〔美〕J. THOMAS KING 著
林成森 颜起居 李明霞 译

数值计算引论

SHU ZHI JI SUAN YIN LUN

南京大学出版社

数值计算引论

J.托马斯 金 著

林成森 颜起居 李明霞 译校

南京大学出

1997・南京

内 容 提 要

本书系统地介绍了科学计算中的常用计算方法，并根据现代化计算实践叙述这些内容，特别注意算法在计算机上的实现。全书共七章：数值问题求解的一些概念，非线性方程，线性方程组，插值法，数值积分和数值微分，解初值问题的离散变量法，最小二乘逼近，并附有大量习题。

本书可作高等学校计算机类专业及需要学计算数学的有关专业学生的教材，可供从事计算机应用的科技工作者参考。

J.Thomas King

INTRODUCTION TO

NUMERICAL COMPUTATION

McGrw-Hill, Inc 1984

数值计算引论

J.托马斯 金 著

林成森 颜起居 李明霞 译校

南京大学出版社出版

（南京大学校内）

江苏省新华书店发行　　江苏宜兴印刷厂印刷

开本787×1092　1/32　印张14.375　字数822千

1989年11月第1版　　1997年3月第4次印刷

印数15001—16000

ISBN 7-305-00345-X/O·24　　定价：13.50元

前　言

本书介绍了在现代数字计算机上解题的理论和技巧。重点是对出现在自然科学和工程中某些现象的数学模型，研究其相应的数值解，求解这类问题通常被称作科学计算。

我编写这本书有两个目的：(1) 为实际应用中常见问题的数值解，提供一些简单的、有效的方法。(2) 对科学计算中的一些概念和原则——比如说，问题的条件及求解它的计算方法的条件、误差界和误差估计、精度的阶、浮点算术运算，计算中常见错误的防范、程序设计的安排等，给出了基本的说明。依我看，与其肤浅地讨论大量问题，还不如深入地研究几个经常出现的问题。

本书是为相当于大学二年级或三年级水平的计算方法课编写的。一般情况下，书中内容适合于讲授一学期，其目的是向学生介绍有关科学计算方面的知识。在材料的选取上，注意到学习计算机科学、工程、数学和自然科学的二年级学生能易于理解。那些具有完整的微积分知识和能使用一门程序设计语言(最好是FORTRAN)的人，都能阅读和理解本书。读者如果知道一些关于矩阵和常微分方程的知识，自然是不无益处的，但不了解这方面的知识，对于阅读本书也毫无影响。本书内容是完整的，可是这并不意味着书中对数值方法的各方面都要做详细的分析。相反地，这本书对严密性要求不是很高，而是在通俗易懂上下了很多功夫。每个主题，都有基本理论，这些理论，是通过例子和适当的算法描述来阐

明的。用这种方式，同时也能加深读者对它的理解。有的理论证明，包括的只是一些非常容易理解的基本推导，因而被纳入书中。由于本书的阅读对象是大学二年级学生，因此书中略去了一些很重要的高深内容，其中包括矩阵的特征值问题、最优化以及偏微分方程。

书中的许多内容，例如非线性方程求解、多项式插值、解线性方程组的消去法等，在所有的计算方法书籍中，都是必不可少的。本书与一般的书不同之处，在于根据现代计算实践来叙述这些常见的内容。比方说，对于辛卜生(Simpson)法则，除了在等距点的情形给予一般讨论外，还介绍了建立在辛卜生公式基础上的自适应求积方法。此外，书中还引进了包括求根的混合方法、变步长的Runge-Kutta方法和基样条插值与逼近等现代方法。

书中每节之后，一般都有一组习题。笔者力图设计出一些不同类型的问题（全书大约共有500个），使学生们能从习题中得到有益的计算经验，并且认识到研究条件问题、得到的精确度、相对有效性、计算方法的局限性等问题是必要的。尽管许多习题用笔和纸就可以解出，但是大多数习题还是要求用数字计算机去解。解算大量计算问题也是这门课学习的一项基本内容。较难的习题全用星号标出。除习题外，书中还有几个实习题，各章的实习题都要求学生编写(或修改)并测试一个在本章较为复杂的理论和观点的FORTRAN 程序。采用这些实习题的目的，是为了向学生介绍目前水平的子程序和它的实际应用情况。其中许多实习题要花费大量的时间、精力才能完成，故应该以组为单位去做。

