中国科学院考研指定参考书

中国科学技术大学数学教学丛书

数值计算方法与算法

（第二版）

张韵华 奚梅成 陈效群 编

科学出版社
www.sciencep.com

中国科学技术大学数学教学丛书

数值计算方法与算法

（第二版）

张韵华　奚梅成　陈效群　编

科 学 出 版 社

北　京

内 容 简 介

本书介绍常用的数值计算方法, 内容包括:插值, 数值微分和数值积分, 曲线拟合的最小二乘法, 非线性方程求根, 解线性方程组的直接法, 解线性方程组的迭代法, 计算矩阵的特征值和特征向量, 常微分方程数值解. 本书例题丰富, 形式多样, 并有 C 语言和 Mathematica 语言的例题和习题.

本书适合高等院校的理工科学生作为教材, 也可作为有关专业的科技工作者的参考书.

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法与算法/张韵华, 奚梅成, 陈效群编. —2 版. —北京: 科学出版社, 2006

(中国科学技术大学数学教学丛书)

ISBN 7-03-016786-4

I. 数… II. ①张… ②奚… ③陈… III. 数值计算-计算方法-高等学校-教学参考资料 IV. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006) 第 003205 号

责任编辑: 姚莉丽 / 责任校对: 鲁 素
责任印制: 张克忠 / 封面设计: 陈 敬

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
新蕾印刷厂 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2000 年 1 月第 一 版 开本: B5(720×1000)
2006 年 5 月第 二 版 印张: 14
2006 年 5 月第十一次印刷 字数: 258 000

印数: 28 101—32 100

定价: 20.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈路通〉)

第一版前言

随着现代科学技术的发展和计算机的广泛使用, 数值计算方法不仅要面对数学工作者、数值计算专家, 还要更多地面对一般的工程技术人员和各行各业的设计人员.

为了顾及一般读者, 本书力求通俗易懂、简洁实用. 其内容按插值、数值微分和积分、曲线拟合、非线性方程求根、解线性方程组、计算特征值和特征向量、常微分方程数值解的顺序安排. 第 9 章给出调用 Mathematica 软件直接做数值题目的部分样例. 全书约需 40 学时. 本书介绍的各类问题的计算方法都有相对的独立性, 可以根据不同的教学对象和要求选择其中的某些章、节和知识点, 书中以 * 标记略有难度的内容以供选用.

本书以能正确选择计算对象的计算方法为前提, 领会计算原理和掌握计算步骤为主干线, 淡化数学定理证明中的严谨性部分, 强化数值方法与计算机技术的应用能力训练, 为此取书名为 "数值计算方法和算法". 希望读者通过本书的学习掌握数值计算中的基本思想和方法, 培养自行处理常规数值计算问题的能力, 为深入学习数值方法打好基础, 也为部分读者调用各类程序包解决问题创造条件.

本书 1999 年 9 月出版, 此次重印主要做了修订和勘误工作; 在内容上增加了少量的在应用软件中的实用算法, 例如: 用牛顿插值构造埃尔米特插值的方法; 汇集了部分上机作业题, 供学生上机实习时选用.

本书是作者在中国科学技术大学多年讲授计算方法课程的基础上编写而成的, 可作为一般理工科 (非数学系和计算机系) 以及工商科专业的计算方法教材, 也可作为工程技术人员的参考用书.

本书的插图和大部分程序由中国科学技术大学数学系陈长松博士完成, 部分程序和例题由窦斗硕士完成. 在此表示感谢.

编者还要向使用本教材的教师和学生表示深切的谢意, 感谢他们对本书提出的修订意见. 最后, 感谢科学出版社和本书责任编辑对出版本书所做的工作.

编　者

第二版前言

数值计算方法, 是一种研究并解决数学问题的数值近似解方法, 简称计算方法. 计算数学中的数值计算方法是解决 "计算" 问题的桥梁和工具. 计算机是数值计算方法最常用的计算工具, 随着计算机技术的迅速发展和普及, 计算方法课程已成为所有理工科学生的必修课程. 我们知道, 计算能力是计算工具和计算方法的效率的乘积, 提高计算方法的效率与提高计算机硬件的效率同样重要. 科学计算已用到科学技术和社会生活的各个领域中. 目前, 理论方法、实验方法和数值计算方法称为科学研究并列的三种方法.

