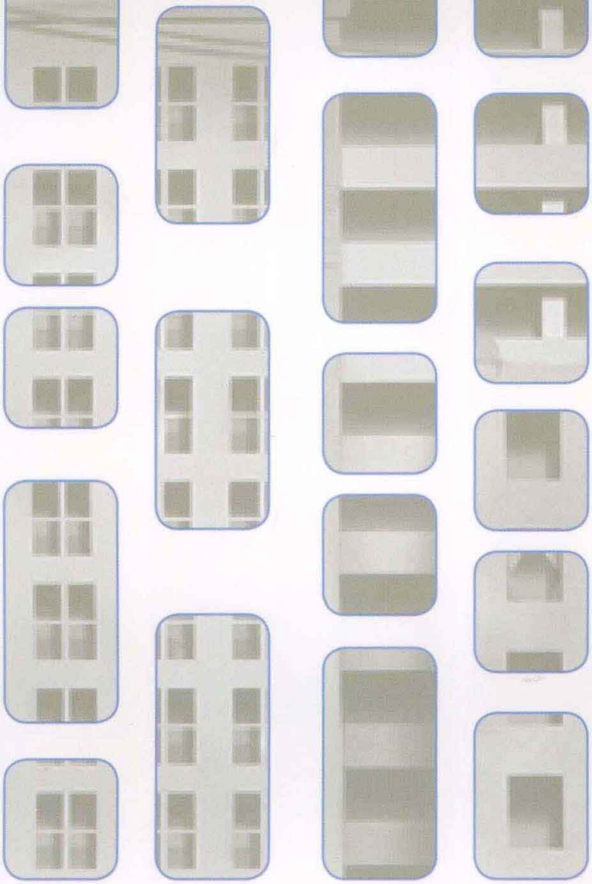

高等学校教材

计算机科学计算

第二版

◎ 张宏伟 金光日 施吉林 董波 编

高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

高等学校教材

计算机科学计算

Jisuanji Kexue Jisuan

第二版

张宏伟　金光日　施吉林　董　波　编

高等教育出版社·北京
HIGHER EDUCATION PRESS　BEIJING

内容提要

本书第一版为普通高等教育“十五”国家级规划教材。本次修订充分考虑了近年来教学改革的新需求，在介绍利用计算机求解数值问题的各种数值方法的同时，更加侧重对于数值计算方法一般原理的介绍。本书叙述由浅入深，简洁严谨，系统性强，易教易学。

本书内容包括矩阵计算与分析、插值与逼近及其应用、数值微积分、常微分方程数值解法和小波等，以及作为附录的相关基础知识简介、计算理论简介和数值实验，每章后附有习题，供任课教师选用。

本书可作为数学与应用数学、统计学专业的本科生，以及理工科非数学类专业的硕士研究生数值计算方法课程的教材，也可供科学计算工作人员学习和参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算机科学计算/张宏伟等编. --2版. --北京:高等教育出版社,2013.8

ISBN 978-7-04-036595-5

I. ①计… II. ①张… III. ①电子计算机-科学计算-高等学校-教材 IV. ①TP301.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 301466 号

策划编辑 张长虹　责任编辑 张长虹　封面设计 张申申　版式设计 范晓红

插图绘制 郝 林　责任校对 刘丽娴　责任印制 朱学忠

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 100120

印　　刷 三河市骏杰印刷厂

开　　本 787mm×960mm 1/16

印　　张 24.5

字　　数 440千字

购书热线 010-58581118

咨询电话 400-810-0598

网　　址 http://www.hep.edu.cn

http://www.hep.com.cn

网上订购 http://www.landraco.com

http://www.landraco.com.cn

版　　次 2005年5月第1版

2013年8月第2版

印　　次 2013年8月第1次印刷

定　　价 38.10元

物 料 号 36595-00

第二版前言

自2005年本书第一版出版以来，已经过了六年多的教学实践。我们根据自己的教学经验并参考任课教师和学生在教学过程中提出的许多有益建议和修改意见，修订出版第二版。新版纠正了第一版中出现的一些错误，并就某些章节（特别是第二版中的第2、3、7章）在内容和文字上作了较多的调整和修订，使之更适合作为数学与应用数学、统计学专业的本科生，以及理工科非数学类专业硕士研究生的教材。为便于教学和学生自学，新版增加了相关基础知识的内容（附录1），并在部分章节中适当增添了例题。对各章中的习题作了相应的调整，在书末给出了部分习题参考答案与提示。考虑到矩阵理论和方法在解决现代工程技术问题中的重要性愈加显著，也为了更好地与第2章的内容相衔接，将第一版中的附录1的内容，调整为第二版中的第3章矩阵分析基础。第一版中的第3、4、5章分别调整为第二版中的第4、5、6章。第一版中的第6章调整为第二版中的第8章特殊类型积分的数值方法，第一版中的第8、9章分别调整为第二版中的第9、10章。