这本书中所有程序都用WATFIV的FORTRAN语言(滑铁卢FORTRAN Ⅳ 语言)写成。特别地，这些程序

中没有用 FORTRAN 77 中的特征结构。这是经过作者的反复考虑才决定的。作出这一决定的原因，是因为在我国多数大学中 WATFIV 仍然是最常见的 FORTRAN 版本。书内的程序都在 AMDAHL 计算机上运行过，该机是采用十六进制浮点数运算的截断机，单字长的精度为 6，双字长的精度为 14。书中的这些程序是以简单、可读、无差错为前提而编写的，并没有考虑其生产质量。

读者如有可能接触一个或更多的商品化的优秀科学软件包，最好去把它搞熟弄透。许多大学的计算中心都有这样的优质软件包。这里提一下我最熟悉的两个软件包，IMSL（即，国际数学及统计程序库）和 LINPACK-EISPACK 程序库的软件包，后者更为专业化。要了解这两个程序的情况，可按以下地址写信询问：

IMSL Inc., 6th Floor, GNB Building, 7500 Bellaire Blvd., Houston, Texas 77036.

本书的内容一学期① 是讲不完的。所以教师可以根据实际情况，灵活制定适当的教学提纲。我给工科学生上为期1/4学年② 的课时，一般只讲1.1至1.4，2.1至2.4，3.1至3.3，4.1至4.3，5.1，5.2，5.3，5.6，6.1至6.3以及7.1这几节。第三章是关于线性方程组的，其内容只有 4.3 节在第七章才用得上。对于一学期③ 的课，教师可以根据学生的情况，增

① 原文 One-term，泛指从开学到放假前这段时间。——译者注。

② 原文 quarter，指$\frac{1}{4}$个学年，将一学年分成四个学期，每个学期就是一个 quarter，一个 quarter 就是$\frac{1}{4}$学年。——译者注。

③ 原文 Semester，是将一年分成两个学期，每个学期就是一个 Semester。——译者注。

加一些微分方程组、样条插值或最小二乘问题等方面的内容。这本书也可以作为两个1/4学年的教学用书。

目前，可供大学二、三年级水平的数值方法课用的教材，大致可分两类：传统的综述书和单算法书。传统的教材在某种程度上就象一本降低要求的迎合那些缺乏数学修养读者的严谨的数值分析课本，难免有点不合时宜。这类书涉及了许多内容，可以称得上面面俱到，但无论从理论的观点来看，还是从近代计算的观点来看，这类书对所涉及的内容都未能进行深入地论述。至于单算法的书籍，是十分注重计算机方面的因素的。它对每个主要的数值问题总是强调一个好算法，并将书中提供的技巧性程序作为黑匣来对待。按照我的观点，这两类书采纳的方式都不是尽善尽美的，最好的方式应该介于这两者之间。也就是，书中理所当然地应该具有许多传统内容，但是这些内容必须包括现代计算实践。不仅如此，一本介绍性的书还应该提供一个对计算方法相当完整的解释，在这个解释中要作出基本分析，以说明该计算方法为什么能达到其目的。我正是努力要写出这样一本书来。

我忘不了我的同事和评论者们对原稿所作的有益的批评和建议，并在此对以下诸位表示感谢：衣阿华州立大学的 James L.Cornette；佛罗里达大学的Bruce H.Edwards；拉特吉斯大学的 Richard S.Falk；德雷克塞尔大学的 Herman Gollwitzer；辛辛那提大学的 Charlas Groetsch；弗吉尼亚工艺学院与州立大学的Lester Lipsky；标准油的研究和开发部的Wendell H.Mills；辛辛那提大学的 Diego Murio；北卡罗来纳州立大学的 Robert Plmmons 以及密苏里·罗那大学的 Frank G.Walters，感谢Connie Spurlock 为本书及其前几稿的手稿作了非常好的打字工作，辛

辛那提大学给我免去了一学期的教学任务，使我能集中精力写出稿子的一个重要部分。McGraw-Hill公司的工作人员在此书的出版过程中，向我提供了大力的合作与帮助。最后，我还要感谢我妻子Susan，感谢她在我编书的这三年中的耐心和理解。

