教育科学"十五"国家规划课题研究成果

数值计算

主　编　石瑞民

副主编　许志刚　孙　靖

高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

教育科学“十五”国家规划课题研究成果

数值计算

主　编　石瑞民
副主编　许志刚　孙　靖

高等教育出版社

内容提要

本书是教育科学“十五”国家规划课题“21 世纪中国高等学校应用型人才培养体系的创新与实践”数学类子课题项目成果之一。着重介绍了进行科学计算所必须掌握的一些最基本、最常用的数值计算方法，其内容包括误差知识、一元非线性方程的解法、线性方程组的解法、插值与拟合、数值积分与数值微分、常微分方程数值解法等。

书中内容主要以科学计算的实际过程为主线组织编排，突出数值计算的实用性。每一章内容均以实际问题引出，介绍了相应的各种常用算法后，再以引例的 MATLAB 求解作为结束。书中配有一定数量的例题和习题，并对常用算法给出了详细计算步骤。

本书可作为一般高等学校非数学类专业的教材，也可用作数学实验与数学建模的参考书，并可供其他科技人员参阅。

图书在版编目(CIP)数据

数值计算 / 石瑞民主编. —北京：高等教育出版社，2004.6

ISBN 7-04-014423-9

Ⅰ.数… Ⅱ.石… Ⅲ.数值计算－高等学校－教材 Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2004）第 029758 号

策划编辑 马 丽 **责任编辑** 胡乃冋 **封面设计** 王凌波

责任绘图 郝 林 **版式设计** 王艳红 **责任校对** 金 辉 **责任印制** 陈伟光

出版发行 高等教育出版社

社 址 北京市西城区德外大街 4 号

邮政编码 100011

总 机 010-82028899

购书热线 010-64054588

免费咨询 800-810-0598

网 址 http://www.hep.edu.cn

http://www.hep.com.cn

经 销 新华书店北京发行所

印 刷 涿州市星河印刷有限公司

开 本 787×960 1/16

印 张 11.5

字 数 210 000

版 次 2004 年 6 月第 1 版

印 次 2004 年 6 月第 1 次印刷

定 价 13.80 元

总　　序

为了更好地适应当前我国高等教育跨越式发展需要，满足我国高校从精英教育向大众化教育的重大转移阶段中社会对高校应用型人才培养的各类要求，探索和建立我国高等学校应用型人才培养体系，全国高等学校教学研究中心（以下简称“教研中心”）在承担全国教育科学“十五”国家规划课题——“21 世纪中国高等教育人才培养体系的创新与实践”研究工作的基础上，组织全国 100 余所以培养应用型人才为主的高等院校，进行其子项目课题——“21 世纪中国高等学校应用型人才培养体系的创新与实践”的研究与探索，在高等院校应用型人才培养的教学内容、课程体系研究等方面取得了标志性成果，并在高等教育出版社的支持和配合下，推出了一批适应应用型人才培养需要的立体化教材，冠以“教育科学‘十五’国家规划课题研究成果”。

2002 年 11 月，教研中心在南京工程学院组织召开了“21 世纪中国高等学校应用型人才培养体系的创新与实践”课题立项研讨会。会议确定由教研中心组织国家级课题立项，为参加立项研究的高等院校搭建高起点的研究平台，整体设计立项研究计划，明确目标。课题立项采用整体规划、分步实施、滚动立项的方式，分期分批启动立项研究计划。为了确保课题立项目标的实现，组建了“21 世纪中国高等学校应用型人才培养体系的创新与实践”课题领导小组（亦为高校应用型人才立体化教材建设领导小组）。会后，教研中心组织了首批课题立项申报，有 63 所高校申报了近 450 项课题。2003 年 1 月，在黑龙江工程学院进行了项目评审，经过课题领导小组严格的把关，确定了首批 9 项子课题的牵头学校、主持学校和参加学校。2003 年 3 月至 4 月，各子课题相继召开了工作会议，交流了各校教学改革的情况和面临的具体问题，确定了项目分工，并全面开始研究工作。计划先集中力量，用两年时间形成一批有关人才培养模式、培养目标、教学内容和课程体系等理论研究成果报告和在研究报告基础上同步组织建设的反映应用型人才培养特色的立体化系列教材。