全书共分10章，正文包括矩阵计算与分析、函数逼近与数值微积分、迭代法与常微分方程数值解等内容，正文后面有3个附录。由张宏伟负责第1章、第2章、第3章、第7章、第8章和附录1的编写与修订；金光日负责第4章、第5章、第6章、第9章和附录2的编写与修订；董波负责第10章和附录3的修订。讲完全书的主要内容约需64学时，各校可以根据教学对象的不同，对内容进行适当的选择。

本书第二版的修订和出版得到了高等教育出版社数学分社、大连理工大学教务处、研究生院和数学科学学院的大力支持与资助，并得到任课教师的指导和帮助。高等教育出版社张长虹先生为本书编辑和出版付出了辛勤的劳动。谨此对以上各位表示衷心的感谢。限于作者的水平，书中不当乃至错误之处难免，恳请同行与读者批评指正。

编　者

2012年4月15日

第一版前言

“计算机科学计算”是普通高等教育“十五”国家级规划教材,适于作为数学与应用数学、概率统计专业,以及理工科非数学专业硕士研究生的“数值计算方法”课程的教材。自计算机深入到人类社会的各个领域以来,科学计算、理论计算和实验并列为三大科学方法,特别是它改变了传统的计算数学研究的内容和方法,使数值计算方法与计算机的关系更为密切。为了突出计算机的作用,以及本书与传统数值计算方法有所不同,定名为“计算机科学计算”。它是在2001年8月完成的《计算机现代数值方法》讲义的基础上,经三年多试用和两次修改而成的,目标是培养读者具有以计算机为工具进行科学计算的能力,能掌握初步的数值计算理论基础。本书具有如下特点:

1) 在体系上尽量改变以数学内容为块块的数值方法分割体系,建立以数值方法为内容,并将不同数学内容的方法尽可能串联起来的新体系,不但便于教学,而且有助于学员对公式、方法有连贯性了解,便于记忆。

2) 在教学内容上,精选了常用的数值方法,尽可能引进一些科学与工程技术上有广泛应用前景的现代方法和内容,如小波变换、计算理论(附录)、精细积分法等。考虑到有些学员矩阵知识的不足,增写了矩阵分析介绍(附录),以供参考。

3) 在内容的处理方法上,考虑本教材的学习对象已具有一定的数学基础,对前五章的内容介绍较为精练,对后面的内容着重拓宽知识面,并向学员指明如何进一步学习及学习参考书。

4) 为了缩小数值计算方法与数学软件平台使用上的差异,不但在方法介绍上尽量突出方法的特点及其功能,而且选择有代表性的数值问题让学员使用数学软件包上机进行数值实验,为此编写了数值实验附录。

全书共分九章,包括矩阵计算、函数逼近与数值微积分、迭代法与常微分方程数值解等内容和三个附录。由施吉林、张宏伟主编,并由施吉林、张宏伟、金光日各负责三章和有关附录而完成全书的编写。讲完全书的主要内容约需60学时左右。考虑教学对象的不同,根据需要可以对内容进行适当的删改。

本书的编写和出版均得到了高等教育出版社及其理科分社、大连理工大学

研究生院和应用数学系的大力支持与资助,并得到我们的同事和讲课教师的鼓励和帮助,在此我们一并表示衷心的感谢。限于作者的水平,书中不当乃至错误难免,恳请同行与读者批评指正。