J. 托马斯 金

目　录

1

数值问题求解的一些概念

传统上数学是一种固有的表达形式，它是从自然科学和工程技术问题中抽象出来的。事实上，这些领域中引出的许多问题，促进了数学各个分支的发展。近年来，数学在解决经济学、医学、心理学和企业管理等科学中的问题时，起了越来越大的作用。很清楚，出现这种情况的主要原因是由于高速电子数字计算机的发展。在 20 世纪 40 年代，人工计算需要几个月或几年的问题，现在用计算机计算，几秒钟即可完成。因此，40 年前许多难以处理的问题，现在借助于数字计算机就能解决了。

1.1 引言和数学预备知识

在各个不同领域中产生的数学问题，具有非常复杂的形式，往往不能用解析的方法来解决。这些问题包括许多相互联系的因素，使人难以判断哪些因素是重要的，哪些又是无关紧要的。这些领域内的研究工作者，根据他们学科的一些基本原则忽略某些方面，把原来的问题，简化为容易处理的形式。通过分析这个被简化的问题，研究工作者对原来的问题，有了深入的定性了解。简化原来问题的过程，可能是在各种

各样的简化假设下，重复多次。然而，特别当我们要求定量的信息时，这样一种处理方法常常是不充分的。我们概括数值问题求解的各个步骤，是会得到教益的。

1. **数学模型** 这一步是将原来问题用数学语言叙述出来，就是决定自变量和因变量及建立它们之间的关系。这个过程，可能归结为一个方程组，一个函数的极小化，一个积分计算，含有一个未知函数及其一阶或高阶导数的一个方程（微分方程）等。

2. **简化** 根据某些规则，实际经验和已有的计算经验的适当原则，来简化得出的模型。若有必要，使其成为一个解实际可求得并且提供某些具体需要的信息的适定数学问题。

3. **数值方法** 建立和简化数学模型之后，为了求它的近似解，选取一个或几个数值计算方法。对所选的方法，希望有适当的精度、有效性和稳定性，特别是进行计算之前，力图回答几个问题：

（a）所用的方法是否足够精确？

（b）方法的计算次数会不会太多？程序实现是不是方便？

（c）方法对数据的微小摄动反应是否灵敏？

假使这三个问题得到肯定的回答，就考虑实现所选方法的算法。

4. **编写程序** 这一阶段是把算法译成计算机程序。一般说，这个程序是用高水平语言，如 FORTRAN 语言来写的。程序写成以后再检验和调整，以保证它的正确性。

5. **计算** 这一阶段，先用各种各样的数据去考验程序，为了评估数值解的质量，将这些试验得出的结果与已知结果以及问题的基本原理进行对照。若是满意的，再从提高效率、

简化及典型化方面来加工此程序．加工后构成标准文件，以便其他人使用。若通过检验，结果不满意，则返回到第2或第3阶段去复查。

本书的内容多数是3和4两个阶段的问题．我们从一个适定问题出发，考虑一个或几个求其数值解的方法。我们力图分析和试验这些方法，特别关心它们的有效性、精度和稳定性(条件)。本教科书包括了这些数值方法的计算机实现．

本书要用到微积分的一些基本结果，为了方便读者，我们扼要地回顾一下这些基本的数学结果。我们认为读者是熟悉微积分的一些概念，诸如函数、极限、连续、微分和积分，特别是熟悉序列(许多数值方法是用叠代法，因而产生一些逼近序列)。下述一系列定理可以在任何一本好的微积分书中找到。

定理1.1　介值定理

假设 f 是闭区间 $[a, b]$ 上的一个连续函数，如果 L 是 $f(a)$，$f(b)$ 之间的任一数，那么在 (a, b) 中存在一点 c，使得 $f(c)=L$。

图 1.1 是这个定理的图解．

例1.1　假设我们要确定方程 $x^5-2x^3=7.2$ 是不是有

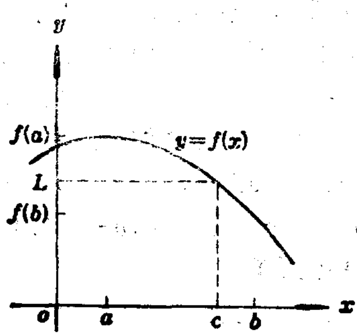

图1.1

一个解。如果我们定义 $f(x)=x^5-2x^3-7.2$，那么求得 $f(0)=-7.2$，$f(2)=8.8$。因为 $f(0)<f(2)$，故有一点 $c\in(0,2)$，使得 $f(c)=0$。所以给定的方程至少有一个解。