与过去立项研究不同的是，“21 世纪中国高等学校应用型人才培养体系的创新与实践”课题研究在审视、选择、消化与吸收多年来已有应用型人才培养探索与实践成果基础上，紧密结合经济全球化时代高校应用型人才培养工作的实际需要，努力实践，大胆创新，采取边研究、边探索、边实践的方式，推进高校应用型人才培养工作，突出重点目标，并不断取得标志性的阶段成果。

教材建设是保证和提高教学质量的重要支柱和基础，教材作为体现教学内容和教学方法的知识载体，在当前培养应用型人才中的作用是显而易见的。探索、建设适应新世纪我国高校应用型人才培养体系需要的教材体系已成为当前我国高校教学改革和教材建设工作面临的十分重要的任务。因此，在课题研究过程中，各课题组充分吸收已有的优秀教学改革成果，并和教学实际结合起来，认真讨论和研究教学内容和课程体系的改革，组织一批学术水平较高、教学经验较丰富、实践能力较强的教师，编写出一批以公共基础课和专业、技术基础课为作的有特色、适用性强的教材及相应的教学辅导书、电子教案，以满足高等学校应用型人才培养的需要。

我们相信，随着我国高等教育的发展和高校教学改革的不断深入，特别是随着教育部“高等学校教学质量和教学改革工程”的启动和实施，具有示范性和适应应用型人才培养的精品课程教材必将进一步促进我国高校教学质量的提高。

全国高等学校教学研究中心

2003年4月

前　　言

随着科学技术的迅猛发展和生产实践的不断丰富，有越来越多的数值计算问题亟待人们去解决。而计算机技术的日益丰富和提高以及计算数学、计算软件的深入研究和发展，使得这些问题的解决变得相对容易。因此，一般高等学校的绝大多数非数学类专业也都相继开设了"计算方法"或"数值分析"这门课，本书正是为了满足这一广泛需要而编写的。

计算数学的内容十分丰富，根据《高等工业学校数值计算方法课程教学基本要求》及时代发展的需要，我们着重介绍了进行科学计算所必须掌握的一些最基本、最常用的算法及其概念与处理技术。书中内容主要以科学计算的实际过程为主线进行组织编排，突出数值计算的实用性，这也是本书取名为《数值计算》的原因。每一章内容均以实际问题引出，然后介绍解决同类问题的一些最具代表性的典型方法，对算法的处理重点集中在构造算法的基本思想和基本原理上，突出相关概念和内容的联系与衔接，同时对算法的误差估计、收敛性、稳定性等理论问题也作了适当的讨论，并对常用算法给出了详细计算步骤。在介绍了相应的各种常用算法后，再以引例的 MATLAB 求解作为该章内容的结束。为了使读者能尽快使用计算机编程实现算法，书中还以附录的形式简单介绍了易学易用的 MATLAB 软件。

书中配有一定数量的例题和习题，通过练习和上机实习可以加深对各章内容的理解，并掌握一定的编程方法和技巧。

本书第一、二、六章及附录由石瑞民编写，第三、四章由许志刚编写，第五章由孙靖编写，全书由石瑞民统稿。淮海工学院数理科学系主任曹伟平教授详细审阅了本书初稿，并提出了许多宝贵的修改意见，作者在编写时也参阅了不少现有文献，高等教育出版社的编辑马丽为本书的出版也做了不少具体工作，作者在此一并表示衷心感谢。

由于编者水平所限，不妥或错误之处在所难免，恳请读者批评指正。

编　者

2004 年 1 月

目　　录

第1章 绪论

1.1 数值计算的任务与特点

我们把用计算机进行各种科学技术计算的工作,称为**科学计算**,科学计算与科学实验及理论研究是现代科学的三大组成部分,数值计算是科学计算的关键环节.为了具体说明数值计算的任务与特点,我们考察用计算机解决科学计算问题时经历的几个过程:

提出实际问题→建立数学模型→选用数值计算方法→程序设计→上机计算求出数值结果→对数值结果进行分析解释.

