普通高等教育"十一五"国家级规划教材

科学计算及其软件教学丛书／石钟慈主编

数值计算方法

黄云清　舒　适
陈艳萍　金继承　文立平　◎编著

科学出版社
www.sciencep.com

普通高等教育“十一五”国家级规划教材

科学计算及其软件教学丛书

数值计算方法

黄云清　舒　适
陈艳萍　金继承　文立平　编著

科学出版社
北　京

内 容 简 介

本书为“科学计算及其软件教学丛书”之一，为普通高等教育“十一五”国家级规划教材. 主要内容包括函数的数值逼近（代数插值与函数的最佳逼近）、数值积分与数值微分、数值代数（线性代数方程组的解法与矩阵特征值问题的计算）、非线性（代数与超越）方程的数值解法、最优化方法以及常微分方程（初、边值问题）数值解法. 除以上基本内容之外，本书还介绍了广泛应用于实际问题的随机统计方法之一——蒙特卡罗（Monte Carlo）方法，以及当今求解大规模科学工程计算问题最有效的算法之一的多层网格法，以便读者参考. 通过对它们的讨论，使读者掌握设计数值算法的基本方法，为在计算机上解决科学计算问题打好基础.

本书可以作为信息与计算科学、数学与应用数学专业本科生以及计算机专业、通信工程等工科类本科生及研究生的教材，也可供从事数值计算研究的相关工作人员参考使用.

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/黄云清等编著. —北京：科学出版社，2009
(科学计算及其软件教学丛书)
普通高等教育“十一五”国家级规划教材
ISBN 978-7-03-023428-5
Ⅰ. 数… Ⅱ. 黄… Ⅲ. 数值计算-计算方法-高等学校-教材 Ⅳ. O241
中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008) 第 181894 号

责任编辑：李鹏奇　李晓鹏／责任校对：陈丽珠
责任印制：张克忠／封面设计：耕者设计工作室

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

北京智力达印刷有限公司 印刷

科学出版社发行　各地新华书店经销
*
2009 年 1 月第 一 版　开本：B5(720 × 1000)
2009 年 1 月第一次印刷　印张：22 1/2
印数：1—4 000　字数：422 000

定价：34.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换〈新伟〉)

《科学计算及其软件教学丛书》序

随着国民经济的快速发展，科学和技术研究中提出的计算问题越来越多, 越来越复杂. 计算机及其应用软件的迅猛发展为这些计算问题的解决创造了良好的条件, 而培养一大批以数学和计算机为主要工具, 研究各类问题在计算机上求解的数学方法及计算机应用软件的专业人才也越来越迫切.

1998 年前后, 教育部着手对大学数学专业进行调整, 将计算数学及其应用软件、信息科学、运筹与控制专业合并, 成立了 "信息与计算科学专业". 该专业成立之初, 在培养目标、指导思想、课程设置、教学规范等方面存在不少争议, 教材建设也众说纷纭. 科学出版社的编辑曾多次找我, 就该专业的教材建设问题与我有过多次的讨论. 2005 年 11 月在大连理工大学召开的第九届全国高校计算数学年会上, 还专门讨论了教材编写工作, 并成立了编委会. 在会上, 编委会就教材编写的定位和特色等问题进行了讨论并达成了共识. 按照教育部数学与统计学教学指导委员会起草的 "信息与计算科学专业教学规范" 的要求, 决定邀请部分高校教学经验丰富的教师编写一套教材, 定名为 "科学计算及其软件教学丛书". 该丛书涵盖信息与计算科学专业的大部分核心课程, 偏重计算数学及应用软件. 丛书主要面向研究与教学型、教学型大学信息与计算科学专业的本科生和研究生. 为此, 科学出版社曾调研了国内不同层次的上百所学校, 听取了广大教师的意见和建议. 这套丛书将于今年秋季问世, 第一批包括《小波分析》、《数值逼近》等十余本教材. 选材上强调科学性、系统性, 内容力求深入浅出, 简明扼要.