作　者

2004 年 10 月

目　　录

第1章 绪　　论

1.1 计算机科学计算研究的对象和特点

自20世纪最伟大的科学技术发明——计算机问世以来,它已"无孔不入"地深入到人类社会的各个领域,正在改变着人们生活、社会交往、劳动方式、政府决策和科学技术研究方法等,使科学计算、理论计算和实验并列为三大科学方法,特别是改变了传统计算数学的研究方法、内容和它的地位与作用.传统的计算数学主要研究各种计算问题的有效算法及其相关数学理论.而现代意义下的计算数学主要研究的则是在计算机上计算的有效算法及其相关理论,从而使它成为一门新学科——科学计算.为了突出计算机的作用和有别于以往的科学与工程计算,本书定名为"计算机科学计算".算法是本书研究的主要内容.根据课程设置的目的和课时的限制,本课程只能研究基本数值算法,对于偏微分方程数值解法和非数值算法,以及算法的设计与表达等内容只能"弃车保帅"了.

计算机是计算模型的具体体现,凡是用算法(满足一定条件的计算过程)能解决的问题,一定也能用计算机解决;算法解决不了的问题,计算机也解决不了,因此,算法与计算机在功能上具有等价性.任何数学问题只要完成了它的算法设计,就等于该问题可以用计算机进行计算,并得到结论.

当今计算机发展日新月异,但是它的结构基本上还属于 Von Neumann 结构,其基本原理仍未背离 Turing 机,只是根据实际需要进行了重新设计.1945 年第一台计算机问世时,它的运算需要由人来控制,改换为另一道题时需要改造计算机的结构,即计算机的解题要依靠计算机硬件的结构.Von Neumann 1946 年提出了将解题的步骤也放在计算机中,从而可以将解题依靠"硬"办法,改变成依靠"软"办法,即依靠算法的设计.此举不但在技术上是一个飞跃,而且大大地提高了计算速度,为计算机的发展和广泛应用扫清了障碍,因此,直到现在还有人将电子计算机称为 Von Neumann 计算机.

算法,它是解决某一类问题且满足目的性、机械性、离散性、有穷性和可执行性的计算过程,而不是单指解决某个数值问题的数值计算方法,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”.算法中所指的“一类问题”,是根据算法是否可计算来划定的,它将所有问题划分成三类,即算法“计算不了”的问题、算法“实际计算不了”的问题和算法“可以计算”的问题.本书主要研究“可以计算”问题中的微积分、常微分方程和代数等内容中数值问题的算法,简称数值算法.数值算法就其内容而言,应包括数值计算方法(简称数值方法),数据的输入、输出,以及解题的步骤,而且数值方法中的运算只能是四则运算和逻辑运算.将算法的内容进行有机组合而形成完整的解题计算过程就是算法设计.算法用计算机高级语言进行完整的表达就是计算机程序.因此,计算机程序是算法通过计算机语言的一种表达.算法的计算过程可以只有一个进程,也可以有几个进程,前者称为串行算法,对应的计算机称为串行计算机,后者称为并行算法,对应的计算机称为并行计算机.

算法“可以计算”的问题,并不等于该问题用任何具体算法都能计算出满意的结果.事实上,同一个数值问题,对于解决问题的算法甲能计算出满意的结果,对解该问题的算法乙却计算不出满意的结果,甚至“实际计算不了”.对于同样都能计算出满意结果的算法,也有“好坏”之分,在同样计算精度下好坏的标准主要用计算速度和占用计算机内存来区分,即用计算复杂性的好坏来衡量,计算速度快、占用内存少的算法,即时、空复杂性好的算法,称为有效算法.算法好坏的关键是数值方法,而数值方法又随着科学技术的发展而在不断改进和更新,因此,数值方法的好坏具有时代的烙印,过去的好数值方法并不等于就是现代行之有效的数值方法.本书主要研究目前仍然行之有效的数值方法.

例如,线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \qquad\cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

的求解.

早在18世纪Cramer已给出了求解法则:设D为方程组的系数行列式,D_i为系数行列式中的第i列换成$\boldsymbol{b}$后的行列式,若$D\neq 0$,则

$$x_i = \frac{D_i}{D}, \quad i = 1,2,\cdots,n.$$

从理论上讲它是一个求解线性方程组的数值方法,这一结果理论上是非常漂亮的,它把线性方程组的求解问题归结为计算$n+1$个n阶行列式问题.对于行列式的计算,理论上又有著名的Laplace展开定理.这样理论上我们就有了一种非常漂亮的求解线性方程组的方法,且对阶数不高的方程组行之有效.但是到

了20世纪50年代出现电子计算机后,对原有的数值方法的“实际可计算性”引起了充分重视,即理论正确的数值方法在计算机上是否实际可行. 我们做一简单的分析就会发现,由于这一方法的运算量大得惊人,以至于完全不能用于实际计算.

