面向21世纪课程教材

Textbook Series for 21st Century

计算机数值方法

第二版

施吉林　刘淑珍　陈桂芝　编

高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

面向21世纪课程教材
Textbook Series for 21st Century

计算机数值方法

第二版

施吉林　刘淑珍　陈桂芝　编

高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

内容提要

本书第一版是普通高等教育"九五"国家级重点教材及面向21世纪课程教材。为适应现代计算机技术发展的变化和需要，本书在保留原有体系、基本内容和风格的基础上，作了相应的修改和精简。主要介绍计算机上求解各种数值问题的常用基本数值方法及其算法设计，包括解线性方程组的直接法，插值法与最小二乘法，数值积分与微分、常微分方程数值解法，逐次逼近法（包括矩阵特征问题的幂法）等，内容与计算机的使用密切结合。第二版主要对算法设计进行了四个方面的修改，增加了"数值实验"附录，并对第一版中的错误以及叙述和表达中的不妥之处进行了更正和修改。

本书可作为高等学校理工科非数学类专业计算方法课程的教材，也可供从事科学计算的科技工作者参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算机数值方法 / 施吉林，刘淑珍，陈桂芝编. —2版. —北京：高等教育出版社，2005.3

ISBN 7-04-016130-3

Ⅰ. 计… Ⅱ. ①施… ②刘… ③陈… Ⅲ. 电子计算机–数值计算–高等学校–教材 Ⅳ. TP301.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2004）第142176号

策划编辑 李艳馥　责任编辑 李　陶　封面设计 张　楠
责任绘图 吴文信　版式设计 王　莹　责任校对 张　颖
责任印制 孔　源

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010－58581118
社　　址	北京市西城区德外大街4号	免费咨询	800－810－0598
邮政编码	100011	网　　址	http://www.hep.edu.cn
总　　机	010－58581000		http://www.hep.com.cn
		网上订购	http://www.landraco.com
经　　销	北京蓝色畅想图书发行有限公司		http://www.landraco.com.cn
印　　刷	化学工业出版社印刷厂		
		版　　次	1999年6月第1版
开　　本	787×960　1/16		2005年3月第2版
印　　张	18.5	印　　次	2005年3月第1次印刷
字　　数	330 000	定　　价	21.50元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题，请到所购图书销售部门联系调换。

物料号　16130—00

第二版前言

本教材自1999年由高等教育出版社出版至今已有五年多，发行量达六万余册，并于2001年获中国高校科学技术二等奖，受到国内使用者的欢迎。但是数值计算与计算机软、硬件的发展密切相关，五年多来数学软件有了很快的发展与普及，特别是算法语言在多方面的突破：在语言上已从单纯的可执行文件发展到可执行文件与解释系统并存；在功能上从单纯的数值计算发展到数值计算与符号运算并存；特别是有些语言已取消了对变量说明和内存分配等要求，淡化了算法设计的时、空复杂性要求。程序设计方法也由面向过程为主的设计方法发展到面向对象的设计方法。算法语言的多样性、功能的扩充以及程序设计方法的发展和变化都给使用者带来了更多的方便，同时也为精简算法设计创造了条件，有些数学软件包已达到可以取消书面算法了。但是对于实时控制、计算机识别等计算程序，对时、空复杂性的要求还是很高的，不少流行的数学软件包还很难达到要求。针对这些变化与发展，以及目前的需求和授课学时紧张等矛盾，本书除保留原有体系和基本内容外，作了相应的修改和精简。

一、对算法设计进行了如下几个方面的修改：（1）精简与计算机语言有关的浮点运算、工作单元分配，以及算法设计中技术性较高的节省时间、空间的计算细节；（2）算法表达法中删去了数值计算工作者不常用的结构化框图，加强了使用高级语言的语句形式表达，如 for，if...else，while 等语句，这种表达形式不但表达简单易读，而且便于编码；（3）对算法设计进行了全书统一调整，使表达式的符号与下标尽量与正文一致，对简单计算公式，一般不作详细的算法设计，这样处理不但有利于学员掌握算法的本质，节省授课学时，而且还可以充分发挥不同语言的作用；（4）基于算法语言功能的强化与便捷，我们对原有的算法设计做了适当的删减。

二、本课程与使用计算机密切相关，这也是它与以往计算方法的区别之一。因此，在学习本课程的同时应强调上机实习。为此，新版本增加了“数值实验”附录，以便任课教师根据课程的学时和具体条件灵活安排和使用。