丛书的编委和各位作者为丛书的出版做了大量的工作, 在此表示衷心的感谢. 我们诚挚地希望这套丛书能为信息与计算科学专业教学的发展起到积极的推动作用, 也相信丛书在各方面的支持与帮助下会越出越好.

石钟慈

2007 年 7 月

前　言

1998 年, 教育部调整了数学学科专业的数量与名称, 将原来的七个专业合并为两个专业, 即数学与应用数学专业和信息与计算科学专业, 原统计学专业与经济类的统计学合并形成统计学类的统计学专业, 从而为进一步淡化专业、拓宽培养口径奠定了基础.

信息与计算科学专业涵盖了计算数学、信息科学、运筹学和控制论四个主干学科, 其中计算数学是本专业中历史较长的学科. 在新的专业规范中, 数值计算方法 (或数值分析) 是信息与计算科学专业的一门必修课.

信息与计算科学专业正式设立后, 许多院校都对其专业内涵、教学目标和课程设置等问题作了认真的研讨. 2005 年大连召开的第九届全国高校计算数学年会专门讨论了教材建设问题, 决定由石钟慈院士牵头, 与科学出版社合作, 出版一套科学计算及其软件教学丛书. 当时决定由我们承担《数值计算方法》教材的编写工作. 2006 年本书被列为普通高等教育 "十一五" 国家级规划教材. 经过近三年的努力, 教材终于可以和读者见面了.

本书编写组在湖南省及湘潭大学 "计算数学及其应用软件专业核心课程的教学内容体系研究和实践"(1997~2000)、"信息与计算科学专业教学计划的研究与实践"(2003~2005) 等教改课题的支持下, 曾编写了湖南省高等教育 21 世纪课程教材《数值计算方法》(2002 年 6 月由湖南科技出版社出版), 该书自 1999 年开始已在湘潭大学连续使用了 6 届, 并且被国内多所高校采用. 此次新编的《数值计算方法》在原有基础上作了较大的改动: 增加了最优化方法一章, 对其他章节的内容组织与叙述方式进行了调整以适应新的要求. 更新达 60%以上, 有的章节已面貌一新, 如线性代数方程组求解等. 原书的主编之一傅凯新教授由于年事已高不再参与新版教材的编写工作, 在此对他前期工作的贡献表示诚挚的感谢.

本书的读者对象主要为信息与计算科学专业的本科生, 同时也兼顾到数学与应用数学及其他理工类非数学专业的本科生及研究生, 所以内容的选取既不同于传统计算数学专业所用教材, 也有别于只针对工科类数值分析课程的教材. 在内容组织上, 首先体现作为专业基础课程教材的基础特性, 将传统的数值分析课程基本内容 (如多项式插值、最佳逼近、数值积分、代数方程的解法、非线性方程的解法、最优化方法、特征值问题的解法、常微分方程的数值解法等) 纳入进来, 使学生通过学习该课程, 掌握传统数值计算方法的基本内容; 另一方面, 将一些现代的计算方法 (如多重网格法、Monte Carlo 方法等) 纳入教材, 使学生在学习现代计算方法的同时, 了解数值计算方法的现状及发展趋势. 在内容表述上, 用现代的方法从新的视角介绍某些传统的基本内容, 如将现代子空间迭代校正的思想引入迭代法的介绍中, 使学生在学习传统数值计算方法基本内容的同时, 也能了解一些现代数学的思想和方法, 以提高学生的现代数学素养.

本书采取方法介绍与理论分析并重的模式, 着力培养学生实际应用与理论分析两方面的能力. 内容采用模块化组织形式, 全部讲授的建议学时为 108, 有些专业也可根据具体情况选择部分内容进行讲授.

限于编者的学识水平, 虽经长时间的努力, 书中疏漏之处仍难避免, 恳请使用本书的师生和其他读者提出宝贵的意见, 以便进一步修订和完善, 我们不胜感谢!