本书覆盖了计算方法最基本的内容, 包括插值、数值微分和数值积分、曲线拟合的最小二乘法、非线性方程求根、解线性方程组的直接法、解线性方程组的迭代法、计算矩阵的特征值和特征向量、常微分方程数值解. 最后一章给出用符号计算语言 Mathematica 做各章计算方法的例题.

本书参考了国内外多本计算方法教材. 例如, 由教育部高等教育司推荐的国外优秀信息科学与技术系列教学用书; Richard L. Burden 的《数值分析》(Numerical Analysis), 并吸取了这些书的优点, 例如, 给出大部分方法对应的算法, 通过算法缩短数学方法和计算机实现的距离.

本书例题丰富, 通过典型例题帮助学生进一步理解计算对象、计算公式、限定条件和计算步骤. 学习计算方法中的逼近和迭代等数学思想, 掌握常用的数值方法, 获取近似计算的能力, 激发学生的学习兴趣, 扩大学生数值计算的知识面, 并能触类旁通地应用到各自的科研和技术领域中, 培养学生的数学综合分析能力和计算能力.

本书在每章的 "程序示例" 中, 给出用 C 语言编写的方法的程序和计算实例, 这些程序基于数值计算公式, 没有进行优化处理, 其目的是通过编程上机, 观察方法动态运行过程, 训练和提高计算机应用技术能力和水平. 在编程中领会和理解方法的计算要领和步骤, 在编程中思考问题的条件和限制范围, 在编程中理解一般问题和特殊问题的区别, 在编程中体验数值实验方法.

本书从 2000 年出版后已被多所学校选用作为教材, 在此深表感谢. 为了给要深入学习计算方法的学生做铺垫, 第二版增加了高斯积分简介和 "QR 初步" 等标注星号 (*) 的内容供选择.

本书适合作为 40 学时的计算方法课程教材, 为了适应不同层次的读者, 少部分标注星号 (*) 的内容可作为选修部分, 主讲教师可根据专业需求增加或减少各章节

内容.

本书“程序示例”部分由中国科学技术大学数学系博士生陈长松和窦斗完成.在此表示感谢. 编者还要向所有使用本教材的教师和学生表示深切的谢意, 感谢他们对本书提出的建议和修订意见, 我们要在修订中不断完善本书. 最后感谢中国科学技术大学教务处和科学出版社对本书出版的支持.

编　者

2006.3

目录

第0章 绪 论

0.1 数值计算方法与算法

数值计算方法，是一种研究并解决数学问题的数值近似解方法，是在计算机上使用的解数学问题的方法，简称计算方法. 它的计算对象是那些在理论上有解而又无法用手工计算的数学问题，以及没有解析解的数学问题. 例如，解一个有 300 个未知量的线性方程组；计算 6 阶矩阵的全部特征值.

在科学研究和工程技术中都要用到各种计算方法. 例如，在地质勘探、汽车制造、桥梁设计、天气预报和汉字字样设计中都有计算方法的踪影. 在 20 世纪 70 年代，大多数学校仅在数学系的计算数学专业和计算机系开设计算方法这门课程. 随着计算机技术的迅速发展和普及，现在计算方法课程几乎已成为所有理工科学生的必修课程.

计算方法是一门理论性和实践性都很强的学科，计算方法既有数学类课程中理论上的抽象性和严谨性，又有实用性和实验性的技术特征. 计算方法的前提课程是微积分、线性代数、常微分方程和一门计算机语言.

大多数人学习计算方法的目的是为了使用方法，在学习计算方法中，在套用计算公式、修改计算公式和创建计算公式中，都需要不同程度的专业知识和数学基础. 要注重学习计算方法中的逼近和迭代等数学思想和常用手法，获取近似计算的能力，并能触类旁通地应用到各个领域中. 一些有创造力的工程师不仅擅长使用某些计算方法，并能创建出简便有效的计算方法. 例如，样条函数、快速傅里叶变换和有限元方法都是有创造力的工程师们创建的，再由数学家们完善这些方法的理论基础，并从理论上进行提高和推广.