三、对第一版中的各种错误，以及叙述和表达中的不妥之处进行更正和修改，但还有可能遗留，诚请使用本书的教师、学员和广大读者批评指正。

大连理工大学使用本书的师生，在使用过程中提出了不少宝贵的修改意

见；高等教育出版社理科分社的有关同志为本书的再版付出了辛勤的劳动，我们在此一并表示衷心的感谢。

编者

2004.8

第一版前言

《计算机数值方法》是为高等院校理工科非数学类专业编写的“计算方法”（或称数值分析）课程教材。本书主要介绍计算机上的常用数值方法及其算法设计。内容包括代数、微积分和常微分方程等方面的主要数值方法与算法，以及数值软件方面的基本概念和算法设计基础。本书具有如下特点：1. 体系较以往的《计算方法》有所不同，它以各类数值问题间的内在联系为主线，介绍数值方法的结构，揭示方法之间的关系，使计算方法在体系上更加系统化，脉络清晰、简洁，便于教学和学生掌握知识的规律；2. 内容与以往的计算方法教材相比较，在方法的描述上，力求突出方法在计算机上实现的特点，并增加了算法设计的内容。书中对各章主要方法都给出了算法设计，并用自然语言或图示法（也有两者兼用）表达算法，从而使读者学习了数值方法后，不但能加深对方法的理解，更容易进行程序设计，为使用计算机解决数值问题打下良好的基础。在内容的取材上，以实用、常用的基本方法为主，力求少而精，使读者能用较少的学时掌握计算方法的基本理论和方法。据我们的教学实践，40 学时左右可以讲完本书的绝大部分内容（算法设计部分采取重点讲解与学生阅读相结合的方式），带（*）的内容是供选择的。各章配有一定数量的习题，并在书后附有答案，其中有可供计算实习选用的习题。

本教材由施吉林、刘淑珍主编，施吉林、刘淑珍、陈桂芝编写。教材的体系改革与内容选材是编者在多年从事计算方法教学和数值软件开发工作的基础上，结合理工科非数学专业的专业特点和今后发展的要求，经多次实践后形成，并广泛征求意见后定稿的。它体现了教改的成果，不但便于教学使用，而且对从事科学计算和数值软件开发工作者也有参考价值。

全书初稿得到熊西文教授的精心审校，并提出了许多宝贵的修改意见。在大连召开的《计算机数值方法》教材研讨会上，李庆杨教授以及与会的其他同志对本书的初稿提出了宝贵而中肯的意见，对我们有目的地对初稿进行修改，以及最后定稿都有极大的帮助，对此我们深表感谢。

我们非常感谢工科数学教学指导委员会负责同志马知恩、汪国强、王绵森教授和文小西先生对出版本书的大力支持。感谢施光燕教授、贾仲孝教授和大连理工大学应用数学系以及计算方法教研室的有关领导和同志对本教材出版的关心和支持。本书在高等教育出版社编辑室胡乃冏同志的辛勤和精心编校下出版，他为保证本书的出版质量起到了关键作用。本书的出版还得到

教育部、高等教育出版社和大连理工大学的关心、支持和资助，在此特表感谢。

由于水平所限，书中难免还会有错误、缺点和不足之处，恳请广大读者、同行和有关专家对本书批评指正，以便于今后进一步修改。

目　录

第一章　引　　论

§1　计算机数值方法的研究对象与特点

计算机的飞速发展，正在日益影响着人们对传统数值分析（即计算方法）的认识．近几十年来，人们越来越认识到计算方法的学习与研究离不开计算机，仅靠数学理论的演绎和推导还不能解决实际中的数值问题，只有与计算机科学相结合，才能研制出实用的好算法．而且好的算法必须变成数值软件后才有可能为社会创造更大的财富．当代实践证明，计算方法正在日趋明显地成为数学与计算机科学的交叉性学科．科学计算已和理论计算、实验并列为三大科学方法．

