计算方法引论

第二版

徐萃薇　孙绳武　编著

高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

83

计算方法引论

（第二版）

徐萃薇　孙绳武　编著

高等教育出版社

图书在版编目(CIP)数据

计算方法引论/徐萃薇,孙绳武编著.—2版.—北京:高等教育出版社,2002.1(2002重印)
高等院校非计算数学专业的教材
ISBN 7-04-010321-4

Ⅰ.计... Ⅱ.①徐...②孙... Ⅲ.计算方法-高等学校-教材 Ⅳ.0241

中国版本图书馆CIP数据核字(2001)第065315号

责任编辑 康兆华 **封面设计** 王凌波 **责任绘图** 尹 莉
版式设计 马静如 **责任校对** 陈 荣 **责任印制** 张小强

计算方法引论(第二版)
徐萃薇 孙绳武 编著

出版发行	高等教育出版社		
社　　址	北京市东城区沙滩后街55号	**邮政编码**	100009
购书热线	010—64054588	**传　　真**	010-64014048
免费咨询	800—810—0598	**网　　址**	http://www.hep.edu.cn http://www.hep.com.cn
经　　销	新华书店北京发行所		
排　　版	高等教育出版社照排中心		
印　　刷	北京市鑫鑫印刷厂	**版　　次**	1985年1月第1版
开　　本	850×1168 1/32		2002年1月第2版
印　　张	12.875	**印　　次**	2002年4月第2次印刷
字　　数	320 000	**定　　价**	13.20元

再版序言

徐萃薇教授编写的《计算方法引论》自出版以来已被很多院校用做“计算方法”课教材，颇受欢迎.本书出版前高等教育出版社计算机编辑室请我审阅，使我有机会拜读这本教材.我认为这本教材在不大的篇幅中将计算数学学科中数值分析、数值代数和微分方程数值解三大部分的基本内容深入浅出地做了介绍，实属难能可贵.教材特点是取材恰当，“少而精”，既重视算法和基本概念的描述，又有理论分析.针对非计算数学专业学生特点，很好地掌握了理论深度的分寸，做到理论联系实际，又不过分追求理论证明的完整性.使学生既学到数值计算方法，又能进行必要的理论分析，为解决科学与工程计算问题打下了良好基础，也为进一步提高奠定基础.

此外，本书适用面较广，可用于非计算数学专业 48～72 学时的不同类型“计算方法”课的教材，对学时较少的专业，只要适当削减书中部分章节仍可使用.当然也适合于在职科技人员进修、自学和参考.

本书修订版除保持了原版特点外，增加和改写了一些章节，使内容更充实，加强了算法描述与实现，有相当广度和一定深度，文字叙述更流畅，能适应新世纪“计算方法”课的教学要求，是一本好教材.

徐萃薇教授是我北大数学系师姐，高我两届，1958 年我们同在东北人民大学(现吉林大学)进修，听苏联专家梅索夫斯基讲授“计算方法”，是国内最早从事计算数学教学的老师.以后几十年，由于都从事计算数学教学与研究，常有往来，探讨教学和学术问

题，到她退休才很少见面，没想到她重病不起，未完成本书的修改就走了.好在孙绳武教授遵照她的遗愿，出色完成了修改任务，使本书修改版得以面世.我写这篇序言，也作为对徐萃薇教授的悼念.

李庆扬

2001年3月

修订再版说明

徐萃薇教授编写的《计算方法引论》1985年问世以来即在一定范围的院校专业中使用，历年重印已至十七万册.

高等教育出版社计算机室提出再版，而编者多年来也总想将这本书以新的面貌奉献给读者，因此立即着手修订.不幸的是，在工作顺利进行时，徐教授为病魔夺去了生命.历年我们多次谈论过这本书的使用情况，讨论过修订再版事宜.我们有多年合作的经验，我对教材方方面面比较了解.因此，徐教授病重时担心再版受阻，嘱我代为工作.孰料竟成遗言！幸而，主要思路、框架业已设定，所剩只是部分具体操作了.

这次再版对原书文字做了适当的更改、修饰、调整，改写了一些章节，同时也增加了一些内容，例如新增线性最小二乘问题一章.书末增附了索引.

我们希望新版仍能适合多专业、不同层次的教学要求.从内容上说，有一定的广度又有相当的深度.在叙述上力求由浅入深逐渐展开.这样可给讲授者提供足够的素材，又给他（她）依教学要求和学生情况适当剪裁的自由.这也有助于自学.

与第一版一样，对算法的处理有多种情况，详略不一，形式各异，本着程序结构化设计的思路去做.或者给出公式，或者说明几部分任务，或者用某种形式语言描述，或者用自然语言描述.我们的目的在于让读者弄清怎么算.虽然有某些软件设计方面的讨论，但终究不是描述软件算法.学习计算方法要自己会算，会编程序让计算机算.我们提倡读者能使用一些成熟的软件做些数学实验，取得相应的经验，印证、补充理论，也为发展打下良好的基础.应当说

MATLAB 提供了一个很好的平台.