从方法的计算公式到在计算机上实际运行，两者之间还有距离，这是数学能力与计算机应用技术能力之间的距离，还与计算机的运行环境和编程工具有关. 为了缩小两者之间的距离，本文将给出部分计算公式的算法描述. 用算法容易准确而简便地描述计算公式，在算法中能简洁地表达计算公式中的"循环"和"迭代"等操作. 有了方法的算法，将它转化成 C 或 PASCAL 等语言的程序上机运行也就容易了.

在学习计算方法过程中，如果你能用某种语言编制该方法的程序并运行通过，那么有利于准确而深刻地掌握该方法的计算步骤和过程. 书中每章后面都附有 C 语言程序，这些程序基于数值计算公式，没有进行优化处理，其目的是通过编程上机，加深对方法运行过程的理解，训练和提高计算机应用技术能力和水平.

0.2　误差与有效数字

1. 绝对误差与绝对误差界

近似计算必然产生误差, 误差表示精确值与近似值的距离.

定义 0.1　设 x^* 为精确值 (或准确值), x 是 x^* 的一个近似值, 称 $e = x^* - x$ 为近似值 x 的绝对误差或误差.

绝对误差 = 精确值 − 近似值

误差 e 的值可正可负, 如果得不到精确值 x^*, 也就算不出绝对误差 e 的值. 常用限制误差绝对值的范围 ε 描述和控制误差的范围.

定义 0.2　如果精确值 x^* 与近似值 x 的误差的绝对值不超过某正数 ε, 即

$$|e| = |x^* - x| < \varepsilon$$

称 ε 为绝对误差限或误差限.

精确值 x^* 也可表示为 $x^* = x \pm \varepsilon$. 通常, 在误差允许的范围内的近似值 x, 即认为是精确值, 这也是计算中控制循环中止的常用手段.

例 0.1　若经四舍五入得到 $x = 123.456$, 对于数 123.4559, 123.4555, 123.4561, 12.4564 的近似值都是 $x = 123.456$, 即第四位小数大于 5 时, 必然进位到第三位小数; 第四位小数小于 5 时, 必然舍去. 它的误差限是

$$|e| = |x^* - x| < 10^{-4} \times 5 = \frac{1}{2}10^{-3}$$

若 $x^* = 0.0123456$, 则它的误差限是

$$|e| = |x^* - x| < 10^{-8} \times 5 = \frac{1}{2}10^{-7}$$

2. 相对误差与相对误差限

在很多情况下, 绝对误差并不能全面地反映近似程度. 例如, 某电器公司两次进货的某型号电风扇分别为 1000 台和 2000 台, 其中开箱不合格电风扇分别为 8 和 12(绝对误差的值). 不合格率分别为 8/1000=0.8%和 12/2000=0.6 %(相对误差的值), 这说明该电风扇的质量有所提高. 我们把近似值与准确值的比值定义为相对误差.

定义 0.3　设 x^* 为精确值, x 是 x^* 的一个近似值, 称 $e_r = \dfrac{e}{x^*} = \dfrac{x^* - x}{x^*}$ 为近似值 x 的相对误差.

在实际计算中, 有时得不到精确值 x^*, 当 e_r 较小时 x^* 可用近似值 x 代替, 即

$$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x^* - x}{x}$$

$$\textbf{相对误差} = \frac{\text{绝对误差}}{\text{精确值}} \quad \text{或} \quad \textbf{相对误差} = \frac{\text{绝对误差}}{\text{近似值}}$$

相对误差 e_r 的值也可正可负, 与绝对误差一样不易计算, 常用相对误差限控制相对误差的范围.

定义 0.4 如果有正数 ε_r 使得 $e_r = |\frac{e}{x^*}| < \varepsilon_r$, 则称 ε_r 为 x^* 的相对误差限.

产生误差的因素很多, 产生误差的原因主要有:

(1) 原始误差

由客观存在的模型抽象到物理模型产生的误差. 包括模型误差和原始数据误差.

(2) 截断误差

用有限项近似无限项时, 由截取函数的部分项产生的误差, 称为截断误差.

例如, $e^x = 1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^k}{k!}+\cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}$, 在计算中用 $e^x = \sum_{n=0}^{N}\frac{x^n}{n!} \approx \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}$.

(3) 舍入误差

在数值计算中, 通常都按有限位进行运算. 例如, 按照四舍五入的原则, 2/3=0.666667 或 2/3=0.667, 由舍入产生的误差, 称为舍入误差.

