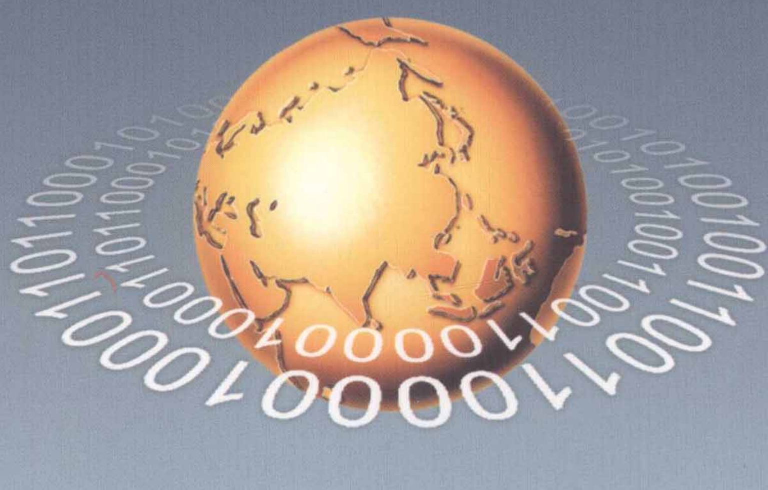
信息与计算科学专业系列教材

数值计算方法

（第二版）

郑慧娆　陈绍林　莫忠息　黄象鼎　编著



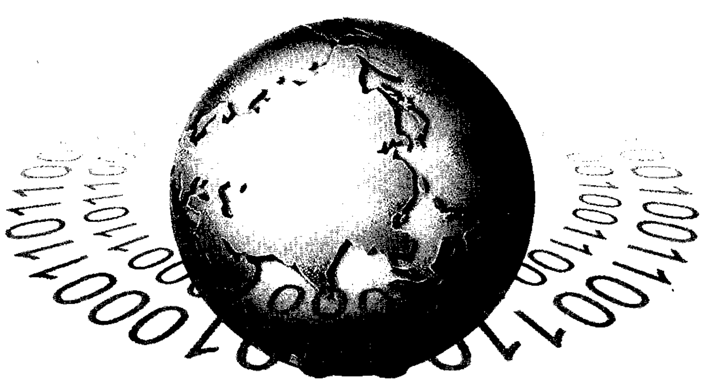
WUHAN UNIVERSITY PRESS
武汉大学出版社

信息与计算科学专业系列教材

数值计算方法

（第二版）

郑慧娆　陈绍林　莫忠息　黄象鼎　编著



WUHAN UNIVERSITY PRESS
武汉大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/郑慧娆,陈绍林,莫忠息,黄象鼎编著.—2版.—武汉:武汉大学出版社,2012.1
信息与计算科学专业系列教材
ISBN 978-7-307-08476-6

Ⅰ.数… Ⅱ.①郑… ②陈… ③莫… ④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(2011)第005231号

责任编辑:顾素萍 解云琳　　责任校对:黄添生　　版式设计:马 佳

出版发行:**武汉大学出版社** (430072 武昌 珞珈山)
(电子邮件:cbs22@whu.edu.cn 网址:www.wdp.com.cn)
印刷:湖北省京山德兴印务有限公司
开本:720×1000 1/16 印张:23.25 字数:408千字 插页:1
版次:2002年10月第1版 2012年1月第2版
2012年1月第2版第1次印刷
ISBN 978-7-307-08476-6/O·440 定价:36.00元

信息与计算科学专业系列教材编委会

WUHAN UNIVERSITY PRESS

武汉大学出版社

出版说明

1998年，教育部颁布了经调整后的高等学校新的专业目录，从1999年秋季开始，各院校开始按新的专业设置进行招生。信息与计算科学专业是在这次调整中设置的，是以信息处理和科学与工程计算为背景的，由信息科学、计算科学、运筹与控制科学等交叉渗透而形成的一个新的理科专业。目前，社会对这方面的人才需求越来越多，开办这个专业的院校也越来越多。因此，系统地出版一套高质量的相关教材是当务之急。

由于信息与计算科学专业是一个新设的专业，有关该专业的人才培养模式、培养目标、教学计划、课程体系、教材建设等一系列专业建设问题，各院校目前正在积极地研究和探索之中。为了配合全国各类高校信息与计算科学专业的教学改革和课程建设，推进高校信息与计算科学专业教材的出版工作，在有关专家的倡议和有关部门的大力支持下，我们于2002年组织成立了信息与计算科学专业系列教材编委会，并制定了教材出版规划。