由实际问题应用有关科学知识和数学理论建立数学模型这一过程,通常作为应用数学的任务.而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算出结果,这一过程则是计算数学的任务,也就是数值计算的任务,对数值结果进行分析解释这一过程则是二者共同关切的问题.数值计算的研究对象是求解各种数学问题的数值方法的设计、分析,有关的数学理论和软件实现,它是数学的一个重要分支.

数值计算是用计算机进行数学计算的,而计算机的运算速度高,可以承担各种计算工作.因此,很多人甚至为数不少的一些科研人员,常常认为只要把涉及到的一些数学公式,用一种计算机语言正确编程,计算机就一定能给出正确的结果,问题是这样简单吗?

例 1.1 我们知道,行列式解法的 Cramer 法则原则上可用来求解线性方程

组,用这种方法解一个 n 元方程组,要算 $n+1$ 个 n 阶行列式的值,总共需要 $n!\ (n-1)(n+1)$次乘法. 当 n 充分大时,计算量是相当惊人的. 譬如一个 20 元不算太大的方程组,大约要做 10^{21} 次乘法,这项计算即使用每秒千亿次的计算机去做,也得要连续工作上百年才能完成,当然这是完全没有实际意义的. 其实,解线性方程组有许多实用的算法,譬如用众所周知的消元法,一个 20 元的方程组即使用一台小型计算器也能很快地解出来.

这个简单的例子告诉我们,在数值计算中要注意算法计算量的分析. 另外,计算机的内存是有限的,因此,在设计算法时,也要尽量节省存储量.

例 1.2 求一元二次方程 $x^2-(10^9+4)x+4\times10^9=0$ 的根时,常用的公式是

$$x_{1,2}=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a},$$

式中 a,b,c 分别为二次项系数、一次项系数和常数项. 若用这个公式编程并在字长为 8 位的计算机上计算,得到的结果为 $x_1=10^9,x_2=0$. 易验证本题的两个根为 $x_1=10^9,x_2=4$,可见计算机给出的计算结果不对.

出现这一错误的原因是受机器字长的限制所引起的误差造成的. 因此,在设计算法时,也要注意算法的误差分析.

例 1.3 计算数列 $I_n=\int_0^1\frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x$.

解 因为

$$I_n=\int_0^1\frac{(x^n+5x^{n-1})-5x^{n-1}}{x+5}\mathrm{d}x=\int_0^1 x^{n-1}\mathrm{d}x-5\int_0^1\frac{x^{n-1}}{x+5}\mathrm{d}x=\frac{1}{n}-5I_{n-1},$$

所以可以得到 I_n 的递推公式

$$I_n=-5I_{n-1}+\frac{1}{n}\quad(n=1,2,\cdots).\tag{1.1}$$

将 $I_0=\int_0^1\frac{1}{x+5}\mathrm{d}x=\ln 6-\ln 5$ 代入(1.1)式依次可算出 $I_1,I_2,\cdots$. 如果按(1.1)式用计算机编程来计算,会发现当 n 较大时,I_n 的计算结果会出现负数,例如在字长为 8 的计算机上编程计算,可出现 $I_{12}=-0.329\,021\,10\times10^{-2}$,这显然是错误的,因为 I_n 的被积函数在积分区间上是非负的,故总应有 $I_n\geqslant0$ 才对.

出现这一错误,是由于受机器字长限制引起的误差在计算过程中的传播造成的. 一个好的算法应能控制误差的传播,即应是所谓数值稳定的算法.

上面几个例子初步表明,计算数学与纯数学有明显的不同,这种不同主要是由于计算数学是纯数学与实际和计算机相结合而形成的一门数学分支. 它既有纯数学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实验的高度

技术性的特点，是一门与计算机使用密切结合的实用性很强的数学课程. 概括起来，它有以下四个特点：

第一，面向计算机．要根据计算机特点提供切实可行的有效算法，即算法只能包括加、减、乘、除运算和简单的逻辑运算，这些运算是计算机能直接处理的运算．

第二，有可靠的理论分析．设计的算法应能任意逼近并达到精度要求，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．这些都建立在相应的数学理论的基础上．