数学与计算机科学的密切关系，历史已做了回答，可以说计算机科学是吸吮着数学的乳汁而成长起来的．德国数学家 Leibniz 在研究组合数学时发现的二进制编码是电子计算机诞生的基础；Von Neumann 提出了用流程图描述计算机运行过程后，软件的开发研究才得以发展和遍地开花；流行一时的结构化程序设计也是 Bohm 和 Jacopini 证明的一条数学原理“任何单入口和单出口，且没有“死循环”的程序，都能由三种最基本的控制结构构造出来”的产物，当前流行的面向对象程序设计也与代数学密切相关．另一方面，计算机的诞生和发展，给数学增加了新的血液，对数学的发展产生了不可估量的影响．借助于计算机可以证明玄妙的数学定理、揭示某些数学规律，以及求解许多原来令人一筹莫展的数学模型问题；由于并行计算机的诞生和发展，促使数学工作者去研究适应新一代计算机发展需要的算法——并行算法．总之，由于计算机科学的发展，可以使数学上灵活的推演和运算改变成遵循某种规律的算法设计，从而为发展数值软件奠定了基础．因此，计算方法也得到更快发展，大量适合计算机求解的现代数值方法随之产生，并被广泛使用，成为当代科学计算的主要方法．

使用传统的计算方法解决实际问题，不但要求使用者具有一定的数学修养，而且还应具有相当的编程能力，因而使计算方法的广泛应用受到了影响．为解决这些问题，科学计算工作者经过长时间努力，将数值方法设计成算法，进而编制成数值软件，并逐步形成数值软件产业，为广大用户打开了方便之门．当今，已有不少集各种数值算法和符号演算于一体的综合数学软件包，如在国内外广为流行的 Mathematica，Matlab，Maple 等等．

数学软件的开发技术还在不断发展，目前流行着两种软件开发方法：即面向过程的“自顶向下，逐步细化”的结构化方法；再者为面向对象的“自下向上”的组装式开发方法，其主要工具是“类”——一种特殊模块，由它可组装成数值算法和求解程序. 虽然后者是最近发展起来的开发技术，但是，由于它编程简便，使用方便，已成为当前软件开发技术的主流.

数学软件包的引进与开发，给工程技术人员使用数值方法求解各种数值问题带来了极大的方便. 但是，如果工程技术人员仅知道如何使用这些数学软件，一旦出现问题就难于解决；再者，有不少工程技术人员需要结合各自的具体需求灵活使用软件包，或者自己设计专用算法. 因此，虽然有了各种软件包，工程技术人员掌握数值方法和算法设计基础还是很有必要的，这可以使他们真正成为使用数学软件包的“主人”. 为达此目的，我们编写了《计算机数值方法》，为即将走上工作岗位从事工程技术和科学教育工作的大学生打下使用计算机解决数值问题的基础. 为此，本教程不追求完美的数学演绎、论证以及详尽的公式推导，也不以数学课程的类别为序来讲述数值方法，而尽量以数值方法间的内在联系为主线，着重介绍数值方法及它们之间的关系与结构，力求少而精，使读者用较少的学时能对一般常用数值方法有较多的了解与掌握，并为进一步研究新算法奠定基础；内容以研究计算机上常用数值方法为主要对象，尽可能缩小数值方法与程序设计之间的距离，通过对一些有代表性的算法设计介绍，使读者了解数值方法与算法之间的关系与差别，初步掌握算法设计技术，为使用计算机求解数学模型问题架好桥梁；通过课堂教学与数值实验，使读者尽可能多地了解算法设计与程序设计之间的关系，进而培养用计算机解决实际问题的技能.

以计算机为工具来求解各种数学模型，无论使用何种方法，均需要经历三个中间过程：总体设计（模型的细化等）、详细设计（主要为算法设计）和程序设计等. 计算机数值方法主要是研究将数学模型变成数值问题，并研究求解数值问题的数值方法，进而设计数值算法，这些内容主要属于软件工程中详细设计范围. 它承上启下，并与计算机科学密切相关，但是由于教学时数的限制，本教程只能偏重于介绍微积分、线性代数与微分方程等方面的数值方法，对于将数值方法变成数值算法，以及算法的计算复杂性（即时空复杂度）和软件工程中对算法设计的要求等问题只做一般性介绍，详细内容见[11]. 对于程序设计、上机测试和调试等解题过程，及其相关内容，在数值实验中将有所体现.

根据教材的研究对象和特点等要求，在学习本教程前应掌握微积分、线性代数、微分方程等课程的基本内容，以及数学软件包和计算机的基本操作.