编　者

2008 年 8 月于湘潭大学

科学出版社 高等教育出版中心

教学支持说明

科学出版社高等教育出版中心为了对教师的教学提供支持，特对教师免费提供本教材的电子课件，以方便教师教学。

获取电子课件的教师需要填写如下情况的调查表，以确保本电子课件仅为任课教师获得，并保证只能用于教学，不得复制传播用于商业用途。否则，科学出版社保留诉诸法律的权利。

地址：北京市东黄城根北街 16 号，100717

科学出版社　高等教育出版中心数理出版分社　李晓鹏（收）

联系电话：010-64034725　010-64034725（传真）

Email：mph@mail.sciencep.com

登陆科学出版社网站：www.sciencep.com“教材天地”栏目可下载本表。

请将本证明签字盖章后，传真或者邮寄到我社，我们确认销售记录后立即赠送。

如果您对本书有任何意见和建议，也欢迎您告诉我们。意见一旦被采纳，我们将赠送书目，教师可以免费选书一本。

证　明

兹证明__________大学__________学院/______系第______学年□上□下学期开设的课程，采用科学出版社出版的________________/__________（书名/作者）作为上课教材。任课教师为________________共______人，学生个班共______人。

任课教师需要与本教材配套的电子教案。

电　话：________________________

传　真：________________________

E-mail：________________________

地　址：________________________

邮　编：________________________

学院/系主任：__________（签字）

（学院/系办公室章）

____年___月___日

新书预告

本书将推出配套学习辅导《数值计算方法习题精析》。

该书所选题目以黄云清教授等编写的《数值计算方法》教材的习题为主，适当增补一些典型性且综合性较强的习题。选题力求难易层次分明，涵盖知识点全面；解题过程力求思路清晰、逻辑严密、步骤简洁、注意引导和启发，旨在帮助读者把握基本概念和掌握基本解题方法，并在此基础上融会贯通，学会用计算机解决实际问题的能力。

该书可供信息与计算科学、数学与应用数学专业本科生以及计算机、通讯工程等工科类专业本科生及研究生学习数值计算方法课程时阅读和参考；也可供从事数值计算方法或数值分析教学工作的教师参考；对参加对数值计算方法内容有要求的各类考试考生和工程技术人员也是一本很有帮助的复习参考书。

该书将于 **2009** 年 **9** 月正式出版，欢迎广大读者与当地书店联系购买，或通过科学出版社门市部学士书店(电话：010-64000246，64017892)订购。

目　录

第1章　引　　论

1.1　数值计算方法和它的主要内容

数值计算方法是数学的一个分支, 也称为计算方法或数值分析. 数值计算方法以各类数学问题的数值解法为研究对象, 包括对方法的推导、描述以及对整个求解过程的分析, 并由此为计算机提供实际可行、理论可靠、计算复杂性好 (指占用内存空间少及运算次数少) 的各种数值算法.

数值计算方法是一门紧密联系实际的学科. 随着计算机科学和技术的迅速发展, 科学和工程技术中遇到的各类数学问题都有可能通过数值计算方法加以解决. "科学与工程计算" 已经成为平行于理论分析和科学实验的第三种科学手段. 现今无论在传统学科领域还是在高新科技领域均少不了数值计算这一类工作, 特别是它已成为优化工程设计, 进行数值模拟试验以代替耗资巨大的真实实验的一种重要手段.