第三，算法要尽量节省存储量，减少计算工作量，这关系到算法能否在计算机上实现．

第四，任何算法都要有数值实验，即任何一个算法除了从理论上要满足上述三点外，还要通过数值实验证明是行之有效的．有的方法在理论上虽不够严格，但通过实际计算，对比分析等手段，证明是行之有效的方法，也应采用．

本门课程将着重介绍进行科学计算所必须掌握的一些最基本、最常用的数值算法．其内容涉及了微积分、线性代数、常微分方程等课程，因此读者必须掌握这几门课的基本内容才能学好本门课程．

1.2 计算机中的数系与运算特点

1.2.1 计算机的数系

我们所研究的算法都是在计算机上求解的方法，因此应该了解计算机是如何进行数字计算的，这有助于构造和分析各种数值方法．数字运算主要是实数运算，而任一实数可表示为

$$x = \pm 10^c \times 0.a_1 a_2 a_3 \cdots, \tag{1.2}$$

其中 $a_i \in \{0,1,2,3,\cdots,9\}(i=1,2,3,\cdots)$，$c$ 为整数，由式(1.2)表示的 x 称为**十进制浮点数**. 一般地，可定义 β **进制浮点数**为

$$x = \pm \beta^c \times 0.a_1 a_2 a_3 \cdots,$$

其中 $a_i \in \{0,1,2,3,\cdots,\beta-1\}\quad(i=1,2,3,\cdots)$.

在计算机中，由于机器本身的限制，一般实数被表示为

$$x = \pm \beta^c \times 0.a_1 a_2 a_3 \cdots a_t, \tag{1.3}$$

其中 $a_i \in \{0,1,2,3,\cdots,\beta-1\}(i=1,2,\cdots,t)$，这里 t 是正整数，是计算机的字

长，c 为整数，满足 $L \leqslant c \leqslant U$，$L$ 和 U 为固定整数，对不同的计算机，t，L 和 U 是不同的．由(1.3)表示的数 x 称为 t **位** β **进制浮点数**，其中 c 称为**阶码**，$0.a_1a_2\cdots a_t$ 称为**尾数**，这样一些数的全体

$$F(\beta,t,L,U)=\{\pm\beta^c\times 0.a_1a_2\cdots a_t \mid a_i\in\{0,1,2,\cdots,\beta-1\}(i=1,2,\cdots,t),L\leqslant c\leqslant U\}$$

称为**机器数系**，它是计算机进行实数运算所用的数系，一般 β 取 2,8,10 和 16．

机器数系 F 是一个离散的有限集合，分布也不均匀．在 F 中有一个最大正数 M 和最小正数 m，如数系 $F(10,4,-99,99)$ 中，$M=10^{99}\times 0.9999$，$m=10^{-99}\times 0.0001$．若一个非零实数的绝对值大于 M，则计算机产生**上溢**错误，若绝对值小于 m，则计算机产生**下溢**错误．上溢时，计算机中断程序处理，下溢时，计算机将此数用零表示继续执行程序．无论是上溢还是下溢，都称为**溢出**错误．通常，计算机把尾数为 0 且阶数最小的数表示为数零．

1.2.2 计算机对数的接收与处理

计算机是怎样接收与处理一般实数的呢？

设非零实数 x 是计算机接收的数，则计算机对其的处理方法是：

1) 若 $x\in F(\beta,t,L,U)$，则原样接收 x；

2) 若 $x\notin F(\beta,t,L,U)$，但 $m\leqslant |x|\leqslant M$，则用 $F(\beta,t,L,U)$ 中最接近 x 的数 $fl(x)$ 表示并记录 x，以便后面处理．