例 1.1 给出的方法，常常用来确定一个方程有解。我们把看到的现象写成如下推论。

推论1.1 在定理 1.1 的假设以及 $f(a)f(b)<0$ 的条件下，至少存在一点 $c\in(a,b)$ 使得 $f(c)=0$。

下面的结果指出，闭区间上的连续函数，达到它的最大和最小值。

定理1.2 极值定理

假设 f 在 $[a,b]$ 上连续，那么存在点 x_0，$x_1\in[a,b]$，使得对于 $[a,b]$ 中的一切 x，有 $f(x_0)\leqslant f(x)\leqslant f(x_1)$。

如果对区间 I 上一切 x，存在一个数 $M>0$，使得 $|f(x)|\leqslant M$，我们就说函数 f 在区间 I 上是有界的。数 M 称为 f 在 I 上的一个**界**。如果 f 如同定理 1.2 中的一样，我们可以取 $M=\max\{|f(x_0)|,|f(x_1)|\}$ 为 f 在 $[a,b]$ 上的一个界，这样，在闭区间上的连续函数是有界的。

例1.2 在 $[a,b]$ 上确定 $g(x)=(x-a)(x-b)$ 的一个界。由于 g 是连续的，故我们知道它是有界的。求得 $g'(x)=2x-(a+b)$，因而 $x^*=(a+b)/2$ 是 g 的一个驻点。当 $x>x^*$ 时，$g'(x)>0$，当 $x<x^*$ 时，$g'(x)<0$，可见 g 在 x^* 左边是减少的，在 x^* 的右边是增加的。由于 $g(a)=g(b)=0$，对一切 $x\in[a,b]$，有 $0\geqslant g(x)\geqslant g(x^*)=-(b-a)^2/4$。所以在 $[a,b]$ 上 g 的一个界是 $M=(b-a)^2/4$。

定理1.3 中值定理

假设 f 在 $[a,b]$ 上连续，且在 (a,b) 内可微，那么存在一点 $c\in(a,b)$，使得

$$f(b)-f(a)=f'(c)(b-a)$$

成立。

从图 1.2 看到，中值定理给出一个点 c，在这一点，f 的切线平行于连接$(a,f(a))$，$(b,f(b))$的割线。

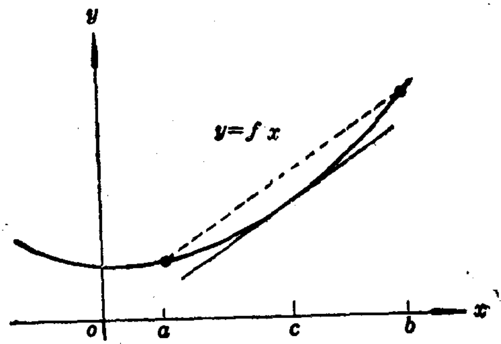

图1.2

定理 1.3 的一个重要的特殊情形是：当 $f(a)=f(b)$时，存在一点 $c\in(a,b)$，使得 $f'(c)=0$。这叫做罗尔(Rolle)定理。

例1.3 我们证明方程 $x^3-3.1x+2=0$ 在(0,1)内恰有一个解。令 $f(x)=x^3-3.1x+2$，我们求得 $f(0)=2>0$，$f(1)=-0.1<0$。由推论 1.1，该方程在(0,1)内至少有一个解。我们假设这个方程在(0,1)内有两个解，比方说 x_1 和x_2。据罗尔定理，在 x_1 和 x_2 之间存在一点 c，使得

$$f(x_1)-f(x_2)=0=f'(c)(x_1-x_2)$$

因此 $f'(c)=0$。然而对一切 $x\in(0,1)$，$f'(x)=3x^2-3.1<0$，这就出现了矛盾。所以在(0,1)内，该方程不可能多于一个解。注意到 $f'(x)<0$，意味着 f 的图形在(0,1)内严格递减。很清楚，一个严格递减函数的图形和 x 轴不可能有多于