在实际计算中的数据通常是近似值, 它们由观察、估计或一些计算而得到, 这些数在计算机表示后也会带来进一步误差, 即误差的积累和传播. 关于误差的传播似乎没有多少统一的理论, 通常积累误差的界是以通例分析为基础而建立的.

3. 有效位数

定义 0.5 当 x 的误差限为某一位的半个单位, 则这一位到第一个非零位的位数称为 x 的有效位数.

例如, x= 12.34 , y = 0.004067 均有 4 位有效数字, 而 3.00 与 3.0000 分别有 3 位和 5 位有效位数.

有效位的多少直接影响到近似值的绝对误差和相对误差, 因此, 在计算中要注意保持一定的有效位数. 例如, 避免同符号接近的两个数相减.

0.3 约束误差

1. 选择收敛的稳定的方法

对同一问题选择不同的数值计算方法, 可能得到不同的计算结果. 在计算方法中, 除了给出方法的数值计算公式, 还要讨论计算公式的收敛性、稳定性和截断误差的特性. 选择收敛性要求低、稳定性好的方法是约束误差扩张最重要的措施. 例如, 样条插值函数比高次多项式的效果好得多, 是构造插值函数的首选方法.

2. 提高数值计算精度

数值在计算机中存放的位数称为字长. 有限位的字长是带来舍入误差和抑制数值计算精度的根源. 对同一种方法, 在字长大的计算机上的计算效果要比在字长小的计算机上优越.

在计算机上, 用同一种数值计算方法对数据选用不同的数值类型, 有时会直接影响到计算效果. 例如, 对病态的线性方程组, 采用单精度数据使用消元方法, 其数据解大大失真, 而用双精度数据有时却可得到满意的数值解.

0.4 范 数

0.4.1 向量范数

在一维空间中, 实轴上任意两点 a, b 的距离用两点差的绝对值 $|a-b|$ 表示. 绝对值是一种度量形式的定义.

范数是在广义长度意义下, 对函数、向量和矩阵的一种度量定义. 任何对象的范数值都是一个非负实数. 使用范数可以测量两个函数、向量或矩阵之间的距离. 向量范数是度量向量长度的一种定义形式. 范数有多种定义形式, 只要满足 (0.1) 中的三个条件即可定义为一个范数. 同一向量, 采用不同的范数定义, 得到不同的范数.

对任一向量 $X \in \mathbf{R}^n$, 按照一个规则确定一个实数与它对应, 记该实数为 $\|X\|$, 若 $\|X\|$ 满足下面三个性质:

(1) $\forall X \in \mathbf{R}^n$, 有 $\|X\| \geqslant 0$, 当且仅当 $X=0$ 时, $\|X\|=0$; (非负性)

(2) $\forall X \in \mathbf{R}^n$, $\alpha \in \mathbf{R}$ 有

$$\|\alpha X\| = |\alpha|\,\|X\| \quad (\text{齐次性}) \tag{0.1}$$

(3) $\forall X, Y \in \mathbf{R}^n$, 有 $\|X+Y\| \leqslant \|X\| + \|Y\|$. (三角不等式)

那么称该实数 $\|X\|$ 为向量 X 的范数.

1. 向量范数定义

向量 $X=(x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$ 的 L_p 范数定义为

$$\|X\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{1/p}, \qquad 1 \leqslant p \leqslant +\infty \tag{0.2}$$

其中, 经常使用三种向量范数是 $p=1,2,\infty$, 即

$$\|X\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n| = \sum_{i=1}^{n} |x_i| \tag{0.3}$$

$$\|X\|_2=\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2}=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}x_i^2} \tag{0.4}$$

或写成

$$\|X\|_2=\sqrt{(X,X)}$$

$$\|X\|_\infty=\max\{|x_1|,|x_2|,\cdots,|x_n|\}=\max_{1\leqslant i\leqslant n}\{|x_i|\} \tag{0.5}$$

例 0.2 计算向量 $X=(1,3,-5)^{\mathrm{T}}$, $p=1,2,\infty$ 的三种向量范数.