计算机对接收到的数只能做加减乘除四则运算，其运算方式是：

(1) 加减法：先向上对阶，后运算，再舍入．

(2) 乘除法：先运算，再舍入．

例如，某一计算机中的数系为 $F(10,4,-90,90)$，

$$fl(x_1)=0.2337\times 10^{-1},\ fl(x_2)=0.3364\times 10^2$$

是计算机接收到的两个实数，则有

$$\begin{aligned}fl(x_1+x_2)&=fl(0.2337\times 10^{-1}+0.3364\times 10^2)\\&\xlongequal{\text{对阶}}fl(0.0002337\times 10^2+0.3364\times 10^2)\\&\xlongequal{\text{运算}}fl(0.3366337\times 10^2)\\&\xlongequal{\text{舍入}}0.3366\times 10^2,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}fl(x_1x_2)&=fl(0.2337\times 10^{-1}\times 0.3364\times 10^2)\\&\xlongequal{\text{运算}}fl(0.7861668\times 10^0)\\&\xlongequal{\text{舍入}}0.7862\times 10^0=0.7862.\end{aligned}$$

计算机接收和处理实数的上述特点，往往使得数学上很完美的公式在计算

机上编程计算时，却得不到正确的结果，例 1.2 就属于这种情况．但只要我们注意到计算机的这些特点，就可以用科学的计算方法解决这一问题．

在计算机的数系 $F(\beta,t,L,U)$中，把尾数第一位 $a_1\neq0$ 的数称为**规格化的浮点数**.用规格化的浮点数表示一个实数，具有形式惟一和精度高的特点，但并不是 $F(\beta,t,L,U)$中每一个数都可以用规格化浮点数表示.例如数 $0.00\cdots1\times\beta^{L}$，就不能表示为规格化浮点数．

1.3 数值计算的误差

在研究算法时，必须注重误差分析，否则，一个合理的算法也可能得出错误的结果，只要我们能对误差进行合理的处理和控制，就可以有效地解决问题．

1.3.1 误差的来源

从科学计算的全过程来看，误差的来源主要有四个方面：

(1) 模型误差(也称描述误差)

在建立数学模型时，总是在一定条件下抓住主要因素，忽略次要因素并加以抽象，这样得到的模型是一种理想化了的数学描述，它与实际问题之间总存在误差，这种误差就称为**模型误差**或**描述误差**．

(2) 观测误差

在数学模型或各种计算公式中包含着一些已知数量(称为原始数据)，这些数量往往是由观测或实验得到的，它们和实际的大小之间有误差，这种误差称为**观测误差**．

(3) 截断误差

我们知道，许多数学运算(诸如微分、积分及无穷级数求和等)是通过极限过程来定义的，然而计算机上只能完成有限次的算术运算和逻辑运算，因此需要将解题方案加工成算术运算与逻辑运算的有限序列，这种加工常常表现为对无穷过程的截断，由此产生的误差通常称为**截断误差**．

譬如，计算函数 e^x 在某点的值时，由于 e^x 的幂级数展开式为

$$e^x=1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\cdots,$$

但用计算机求值时，我们不能直接得出右端无穷多项的和，而只能截取有限项，求出

$$S_n(x)=1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!},$$

计算部分和 $S_n(x)$作为 e^x 的值必然会有误差，据泰勒公式得，其截断误差为

$$e^x - S_n(x) = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!}e^{\theta x} \quad (0<\theta<1).$$

有很多好的数值计算方法都是巧妙地处理截断误差得出的．

(4) 舍入误差

由于计算机数系 $F(\beta,t,L,U)$是离散的有限集，计算机在接收和运算数据时总是将位数较多的数舍入成一定位数的机器数，这样产生的误差就是**舍入误差**．每一步的舍入误差是微不足道的，但经过计算过程的传播和积累，舍入误差甚至可能会“淹没”所要的真解，例 1.3 就属于这种情况．

误差的来源虽然有以上种种，且了解这些对于数值计算都是有帮助的，但是前面两种误差往往不是计算工作者所能独立解决的．因此，在数值计算课程中通常只讨论截断误差和舍入误差．

1.3.2 绝对误差、相对误差、有效数字

在数值计算中，误差虽然不可避免，但人们总是希望计算结果能足够准确，这就需要估计误差．为了从不同的侧面表示近似数的精确程度，通常运用绝对误差、相对误差和有效数字的概念．