§2 数值问题与数值算法

通常将解决实际问题时应用有关科学知识和数学理论建立数学模型的过程，归属于应用数学范围．将数学模型问题变成数值问题，进而研究求解数值问题的数值方法，并设计行之有效的数值算法的过程，归属于计算方法的范围．但是，在解决实际问题时，两者之间的范围和任务有时很难区分，因此，数学界有时将传统的计算方法和应用数学统称为应用数学问题．

为了叙述方便，我们将求解"数值问题"的系列计算公式称为数值方法，将数值方法的总体称为计算方法．传统的计算方法主要就是研究"数值方法"．所谓"数值问题"是指"输入数据与输出数据之间函数关系的一个确定而无歧义的描述"；"计算机数值方法"是指它的系列计算公式中的运算与数据，必须是计算机上可执行的运算和数据．

数学模型并不都是"数值问题"．例如，求二次方程

$$ax^2+bx+c=0 \tag{2.1}$$

的根．因为它的输入数据是 a、b、c，其输出数据是 x_1 和 x_2，所以它是一个数值问题．但是求常微分方程

$$\begin{cases} y' = 2x+3, \quad x\in[0,a], \\ y(0)=0 \end{cases}$$

的解，其输入数据虽然是 2，3，$x=0$，$y=0$ 等，但是它的输出却是函数 $y=x^2+3x$．因此，这个问题不是数值问题，要将它变成数值问题，须进行"离散化"，即将求

$$y=x^2+3x$$

的问题改变成求

$$y(x_1), y(x_2), \cdots, y(x_n), 0<x_1<x_2<\cdots<x_n=a$$

的问题．将不是数值问题的数学模型改变成数值问题的主要方法是"离散化"方法．由于需要改成数值问题的数学模型的表达方法不同，"离散化"的方法也不同．但是无论是离散输入或输出结果，一般都是将连续的情况变成在某些点上的值，在以后的学习中将逐步介绍这些方法．

2-1 计算机数值方法

计算机数值方法（简称数值方法）是指解数值问题的计算机上可执行的系列计算公式与数据．一般说来计算公式不一定都属于数值方法．例如，二次方程（2.1）的求根公式

$$x_{1,2}=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a} \tag{2.2}$$

中含有开方运算，它不能在计算机上直接运算，所以它不属于数值方法．如果要将它纳入数值方法，必须将开方运算化成可在计算机上执行的等价运算．将开方运算化成计算机上可执行的等价或近似等价运算的方法有多种，在以后的学习中将会碰到．由于开方运算是经常碰到的运算，所以，一般计算机上均带有开方运算的标准函数过程，例如 D 的开方运算 $\sqrt{D}$，首先将 D 表示成可在计算机上运算的近似数 d，再写成 SQRT(d)（表示 d 开方运算的标准函数过程）．算法设计时遇到计算公式中含有数 d 的开方运算，只要调用开方运算的标准函数过程即可，不必再考虑有关内容的算法设计了．求根公式（2.2）在数值算法中的算式可以写成

$$x_{1,2}=\frac{-b\pm \mathrm{SQRT}(d)}{2a},\ D=b^2-4ac\approx d\ . \tag{2.3}$$

研究数值方法的任务主要有三个：

（1）将计算机不能直接计算的运算，化成在计算机上可执行的运算；

（2）针对数值问题研究可在计算机上执行且行之有效的新系列计算公式；

（3）误差分析，集中在研究数值问题的性态和数值方法的稳定性．

计算机上不能直接执行的数学运算较多，常见的有开方运算、超越函数运算、极限、微分、积分等运算都不能直接在计算机上运算．可将它们化成能在计算机上执行的等价运算或近似等价运算．例如指数运算 e^x，可以化成系列近似运算

$$e^x\approx 1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}\ .$$

微分运算 $y'(x)$，可以化成近似运算

$$y'(x)\approx\frac{y(x+h)-y(x)}{h},$$

其中不少代数运算是经常碰到的常用运算，因此，对这种运算已作了较深入的研究，一般的计算机上都带有这些运算的标准函数过程，如已提到过的开方运算．

研究行之有效的计算机数值方法是本课程讨论的重点，是主要的研究对象．例如，线性方程组的求解方法，虽然在线性代数中已作了较多的研究，但是由于这些方法没有考虑以计算机为工具进行计算的特点，即近似计算和计算复杂性等问题，因此，还必须研究以计算机为工具解线性方程组的数值方法．

由于数值方法是解数值问题的系列计算公式，所以数值方法是否有效，不但与方法本身的好坏有关，而且与数值问题本身的好坏也有关．因此，研究数值方法时，不但需要研究数值方法的好坏，即数值稳定性问题，而且还需要研究数值问题本身的好坏，即数值问题的性态，以及它们的判别问题．由于这两个问题是数值方法中偏于理论的问题，本课程不作重点研究，只作概念性介绍．