感谢清华大学数学系李庆扬教授在百忙中审读了全文并热情作序.感谢十五年来众多院校的老师们选用本书,并提出宝贵意见,没有他们的支持与帮助不可能有第二版的成书.

最后,仍望各方同仁继续支持,不吝赐教.

孙绳武

2001 年 4 月

第一版序言

本书是作者1976年—1980年在北京大学为非计算数学专业的学生讲授计算方法课程时所写的教材.

由于电子计算机的迅速发展,国内外关于计算方法的教程和专著日益增多.对于非计算数学专业的学生来说,虽然他们需要学习计算方法,但并不需要在计算数学的理论问题上花费过多的时间.这样,写一本适合于物理系、计算机系、地球物理系、力学系等大学生和研究生的计算方法教材就成为十分必要的了.作者本人讲授这门课程四次,每讲完一次都对教材进行了修改.另外,北京的几个兄弟院校(北京工业大学、北京工业学院、北京化工学院、北京师范大学和北京师范学院等)从1980年起也采用此书作为教材,反映也比较好,并曾根据使用情况对此教材的内容提出了许多宝贵意见,本书就是在采纳了大家提出的修改意见后定稿的.

本书内容共分三部分.第一部分是数值分析,第二部分是数值代数,第三部分是常微分方程数值解法和偏微分方程数值解法.全书讲授时数为72～80学时,如果学时少于72学时,可少讲或不讲偏微分方程数值解法.如果学时多于80学时,可根据本书参考书目,增加所需的内容.

学习本书所必须的数学基础是微积分和线性代数,以及常微分方程和偏微分方程的基本概念.这是一般理工科大学的学生都具备的.对于自学过这些课程的青年,如果他们想进一步自学计算方法,以解决一些实际应用问题,本书对他们也是适宜的.本书每章都附有一定数量的习题,通过这些习题可以加深对各章内容的理解,掌握必要的解题技巧.

作者特别感谢北京大学计算数学教研室主任胡祖炽教授,他仔细地审阅了原稿,提出了大量的宝贵意见和建议;还要感谢北京师范大学沈嘉骥同志和北京大学王莲芬同志,他们根据使用这本教材的情况,给作者提出了不少有价值的修改意见.

徐萃薇

1982年冬识于

北京大学燕东园

目　　录

第一章 误　　差

1.1 误差的来源

用数学工具来解决实际问题时,在哪些地方会产生误差呢?首先,用数学模型来描述具体的物理现象要作许多简化,因此,数学模型本身就包含着误差,这种误差叫做“模型误差”.在数学模型中,通常总要包含一些观测数据,这种观测结果不是绝对准确的,因此还有“观测误差”.现举例说明.

例 1　设一根铝棒在温度 t 时的实际长度为 L_t,在 $t=0$ 时的实际长度为 L_0,用 l_t 来表示铝棒在温度为 t 时的长度计算值,并建立一个数学模型

$$l_t = L_0(1+\alpha t)$$

其中,α 是由实验观测到的常数

$$\alpha = (0.000\,023\,8 \pm 0.000\,000\,1)1/℃$$

则称 $L_t - l_t$ 为“模型误差”.0.000 000 1/℃是 α 的“观测误差”.

例 2　通常用

$$s(t) = \frac{1}{2}gt^2, g \approx 9.81\ \mathrm{m/s^2}$$

来描述自由落体下落时距离和时间的关系.设自由落体在时间 t 的实际下落距离为 $\tilde{s}_t$,则把 $\tilde{s}_t - s(t)$ 叫做“模型误差”.

在解决实际问题时,数学模型往往很复杂,因而不易获得分析解,这就需要建立一套行之有效的近似方法或数值方法.模型的准确解与用数值方法求得的解之差称为“方法误差”,或者叫做“截断

误差”.

例 3 一个无穷级数

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0)$$

在实际计算时,只能取前面有限项(例如 n 项)

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0)$$

来代替,这就抛弃了无穷级数的后半段,因而出现了误差,这种误差就是一种“截断误差”.对这个问题来说,截断误差是

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0) = \sum_{k=n}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0)$$

最后,还有一类误差是因为在计算时总是只能取有限位数字进行运算而引起的,这种误差称为“舍入误差”.

例 4 $\pi = 3.141\ 592\ 6\cdots, \sqrt{2} = 1.414\ 213\ 56\cdots, \frac{1}{3} = 0.333\ 3\cdots$,……,等等.在计算机上运算时只能用有限位小数,如取小数点后四位数字,则

$$\rho_1 = 3.141\ 6 - \pi = +0.000\ 007\ 4\cdots$$

$$\rho_2 = 1.414\ 2 - \sqrt{2} = -0.000\ 013\cdots$$

$$\rho_3 = 0.333\ 3 - \frac{1}{3} = -0.000\ 033\cdots$$

就是“舍入误差”.