从实际问题中抽象出来的数学问题, 即我们常说的数学模型, 大多都与求解微分方程、线性与非线性代数系统、数据处理、统计、优化问题等有关. 数值计算方法这门课将围绕这些数学问题的解决提供给大家一些有关基本数值算法设计、分析的训练, 对一些基本概念、基本原理、基本思想、基本技能技巧有较全面地掌握. 本书的内容包括函数的数值逼近 (代数插值与函数的最佳逼近)、数值积分与数值微分、数值代数 (线性代数方程组的解法与矩阵特征值问题的计算)、非线性 (代数与超越) 方程的数值解法、最优化方法以及常微分方程 (初、边值问题) 数值解法. 除以上基本内容之外, 本书还用少量篇幅介绍了广泛应用于实际问题的随机统计方法之一 —— 蒙特卡罗 (Monte Carlo) 方法, 以及当今求解大规模科学工程计算问题最有效的算法之一的多层网格法, 以便读者参考. 通过对它们的讨论, 能够使人们掌握设计数值算法的基本方法, 为在计算机上解决科学计算问题打好基础.

在学习数值计算方法的时候, 首先要注意掌握方法的基本原理和思想, 并要注意方法处理的技巧及其与计算机的结合; 此外还应认真进行必要的数值计算训练.

1.2　计算机中数的浮点表示

任何一个科学计算实际问题在运用数值计算方法形成数值算法后, 必须通过计算机进行加、减、乘、除及逻辑等运算来实现. 因此了解数在计算机中的表示及其

运算是必须的.

1.2.1　以 β 为基的数系

以 β 为基的数 (β 进制数) 可表示为

$$\begin{aligned} x &= \pm\left(a_{n-1}\beta^{n-1}+a_{n-2}\beta^{n-2}+\cdots+a_0\beta^0+a_{-1}\beta^{-1}+a_{-2}\beta^{-2}+\cdots+a_{-m}\beta^{-m}\right) \\ &= \pm\left(a_{n-1}a_{n-2}\cdots a_0.a_{-1}a_{-2}\cdots a_{-m}\right)_\beta, \end{aligned} \tag{1.1}$$

这里, $0\leqslant a_k<\beta$ 为正整数.

(1) 十进制数 ($\beta=10$). 例如,

$$(364)_{10}=3\times10^2+6\times10^1+4\times10^0,$$

$$(5188.51)_{10}=5\times10^3+1\times10^2+8\times10^1+8\times10^0+5\times10^{-1}+1\times10^{-2}.$$

(2) 二进制数 ($\beta=2$). 例如,

$$\begin{aligned} (10101)_2 &= 1\times2^4+0\times2^3+1\times2^2+0\times2^1+1\times2^0 \\ &= (21)_{10}, \\ -(10.101)_2 &= -(1\times2^1+0\times2^0+1\times2^{-1}+0\times2^{-2}+1\times2^{-3}) \\ &= -(2.625)_{10}. \end{aligned}$$

(3) 十六进制数 ($\beta=16$), 十六个数字为 0, 1, 2, $\cdots$, 9, A, B, C, D, E, F. 例如,

$$\begin{aligned} (5\mathrm{C}4)_{16} &= 5\times16^2+\mathrm{C}\times16^1+4\times16^0 \\ &= 5\times16^2+12\times16^1+4 \\ &= (1476)_{10}. \end{aligned}$$

八进制也是一种常用的进制.

1.2.2　数的浮点表示

在科学计算中常把数, 如

$$0.0050618,\quad 0.027612,\quad 276.4608$$

等, 分别表示成

$$0.50618\times10^{-2},\quad 0.27612\times10^{-1}$$

和

$$0.2764608\times10^3.$$

这样一来, 一个数的数量级就一目了然. 在这种表示方法中, 小数点的位置决定于后边那个 10 的指数 (称为阶码). 这种允许小数点位置浮动的表示方法称为数的浮点表示. 显然一个数可以有不同的浮点表示. 例如, 8253 可以表示成 0.8253×10^4,

也可以表示成 0.08253×10^5. 为了确定起见, 我们将浮点数的表示规格化, 即要求小数点后第一位数字非零, 这样的浮点表示称为规格化的浮点数.