数值方法是数值算法中的主要内容，但是它又不是数值算法的全部，那么它们的区别在哪里呢．

2-2 数值算法

通常所称的算法，是指有步骤地完成解数值问题的过程，但是数值算法（简称算法）的解题过程还必须具备以下五个特性：

（1）目的性：算法必须要有明确的目的，其条件和结论均应有清楚的规定．对于数值算法，就是要求给出输入数据和输出数据的明确规定与要求．

（2）确定性：算法必须精确地给出每一步的操作（不一定都是运算）定义，不允许有歧义．例如，用“……，$r=-b+\mathrm{SQRT}(d)$，$x_1=\dfrac{r}{2a}$或$x_2=\dfrac{2c}{r}$，……”求二次方程（2.1）的一个根，由于它中间含有不确定的步骤，因而不能成为算法．要使它成为算法，必须增加条件，即在什么条件下使用算式$x_1=\dfrac{r}{2a}$，在什么条件下用算式$x_2=\dfrac{2c}{r}$．

（3）可执行性：算法中的每个操作都是可以执行的．例如，当$y=0$时，$\dfrac{x}{y}$就无法执行，因此算法中不应包含这样的操作．

（4）有穷性：算法必须在有限步内能够结束解题过程，即算法必须在有限时间内完成．例如

第一步　取$N=0$，

第二步　$N+1\Rightarrow N$，

第三步　转向第二步．

由于这个过程的运算不能结束，所以它不能成为算法．

（5）通用性：算法是针对某一类问题的计算，而不是只适用于解决某个具体例题的计算．

从上面的叙述可知，算法是一类问题的解题过程，不但包含着解题的数值方法，而且还包含着解题的思想、步骤、目的及数据的输入与输出要求．因

此，它具有更大的实用性.

计算机上的算法，按面向求解问题的不同，可分为数值算法和非数值算法. 用于求解数值问题的算法称为数值算法，用于求解非数值问题（如公式推导等）的算法称为非数值算法. 按面向计算机的不同，算法可分为面向串行计算机的串行算法和面向并行计算机的并行算法. 串行算法的解题过程只有一个进程，而并行算法的解题过程可以有两个以上的进程. 由于算法内部的特性不同，还有确定型算法和非确定型算法之分，前者是指计算机在执行算法时，做完每一步后都精确地知道下一步该做什么；后者是做完某步后不能精确地知道下一步该做什么，必须在几种方案中选择一种操作去执行. 例如，智能算法一般都是非确定型算法.

“计算机数值方法”只研究计算机上的串行确定型数值算法. 它是通过按规定顺序执行一个完整且有限的运算序列后，将输入数据向量变成输出数据向量.

从对数值算法的描述可知，(2.3) 不是求解 (2.1) 的算法，而仅是算法中的数值方法，求解 (2.1) 的数值算法将在 2-3 中介绍.

例 给出等差数列 1，2，3，…，10 000 的求和算法.

(1) 取 $N=0$，$S=0$，

(2) $N+1\Rightarrow N$，$S+N\Rightarrow S$，

(3) 若 $N<10\,000$ 转 2，否则，

(4) 输出 N 和 S.

该算法所以没有输入数据，是因为输入数据在算法的第二步中自动生成了. 在算法设计中使用数据自动生成技术有时对算法的空间复杂性很有好处.

对大型数值问题，使用不同的算法其计算复杂性将会大不一样. 例如，对 20 阶线性方程组，用 Cramer 法则作为算法中的数值方法进行求解，其乘、除法运算次数共需约 9.7×10^{20} 次，若用每秒一亿次的计算机计算也要 30 万年；如果用 Gauss 消去法作为数值方法进行求解，乘、除法运算只需约 2 670 次. 这个例子说明，在算法设计中选择数值方法的重要性.

算法设计的主要目的是：

(1) 选择或研制能达到“数值问题”要求的计算精度的数值方法，即稳定性好（见 3-3）的数值方法；

(2) 尽可能提高数值方法的计算速度和少占存储空间，即计算复杂性好；

(3) 方便编码和软件维护.

2-3 算法设计及其表达法

算法是编码的主要依据，算法设计是数值软件中详细设计阶段的主要内