编委会一致认为，规划教材应该能够反映当前教学改革的需要，要有特色和一定的前瞻性。规划的教材由个个申报或有关专家推荐，经编委会认真评审，最后由出版社审定出版。教材的编写力求体现创新精神和教学改革，并用应具有深入浅出、可读性强等特点。这一套系列教材不仅适用于信息与计算科学专业的教学，也可以作为其他有关专业的教材和教学参考书，还可供工程技术人员学习参考。

限于我们的水平和经验，这批教材在编审、出版工作中还可能存在不少的缺点和不足，希望使用本系列教材的教师、同学和其他广大读者提出批评和建议。

信息与计算科学专业系列教材编委会

第二版前言

在信息与计算科学专业系列教材编委会和武汉大学出版社的大力支持下，我们广泛征求和听取了使用本书的师生的意见，对原书进行了修改，删去了原书部分章节，修正了一些错误，重新编写了某些内容，变更了某些章节的次序。希望本书修订后能满足各类高等学校信息与计算科学专业本科教学的要求，使学生能更好地掌握数值计算方法的基本内容和技巧。

修订工作除原来编写的老师之外，孙乐林老师也参加了本书的修订。

武汉大学信息与计算科学系胡宝清老师、邹秀芬老师、冯慧老师、胡泽民老师对本书的修订提出了宝贵的意见；武汉大学出版社编辑顾素萍、解云琳对本书的修订给予了大力支持并付出了辛勤劳动，在此一并致谢。

本书修订后难免还存在不妥之处，希望读者和同行继续给予批评和指正。

编　者

2011 年 9 月

第一版前言

本书是根据1999年教育部数学与力学教学指导委员会制定的《信息与计算科学专业教学规范的精神》，为大学本科信息与计算科学专业编写的教材。它是在原计算数学专业的数值代数、数值逼近和常微分方程数值解法这三门课程的教学内容的基础上写成的。为适应专业调整，教材内容也作了一些调整。

在计算机应用已广泛普及的现代，应用数值方法求解数学问题已成为数学学科的重要内容。作为教材，本书尽可能保证全书的系统性，既讲述了数值方法的数学原理，对重要的定理给出了详细的证明；还给出了算法的推导和算法描述，主要的算法都用例子加以说明；为使学生掌握如何在计算机上实现数值计算，每章习题中还安排了上机实习题。希望通过这门课程的学习，学生能够应用数值方法求解数学问题，认识数值方法的局限性和数值解的误差。进而，学会根据实际问题开发新的数值方法，为今后的学习和工作打下坚实的基础。

本书要求读者具有微积分、线性代数知识，还要求初步掌握常微分方程知识，要求至少掌握一种程序设计语言。全书共分9章，对信息与计算科学专业本科生，讲授时间为一学年；对其他专业学生，讲授时间为一学期。教师可根据专业的特点、授课对象、学时数等选择适当内容安排教学。

参加编写本书的教师，都具有多年讲授相关课程的教学经验，本书的内容大多取自他们的讲稿。其中第一章、第二章、第六章和第九章由郑慧娆老师编写，第三章由黄象鼎老师编写，第四章、第五章和第七章由陈绍林老师编写，第八章由莫忠息老师编写。全书由费浦生老师审校。

武汉大学教务部、武汉大学数学与统计学院及武汉大学出版社对本书的出版给予了大力支持，信息与计算科学系的老师对本书的编写给予了热忱的指导与帮助，在此一并致谢。

由于编者水平有限，本书错误和不妥之处在所难免，希望读者和同行批评指正。

编　者

2002年8月

目　　录

第一章　基本知识

本章概要地介绍了数值计算方法中的主要基本知识. 其中 1.2 节和 1.3 节分别介绍了误差以及计算机浮点运算误差的相关知识；1.4 节介绍向量和矩阵范数；1.5 节介绍有关线性方程组性态和数值方法稳定性的概念.

1.1　数值方法

“数值计算方法”这门课程的主要内容是研究使用计算机求解各种数学问题的数值方法，对求得的解的精度进行评估，以及如何在计算机上实现求解等.

我们知道，无论是自然科学、社会科学还是其他学科，其研究领域大量涉及数学问题的求解. 计算机科学的飞速发展，为我们提供了强大的计算工具，现在的关键是如何使数学问题的求解化为有限次四则运算能在计算机上进行计算.

用有限次四则运算在计算机上求解数学问题的方法称为**计算方法**，通常是通过离散化、逼近、插值、迭代等方法求得原数学问题的近似解. 此外，在计算机进行求解计算时，输入的原始数据和计算过程中每一步运算的结果，由于受计算机有限数位和计算机浮点数运算的限制，都会引进误差. 因此，计算方法通常也称为**数值方法**，求得的近似解通常也称为**数值解**.