β 进制下, 规格化的浮点数可以表示成

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

其中, $1 \leqslant a_1 < \beta$, $0 \leqslant a_i < \beta, i = 2, 3, \cdots, s$. 称 $0.a_1 a_2 \cdots a_s$ 为浮点数的尾数部分, $s \geqslant 1$, 大小不限制. c 为阶码, 它为 β 进制整数. 例如,

$$0.1010101 \times 2^{101}, \quad 0.10001001 \times 2^{100},$$

$$0.11101 \times 2^{-010}, \quad 0.110011 \times 2^{-001}$$

等, 都是规格化的二进制浮点数.

1.2.3 计算机中数的浮点表示

计算机中参与运算的数也是用浮点表示的, 仍如 (1.2) 的形式. 但由于计算机位数的限制, 数的浮点表示尾数部分位数则是固定的, 如 t 位, t 也称为计算机的字长. 阶码 c 的大小也有确定的范围: $m \leqslant c \leqslant M$, 一般 $m = -M$, 或 $m = -M + 1$.

受具体计算机限制的浮点数称为机器数, 它们构成该机器的数系, 并由 (β, t, M, m) 所确定, 记为 $F(\beta, t, m, M)$. 因此计算机的数系实际上仅是实数系 $\mathbb{R}$ 的一个小的离散子集. 设 $f \in F(\beta, t, m, M)$, 则有

$$\beta^{m-1} \leqslant |f| \leqslant (1 - \beta^{-t})\beta^M.$$

当实数 $|x| > (1 - \beta^{-t})\beta^M$ 时, 机器就出现上溢而中断运算; 当 $|x| < \beta^{m-1}$ 时, 称为下溢, 机器自动作为 (机器) 零处理. 对于区间 $[\beta^{m-1}, (1 - \beta^{-t})\beta^M]$ 中的任一数

$$x = \pm(0.a_1 a_2 \cdots a_t \cdots)\beta^c.$$

若 $x \bar{\in} F(\beta, t, m, M)$, 为了能在计算机中参与运算, 机器将自动用机器数 f 表示, 记为 $f = fl(x)$, 这就定义了 $G = [\beta^{m-1}, (1 - \beta^{-t})\beta^M]$ 到 $F(\beta, t, m, M)$ 的函数 fl(其中 fl 是 floating point 的缩写, 表示浮点机器数).

任何实数 $x \in G$, 现有计算机是按下述两种方法之一得到 $fl(x)$ 的.

(1) 舍入. $fl(x)$ 取成与 x 最接近者

$$|x - fl(x)| = \min_{f \in F} |x - f|. \tag{1.3}$$

这种方法的 $fl(x)$ 实际是这样得到的: 若 $a_{t+1} < \frac{1}{2}\beta$, 则将 a_{t+1} 以后各数舍去, 若 $a_{t+1} \geqslant \frac{1}{2}\beta$, 则将 a_t 改为 $a_t + 1$, 这实际上是通常的四舍五入规则.

(2) 截断. $fl(x)$ 取成为满足 $|fl(x)| \leqslant |x|$ 之误差最小者:

$$|x - fl(x)| = \min_{\substack{f \in F \\ |f| \leqslant |x|}} |f - x|. \tag{1.4}$$

这相当于在 x 的表示中截去 a_{t+1} 及其以后的所有数.

根据 $F(\beta,t,m,M)$ 的定义, 有

(1) 舍入.

$$|x-fl(x)| \leqslant \frac{\beta^{c-t}}{2}. \tag{1.5}$$

(2) 截断.

$$|x-fl(x)| \leqslant \beta^{c-t}. \tag{1.6}$$

每种计算机只采用其中一种规则.