概括起来,误差一般有:模型误差,观测误差,截断误差,舍入误差.在计算方法中,主要讨论的是截断误差和舍入误差.

1.2 浮点数,误差、误差限和有效数字

1. 浮点数

任何一个浮点数均可表示为

$$x = \pm w \times \beta^J = \pm 0.\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_t \times \beta^J, \quad L \leqslant J \leqslant U$$

其中，β 叫做这个数的基，如常见的十进制数，$\beta=10$；计算机上使用的二进制数，$\beta=2$. J 是阶，是一个整数，取值正、负或零. w 是尾数，由 t 位小数构成，$0\leqslant\alpha_i\leqslant\beta-1(i=1,2,\cdots,t)$. 若 $\alpha_1\neq0$，则称该浮点数为规格化浮点数.

若用 $\mathscr{F}$ 来表示一个系统的浮点数的集合，则

$$\mathscr{F}=\{x:x=\pm 0.\alpha_1\cdots\alpha_t\times\beta^J,\quad 0\leqslant\alpha_i\leqslant\beta-1,\alpha_1\neq0,\\ L\leqslant J\leqslant U\}\cup\{0\}$$

显然，集合 $\mathscr{F}$ 可以用四个元素的数组(β,t,L,U)来刻画. 对不同机器，这四个值不一定相同，最常见的有$(2,56,-64,64)$. 它表示一个二进制数集合，每个数有 56 位小数，阶码由 -64 到 $+64$.

对于一个特定的机器来说，尾数的位数 t 是固定的，也称其机器精度有 t 个 β 进位数字. 浮点数中阶的上界(U)和下界(L)分别称为上溢限和下溢限. 若在计算过程中产生的数的指数(J)超出上溢限或下溢限，便无法在该机器上表示，这种现象称为上溢或下溢.

集合 $\mathscr{F}$ 是包含 $2(\beta-1)\beta^{t-1}(U-L+1)+1$ 个数的有限集，这些数分布在区间$[m,M]$，$[-M,-m]$和$\{0\}$中，其中

$$m=\beta^{L-1},M=\beta^U(1-\beta^{-t})$$

这些数在$[m,M]$和$[-M,-m]$中的分布是不等距的. 例如，$\beta=2,t=2,L=-1,U=2$，则 $\mathscr{F}$ 中 17 个点的分布如图 1.1 所示.

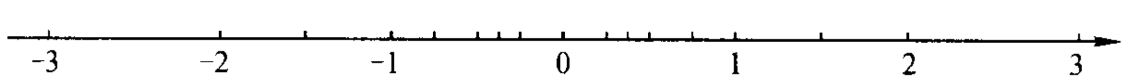

图 1.1

$\mathscr{F}$ 既然只是一个有限集，它就不可能将$[m,M]$和$[-M,-m]$中任意实数表示出来，这就决定了在计算机上的浮点运算是无法精确进行的.

2. 误差、误差限和有效数字

如何来定义误差？若用 x^* 来表示 x 准确值的一个近似值，

则此近似值 x^* 和 x 准确值的差称为误差,用 e^* 来表示

$$e^* = x^* - x$$

这样定义后,就有 $x = x^* - e^*$,即近似值去掉(减去)它的误差就是准确值.因此,把误差的负数 $-e^*$ 叫做近似值 x^* 的"修正值".或者说,近似值加上它的修正值就是准确值.

误差可正可负.当误差为正时,近似值偏大,叫做"强近似";当误差为负时,近似值偏小,叫做"弱近似".

由于在一般情况下准确值 x 是不知道的,所以误差 e^* 的准确值也不可能求出.但根据具体测量或计算的情况,可以事先估计出误差的绝对值不能超过某个正数 ε^*,ε^* 叫做误差绝对值的"上界",或称"误差限".

定义 如果

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

ε^* 就叫做近似值 x^* 的"误差限".误差限一定是一个非负数.

因为在任何情况下都有

$$|x^* - x| \leqslant \varepsilon^*$$

即

$$x^* - \varepsilon^* \leqslant x \leqslant x^* + \varepsilon^*$$

这就表明 x 在$[x^* - \varepsilon^*, x^* + \varepsilon^*]$这个区间内,用

$$x = x^* \pm \varepsilon^*$$

来表示近似值 x^* 的精确度,或准确值所在的范围.

例 5 用一把有毫米刻度的米尺,来测量桌子的长度.读出的长度 $x^* = 1\,235$ mm,是桌子实际长度 x 的一个近似值,由米尺的精度知道,这个近似值的误差不会超过半个毫米,则有

$$|x^* - x| = |1\,235 - x| \leqslant \frac{1}{2}\ \text{mm}$$

即

$$1\,234.5 \leqslant x \leqslant 1\,235.5$$

这表明 x 在[1 234.5,1 235.5]这个区间内,写成