解

$$\|X\|_1=1+3+5=9$$
$$\|X\|_2=(1^2+3^2+5^2)^{1/2}=\sqrt{35}=5.91608$$
$$\|X\|_\infty=\max\{1,3,|-5|\}=5$$

2. 不同向量范数的关系

有限维线性空间 $\mathbf{R}^n$ 中任意向量范数的定义都是**等价**的. 若 $R_1(x),R_2(x)$ 是 $\mathbf{R}^n$ 上两种不同的范数定义, 则必存在 $0<m<M<\infty$, 使 $\forall X\in\mathbf{R}^n$, 均有

$$mR_2(x)\leqslant R_1(x)\leqslant MR_2(x)$$

或

$$m\leqslant\frac{R_1(X)}{R_2(X)}\leqslant M \qquad (X\neq 0) \tag{0.6}$$

(证明略.)

3. 向量的极限

有了向量范数的定义, 也就有了度量距离的标准, 即可定义向量的极限和收敛概念.

设 $X^{(1)},\cdots,X^{(m)},\cdots$ 为 $\mathbf{R}^n$ 上向量序列, 若存在向量 $\alpha\in\mathbf{R}^n$ 使 $\lim\limits_{m\to\infty}\|X^{(m)}-\alpha\|=0$, 则称向量列 $X^{(1)},X^{(2)},\cdots$ 是收敛的, α 称为该向量序列的极限.

由向量范数的等价性, 向量列是否收敛与选取哪种范数无关.

向量序列 $X^{(m)}=(x_1^{(m)},x_2^{(m)},\cdots,x_n^{(m)})^{\mathrm{T}},m=1,2,\cdots$ 收敛的充分必要条件为其序列的每个分量收敛, 即 $\lim\limits_{m\to\infty}x_i^{(m)}$ 存在.

若 $\lim\limits_{m\to\infty}x_i^{(m)}=x_i$, 则 $X=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$ 就是向量序列 $X^{(m)}=(x_1^{(m)},x_2^{(m)},\cdots,x_n^{(m)})^{\mathrm{T}}$,$m=1,2,\cdots$ 的极限.

例 0.3 求向量序列 $X^{(k)} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{k+1} \\ \left(1+\dfrac{1}{k}\right)^k \\ \dfrac{2k-1}{k+11} \end{pmatrix}$, $k = 0, 1, 2, \cdots$ 的极限向量.

解 算出每个向量分量的极限后得

$$\lim_{k\to\infty} X^{(k)} = \lim_{k\to\infty} \begin{pmatrix} \dfrac{1}{k+1} \\ \left(1+\dfrac{1}{k}\right)^k \\ \dfrac{2k-1}{k+11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lim\limits_{k\to\infty} & \dfrac{1}{k+1} \\ \lim\limits_{k\to\infty} & \left(1+\dfrac{1}{k+1}\right)^k \\ \lim\limits_{k\to\infty} & \dfrac{2k-1}{k+11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ e \\ 2 \end{pmatrix}$$

在计算方法中, 计算的向量序列都是数据序列, 当 $\|X^{(k+1)} - X^{(k)}\| <$ 给定精度时, 视 $X^{(k+1)}$ 为极限向量 X^*.

0.4.2 矩阵范数

1. 矩阵范数定义

矩阵范数可用向量范数定义. 设 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$, 记方阵 A 的范数为 $\|A\|$, 那么

$$\|A\| = \sup_{\substack{x\in\mathbf{R}^n \\ x\neq 0}} \frac{\|AX\|}{\|X\|}, \qquad \text{或} \quad \|A\| = \sup_{\substack{x\in\mathbf{R}^n \\ \|x\|=1}} \|AX\| \tag{0.7}$$

为矩阵的范数. 这样定义的矩阵范数满足下列性质:

(1) $\|A\| > 0$, 当且仅当 $A = 0$ 时, $\|A\| = 0$; (非负性)

(2) $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$, $\forall \lambda \in \mathbf{R}$,

$$\|\lambda A\| = |\lambda|\,\|A\| \quad \text{(齐次性)} \tag{0.8}$$

(3) 对于任意两个阶数相同的矩阵 A, B 有

$$\|A + B\| \leqslant \|A\| + \|B\| \quad \text{(三角不等式)}$$

(4) A, B 为同阶矩阵, $\|AB\| \leqslant \|A\|\,\|B\|$;

(5) A 为 n 阶阵, 对 $\forall x \in \mathbf{R}^n$, 恒有

$$\|AX\| \leqslant \|A\| \cdot \|X\| \quad \text{(相容性)}$$