1.2　误　　差

1.2.1　误差的来源

用 x^* 表示一个实际问题的精确解，用 x_c 表示在计算机上用某种数值方法计算所得的数值解，这里，精确解的含义是指理论意义上的一个客观量.

x_c 与 x^* 的误差主要来源于以下 4 个方面：

(1) 模型误差

求一个实际问题的精确解 x^* 时，往往用某种数学模型把该问题描述出来. 例如，用方程 $x = A\cos(\omega t + \varphi)$ 来表示单摆运动，计算在时刻 t 单摆的位移量 x. 但是这个方程没有考虑单摆运动时空气阻力等因素. 如果用 x_1 表示某个数学模型的精确解，那么 x_1 与 x^* 有误差，称为**模型误差**.

(2) 测量误差

在数学模型确定后，要通过测量、实验等方法以得到模型参数的取值，形成该数学模型的实模型. 例如上述单摆运动方程中，要把振幅 A、频率 ω 和初相 φ 确定下来. 但是由于测量工具、实验仪器等原因，所建立的实模型的精确解 x_2 与实际问题的精确解 x^* 有误差，这种误差称为**测量误差**.

(3) 方法误差

实模型形成后，用离散化、逼近、插值、迭代等方法，把求解过程化为有限次四则运算. 例如上述单摆方程既可用插值的方法又可用逼近的方法计算不同时刻 t 的位移量. 记用某种计算方法计算的精确解为 x_3，称 x_3 与 x^* 的误差为**方法误差**.

(4) 舍入误差

计算方法确定后，在计算机上进行求解时，计算过程引进的误差称为**舍入误差**.

由此可见，在分析计算机计算的数值解与实际问题的精确解的误差时，应充分考虑各种误差因素的影响.

1.2.2 绝对误差与相对误差

用 x^* 表示一个精确数，x 表示 x^* 的近似数，$\Delta x = x - x^*$ 表示 x 与 x^* 的误差.

1. 绝对误差

称

$$\varepsilon = |\Delta x| \tag{2.1}$$

为近似数 x 的**绝对误差**.

例 1 表 1-1 列出了 3 个精确数 x_i^* $(i = 1,2,3)$、其相应的近似数 x_i $(i = 1,2,3)$ 以及它们的绝对误差.

此例表明，3 个近似数的绝对误差都是 0.000 1，但第 3 个近似数更近似于其精确数. 一般来说，绝对误差的大小不能充分地说明近似数的精确程度.

表 1-1

i	x_i^*	x_i	$\lvert x_i - x_i^* \rvert$
1	2.166 6	2.166 7	0.000 1
2	0.000 4	0.000 3	0.000 1
3	10 000.000 0	10 000.000 1	0.000 1

2. 相对误差

称

$$\xi = \left|\frac{x - x^*}{x^*}\right| = \left|\frac{\Delta x}{x^*}\right| \tag{2.2}$$

为近似数 x 的**相对误差**.

由(2.2)，例 1 中 x_2 和 x_3 的相对误差分别为 0.25 和 0.000 000 01. 可见相对误差更能反映近似数的精确程度.

1.2.3　四舍五入

一个精确数往往只能用有限数位的近似数表示，例如，π 只能表示为 3.14 或 3.141 59 等.

用有限数位表示近似数时，一般遵循“四舍五入”的原则.

假设用 k 表示一个近似数保留下来的小数点后的数位(以下简称为近似数的数位)，“四舍五入”按如下的规则表示近似数：

(1) 当小数点后第 $k+1$ 位的数字小于或等于 4 时，舍去小数点后第 $k+1$ 位以后(包含第 $k+1$ 位)的数字.

(2) 当小数点后第 $k+1$ 位的数字大于 5 时，首先让小数点后的第 k 位数字加 1，再舍去第 $k+1$ 位以后(包含第 $k+1$ 位)的数字.

(3) 当小数点后第 $k+1$ 位的数字等于 5 时，分两种情况处理：

① 若小数点后第 k 位数字为奇数，按(2)的情形处理，即先让小数点后的第 k 位数字加 1，再舍去第 $k+1$ 位以后(包含第 $k+1$ 位)的数字.

② 若小数点后第 k 位数字为偶数，按(1)的情形处理，即将小数点后的第 $k+1$ 位以后(包含第 $k+1$ 位)的数字都舍去.

也就是说，当小数点后第 $k+1$ 位数字为 5 时，保留下来的小数的第 k 位数字总是偶数. 经验表明，按此规则进行舍入，可减少计算过程中舍入误差的积累.