定义 1.1 设 x^* 为准确值，x 是 x^* 的一个近似值，称

$$e = x^* - x$$

为近似值 x 的**绝对误差**，简称**误差**．

由于准确值 x^* 未知，因而误差 e 通常是无法确定的，人们只能根据测量工具或计算过程，设法估算出它的取值范围，即误差绝对值的一个上界．

定义 1.2 设存在一个正数 ε，使

$$|e| = |x^* - x| \leqslant \varepsilon, \tag{1.4}$$

则称 ε 是近似值 x 的**绝对误差限**，简称**误差限**或**精度**．

若近似数 x 的误差限为 ε，则 $x-\varepsilon \leqslant x^* \leqslant x+\varepsilon$，这表明准确值 x^* 必落在区间$[x-\varepsilon, x+\varepsilon]$上，在应用上常采用下面的写法

$$x^* = x \pm \varepsilon$$

来表示近似值 x 的精度或准确值 x^* 所在的范围．例如用具有毫米刻度的米尺测量不超过 1 m 的某个物件的长度时，其误差不会超过半个毫米，即测量长度的精度为 0.5 mm．由这个例子还可以看到绝对误差是有量纲单位的．

绝对误差的大小不能完全刻画近似值的准确程度．例如某个量的准确值 $x_1^* = 1000$，其近似值 $x_1 = 999$，另一个量的准确值 $x_2^* = 10$，相应的近似值 $x_2 = 9$，这两个量的绝对误差都是 1，但显然 x_1 的近似程度比 x_2 好．为反映这种

近似程度，再引入如下相对误差的概念.

定义 1.3 称 $e_r=\frac{e}{x^*}=\frac{x^*-x}{x^*}$ 为近似值 x 的**相对误差**.

相对误差是一个无量纲量，通常可用百分数表示，相对误差的绝对值越小，近似程度越高. 例如，前面两个量 x_1 和 x_2，它们的相对误差分别为 $e_r(x_1)=0.1\%$ 和 $e_r(x_2)=10\%$，所以 x_1 比 x_2 的近似程度好. 同样，由于准确值 x^* 通常是未知的，一般我们不能定出 e_r 的准确值，而只能估计它的大小范围.

定义 1.4 如果存在正数 ε_r，使

$$|e_r|=\left|\frac{x^*-x}{x^*}\right|=\left|\frac{e}{x^*}\right|\leqslant\varepsilon_r,$$

则称正数 ε_r 为 x 的**相对误差限**.

相对误差限不如绝对误差限容易得到，在实际计算中常借助绝对误差限来求之，并取分母中的准确值 x^* 为近似值 x，即取 $\varepsilon_r=\frac{\varepsilon}{|x|}$.

为了给出一种近似数的表示方法，使之既能表示其大小，又能表示其精确程度，我们来引进有效数字的概念. 在计算中常按四舍五入原则得到数 x^* 的前几位近似值 x，例如设

$$x^*=\pi=3.1415926\cdots,$$

经四舍五入，若取三位得 $x=3.14$，$\varepsilon\leqslant0.002$；若取五位得 $x=3.1416$，$\varepsilon\leqslant0.000008$. 它们的绝对误差限都不超过末位数字的半个单位，即

$$|\pi-3.14|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-2},\ |\pi-3.1416|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4},$$

我们称它们**准确到了末位**.

定义 1.5 设近似数 $x=\pm0.a_1a_2\cdots a_n\times10^m$，其中 $a_i\in\{0,1,2,\cdots,9\}(i=1,2,\cdots,n)$，$a_1\neq0$，$m$ 为整数，如果

$$|e|=|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n},\tag{1.5}$$

则称近似值 x 有 n **位有效数字**，其中 $a_1,a_2,\cdots,a_n$ 都是 x 的**有效数字**，也称 x 为**有 n 位有效数字的近似值**.

由定义 1.5 易知 π 的近似值 3.14 和 3.1416 分别有 3 位和 5 位有效数字. 由(1.5)式可知，有效数字越多，绝对误差越小. 至于有效数字与相对误差的关系有如下结论.

定理 1.1 设近似值 $x=\pm0.a_1a_2\cdots a_n\times10^m$ 有 n 位有效数字，则其相对误差限为

$$\varepsilon_r=\frac{1}{2a_1}\times10^{-n+1}.$$