若记

$$u=\begin{cases} \dfrac{1}{2}\beta^{1-t}, & \text{舍入}, \\ \beta^{1-t}, & \text{截断}, \end{cases}$$

则有

$$fl(x)=x(1+\delta), \quad |\delta| \leqslant u. \tag{1.7}$$

事实上, 由 $x\in G$ 可知 $x\neq 0$, 令

$$\delta=\frac{fl(x)-x}{x}. \tag{1.8}$$

由于 $|x|\geqslant \beta^{c-1}$ 以及式 (1.5)、(1.6), 得

$$|\delta| \leqslant \frac{1}{2}\frac{\beta^{c-t}}{\beta^{c-1}}=\frac{1}{2}\beta^{1-t} \quad (\text{舍入})$$

或者

$$|\delta| \leqslant \frac{\beta^{c-t}}{\beta^{c-1}}=\beta^{1-t} \quad (\text{截断}),$$

于是 $|\delta| \leqslant u$, 利用式 (1.8) 可得

$$fl(x)=x(1+\delta).$$

对于计算机而言, 凡介于机器容许的最大数与最小数之间的任何数, 除恰好是机器数外, 一经送入计算机, 即成为近似数参与运算. 1.3 节讨论近似数运算的舍入误差的时候, 式 (1.7) 还将多次用到.

1.3 误差的基本概念

1.3.1 误差的来源

利用计算机作科学计算将要经历以下几个过程: 首先要将实际问题建立数学模型, 其次选择数值计算方法设计数值算法, 最后是在计算机上实现算法得出数值结果. 数学模型是实际问题的数学描述, 它往往是抓住主要因素, 略去一些次要因素, 将实际问题理想化以后所进行的数学概括. 因而数学模型是近似的, 其误差称

为模型误差. 此外在数学模型中往往包含了若干参变量, 如温度、长度、电压等, 这些量往往是通过观测或实验得来的, 因此也带来了误差. 这种误差, 称为观测误差. 模型误差和观测误差不作为数值计算方法的讨论对象. 当实际问题的数学模型很复杂, 因而不能获得精确解时, 必须提供求近似解的数值算法, 这种算法是通过对原数学模型作某种近似而产生的, 模型的准确解与数值方法准确解之差称为截断误差或方法误差.

例 1.1 已知 $x>0$, 求 e^{-x} 时, 由表达式

$$\mathrm{e}^{-x}=1-x+\frac{1}{2}x^2-\frac{1}{6}x^3+\cdots,$$

取部分和

$$e(x)=1-x+\frac{1}{2}x^2-\frac{1}{6}x^3$$

作为 e^{-x} 的近似值, 有

$$R(x)=\mathrm{e}^{-x}-e(x)=\frac{1}{24}\mathrm{e}^{-\xi}x^4, \tag{1.9}$$

其中 $0<\xi<x$. $R(x)$ 即为利用 $e(x)$ 作为 e^{-x} 近似值时所产生的误差.

例 1.1 很好地解释了 "截断误差" 一词的含义. 截取有限项得出之和近似无穷级数之和时所产生的误差即是截断误差. 许多数值方法的建立正是基于级数展开截取其若干主要的项而得到的. 截断误差是数值计算方法的重点讨论对象.

最后在计算机上实现算法得出数值结果的过程中还应考虑初始数据误差在计算过程中的传播和计算机浮点运算误差的积累. 由于初始数据通常是从测量中得到, 往往带有一定的误差, 这种误差在计算过程中将不断积累最终对计算结果造成影响, 称这种误差为初始值运算的传播误差. 又由于计算机浮点 (机器) 数的有限字长, 计算过程中的数据以及初始数据都是按四舍五入或只舍不入规则截成有限位数的机器数, 由此而引起的计算结果误差, 我们把这种误差称为浮点运算舍入误差 (简称舍入误差). 传播误差和舍入误差也是数值计算方法讨论的对象, 因为它们直接影响到计算结果的精度.

1.3.2 近似数的误差和有效数字

在科学计算中, 数据是最基本的. 任何复杂的计算问题的误差分析, 本质上都将归结为数的误差估计.

定义 1.1 设数 x 是某个量的精确值, 数 x^* 是该量的已知近似值, 记

$$E(x)=x-x^*, \tag{1.10}$$

称 $E(x)$ 为近似数 x^* 的绝对误差, 简称误差.

例如, 若取 $1/3$ 的近似值为 0.3333, 则绝对误差为