首先,

$$D = \det(\boldsymbol{A}) = a_{i1}A_{i1} + a_{i2}A_{i2} + \cdots + a_{in}A_{in},$$

其中 A_{ij} 表示元素 a_{ij} 的代数余子式. 假设计算 k 阶行列式所需要的乘法运算的次数为 m_k,则容易推出

$$m_k = k + km_{k-1},$$

于是,我们得到

$$\begin{aligned} m_n &= n + nm_{n-1} = n + n[(n-1) + (n-1)m_{n-2}] \\ &= n + n(n-1) + n(n-1)(n-2) + \cdots + n(n-1)\cdots 3 \cdot 2 > n!. \end{aligned}$$

这样,利用 Cramer 法则和 Laplace 展开定理来求解一个 n 阶线性方程组,所需的乘法运算次数就大于 $(n+1)n! = (n+1)!$.

以求解25阶线性方程组为例,如果用 Cramer 法则求解,则总的乘法运算次数将达 $26! = 4.0329 \times 10^{26}$(次). 若使用每秒百亿次的串行计算机计算,一年可进行的运算应为

$$365 \times 24 \times 3600 \times 10^{10} \approx 3.1536 \times 10^{17}(\text{次}),$$

共需要耗费时间为

$$\frac{4.0329 \times 10^{26}}{3.1536 \times 10^{17}} \approx 1.2788 \times 10^{9} \approx 13(\text{亿年}).$$

它远远长于目前已知的人类文明历史! 这种算法“实际计算不了”,从而人们开始研究其他数值方法,例如 Gauss 消去法,虽然它最终还是要用 Cramer 法则来计算结果,但是对它的计算过程已作根本改进,从而使设计出的算法中的乘、除运算仅3060次,这在任何一台电子计算机上都能完成. 随着科学技术的发展,出现的数学问题也越来越多样化,有些问题用消去法求解达不到精度,甚至算不出结果,从而促使人们对消去法进行改进,出现了主元消去法,大大提高了消去法的计算精度. 但是随着求解方程组的阶数越来越高,当达到百万阶、千万阶时,用主元消去法往往也会出现与 Cramer 法则同样的命运,需要寻求新的数值方法,这就是计算机科学计算生命力的来源.

算法的计算机执行是通过程序来完成,程序已从用机器语言发展到用高级语言,现在已从用高级语言发展到使用软件平台,这种发展对与程序密切相关的算法设计也带来了技术上和要求上的变化,原来需要数个语句才能完成的计算任务,现在只需要一个指令就能完成,因此,算法设计也相应地变得简单,但是它们的数值方法可能是一样的. 因此,本书注重数值方法的介绍,在数值方法的内

容选取上不但充分考虑科学与工程计算中应用较广和已展示应用前景的新内容、新方法，尽可能照顾不同读者的需要，而且充分注意内容的实际背景和发挥数学软件平台在教学中的作用.

1.2　误差分析与数值方法的稳定性

在数值计算中误差不可避免，因此通过科学计算求出的数值解一般均为近似解，那么理论(精确)解与数值解之间的所谓偏差就是误差. 由于用数值方法在处理问题时，经常采用的处理方式是将连续的问题离散化、用有限代替无限等，并且数值分析所处理的一些数据，不论是原始数据，还是最终结果，绝大多数都是近似的，因此误差无处不在.

1.2.1　误差的来源与分类

科学计算的主要流程图为：

因此误差的来源主要可分为以下几种：

1. 模型误差

由实际问题抽象出数学模型，要简化许多条件，这就不可避免地要产生误差. 实际问题的解与数学模型的解之间的误差，叫做**模型误差**.

2. 观测误差

初始数据大多数是由观测得到的. 由于观测手段的限制，得到的数据必然有误差，这类误差叫做**观测误差**.

3. 截断误差

从数学问题转化为数值问题的算法时所产生的误差. 如用有限代替无限的过程所产生的误差等均称为**截断误差**.

如：求 e^x 的值，采用的计算方法为

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

我们只能用有限代替无限的计算过程，即取

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

那么，截断误差(余项)为