n+1) = a(n+1);
2. for  k = n: -1:1
        b(k) = a(k) + x * b(k+1);
   end
3. disp(b(1))
```

秦九韶算法的计算量为：N = n flop。显然，它较前者是一个高效算法。

例 1-5 设 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$，$\boldsymbol{C}$，$\boldsymbol{D}$ 分别是 10×20，20×50，50×1，1×100 的矩阵，试按不同的算法求矩阵乘积 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{ABCD}$，并作出评价。

解 由矩阵乘法的结合律，可有如下算法：

(1) $\boldsymbol{H}=((\boldsymbol{A}*\boldsymbol{B})*\boldsymbol{C})*\boldsymbol{D}$;

(2) $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{A}*(\boldsymbol{B}*(\boldsymbol{C}*\boldsymbol{D}))$;

(3) $\boldsymbol{H}=(\boldsymbol{A}*(\boldsymbol{B}*\boldsymbol{C}))*\boldsymbol{D}$。

它们的计算量分别为：$N_1=11500$ flop，$N_2=125000$ flop，$N_3=2200$ flop。

显然算法（3）效率最高。

1.3 计算机机器数系与浮点运算

微积分学的基础是实数系，而计算方法的理论则是建立在计算机机器数系的基础上。为了设计高效、可靠的算法，这里简要介绍计算机机器数系的基本知识。

1.3.1 二进制数与计算机机器数系

在大多数计算机中，实数是以二进制形式表示的，并且在二进制实数系统中进行运算。这似乎与我们从屏幕上看到的不一样。事实上，计算机首先将我们输入的十进制数转换为二进制数，然后在二进制实数系统中做运算，最后，再将结果转换为十进制数。为了熟悉十进制数到二进制数的转换，这里给出两个例子。

例 1-6 将 $x=237$ 表示为二进制数。

解 将 x 展开成 2 的乘幂之和

$$x=237=1\times2^7+1\times2^6+1\times2^5+0\times2^4+1\times2^3+1\times2^2+0\times2^1+1\times2^0$$

即 x 的二进制表示为：$x=(11101101)_2$。

例 1-7 将分数 $x=0.65625$ 与 $y=0.7$ 分别表示为二进制数。

解 将 x 展开成 2 的负乘幂之和

$$x=1\times2^{-1}+0\times2^{-2}+1\times2^{-3}+0\times2^{-4}+1\times2^{-5}$$

即 x 的二进制表示为：$x=(0.10101)_2$。用类似的方法可求得 $y=(0.1\,\overline{0110})_2$，这里，$\overline{0110}$表示 0110 的循环。

对于一般实数 x，将 x 展开成

$$x=\pm(b_{J-1}\times2^{J-1}+\cdots+b_1\times2^1+b_0\times2^0+b_{-1}\times2^{-1}+b_{-2}\times2^{-2}$$
$$+\cdots+b_{-n}\times2^{-n}+\cdots)$$

这样 x 的二进制表示为：$x=\pm(b_{J-1}\cdots b_1b_0\cdot b_{-1}b_{-2}\cdots b_{-n}\cdots)_2$，$b_j$ 是 1 或 0。

例如，$18.25=1\times2^4+0\times2^3+0\times2^2+1\times2^1+0\times2^0+0\times2^{-1}+1\times2^{-2}=(10010.01)_2$。

上述 x 的二进制表示可以写成与十进制类似的浮点形式

$$x=\pm0.b_{J-1}\cdots b_1b_0b_{-1}b_{-2}\cdots b_{-n}\cdots\times2^J$$

小数部分 $\pm0.b_{J-1}\cdots b_1b_0b_{-1}b_{-2}\cdots b_{-n}\cdots$ 称为**尾数**，2 的指数 J 称为**阶码**是整数。一般地，一个数可以有不同的浮点表示，例如

$$18.25=0.1001001\times2^5=0.01001001\times2^6$$

为了保证唯一性，通常规定非零数的尾数的第一位数字非零，即 $b_{J-1}=1$，在这种规定下的浮点表示，称为**规格化**的二进制浮点数。

在计算机中，一个非零数通常被表示为如下二进制浮点形式

$$\pm0.b_1b_2\cdots b_t\times2^m$$

其中 $b_j(j=2,\cdots,t)$ 是 1 或 0，$b_1=1$；t 称为计算机的字长；阶码 m 有固定的上、下限，即 $L\leqslant m\leqslant U$，L、U 和 t 随计算机而异。上述形式的数称为**机器数**。由于机器数的字长与阶码有限，因此计算机中的数是有限的。事实上，计算机中共有

$$2^t(U-L+1)+1$$

个机器数。把计算机中的全体机器数组成的集合记作 F 或 $F(2,t,L,U)$，称为**计算机机器数系**。机器数系 F 不是连续统，它是一个有限的、离散的、分布不均匀的集合。不难验证，F 中任意非零数 y 满足

$$2^{L-1}\leqslant|y|\leqslant2^U(1-2^{-t})$$

机器数有单精度与双精度之分，字长 t 的值规定了机器数的精度。一般地，单精度数 $t=23$，约为十进制的 7 位有效数字。双精度数 $t=52$，约为十进制的 15 位有效数字。字长越大，机器数的精度越高。阶码 m 的值规定了机器数的绝对值范围，单精度数阶码 m 的范围为 $-127\leqslant m\leqslant128$，其绝对值范围为 $2^{-128}\sim2^{128}$，即 $10^{-38}\sim10^{38}$。双精度阶码 m 的值为 $-1023\leqslant m\leqslant1024$，其绝对值范围为