例 2　设精确数 $\pi = 3.141\,592\,65\cdots$，把它分别表示为具有 3 位、5 位和

7 位小数的近似数.

解 结果如表 1-2 所示.

表 1-2

数位 k	第 $k+1$ 位数字	舍 入 规 则	近似数
$k=3$	第 4 位数字 $=5$	小数点后第 4 位为 5，第 3 位为 1 (奇数)，将第 3 位加 1，再舍去第 4 位以后(包含第 4 位) 的数字	3.142
$k=5$	第 6 位数字 $=2$	小数点后第 6 位为 2，舍去第 6 位以后(包含第 6 位) 的数字	3.141 59
$k=7$	第 8 位数字 $=5$	小数点后第 8 位为 5，第 7 位为 6 (偶数)，舍去第 8 位以后(包含第 8 位) 的数字	3.141 592 6

1.2.4 有效数字

如果近似数 x 关于其精确数 x^* 满足不等式

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-k},$$

则称 x 近似表示 x^* 时，**精确到小数点后的第 k 位**. 从这位(第 k 位) 数字起，直至该数最左端的非零数字之间的所有数字，称为该近似数的**有效数字**.

表 1-3 列出了 6 个精确数及其相应的近似数.

表 1-3

精确数 x^*	近似数 x	$\lvert x-x^*\rvert\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-k}$	有效数字个数
913.958 73	913.96	$0.001\,27\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-2}$	5
14.182 2	14.182	$0.000\,2\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}$	5
8.000 033 3	8.000 0	$0.000\,033\,3\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4}$	5
1.999 951	2.000 0	$0.000\,049\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4}$	5
1.999 851	1.999 8	$0.000\,051\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}$	4
7.367 5	7.368	$0.000\,5\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}$	4

1.3 计算机浮点数及舍入误差

1.3.1 计算机浮点数系统

记浮点数为 $x=\beta^j\times W$，浮点数系统为 F，这里，j 为基 β 的阶，又称为**阶码**，W 为**尾数**，F 的特征主要依赖于 4 个参数，不妨记为 $F(\beta,t,m,M)$，简记为 F，其中 β,t,m,M 的意义如下：

β 是正整数，称为**基**. 当 $\beta=10$ 时，就是通常使用的十进制数. 当 $\beta=2,8,16$ 时，分别表示二进制数、八进制数和十六进制数.

t 是正整数，表示浮点数尾数 W 的数位，记

$$W=\pm 0.d_1d_2\cdots d_t.$$

如果 $1\leqslant d_1\leqslant\beta-1$，$0\leqslant d_i\leqslant\beta-1$ $(i=2,3,\cdots,t)$，这时称该浮点数为**规格化浮点数**. 实数 x_R 用浮点数表示时，常记为 x_f 或 $\mathrm{fl}(x)$. 除非特别说明，下文提到的浮点数均指规格化浮点数.

m,M 是正整数，$-m,M$ 分别表示阶码 j 的下界和上界，即

$$-m\leqslant j\leqslant M.$$

例如，设 $F=F(\beta,t,m,M)$ 中，$\beta=10$，$t=5$，实数 $x_R=\dfrac{13}{6}$，则浮点数 $\mathrm{fl}\left(\dfrac{13}{6}\right)=0.216\,67\times 10^1$. 这时，相对误差约为 $0.153\,8\times 10^{-4}$.

浮点数系统 $F(\beta,t,m,M)$ 在实数轴上是一个不等距离散点的有限集，也称为**浮点数集**. 采用二进制的电子计算机的浮点数集 $F(2,t,m,M)$ 也只能表示有限个实数. 以下将计算机的浮点数集简称为浮点数.

在浮点数系统 $F(2,t,m,M)$ 中，允许的实数 x_R 的范围为

$$-2^M\times(0.\underbrace{11\cdots1}_{t个})_2\leqslant x_R\leqslant 2^M\times(0.\underbrace{11\cdots1}_{t个})_2.$$

由于我们讨论的是规格化浮点数，这时 $d_1=1$，尾数 W 的绝对值为

$$|W|\leqslant N_i\times 2^{-t},$$

其中 N_i $(i=1,2,\cdots,k,\ k=2^t-2^{t-1})$ 是区间 $[2^{t-1},2^t)$ 上的所有正整数.

由于阶码取值从 $-m$ 到 M 共 $M+m+1$ 个，故 $F(2,t,m,M)$ 内的有限个正、负数的个数均为 $(M+m+1)(2^t-2^{t-1})$ 个，再加上数零，浮点数集的实数个数总共为 $2(M+m+1)(2^t-2^{t-1})+1$ 个，其中浮点数零可用 $W=0$ 表