

# Numerical Analysis

(Second Edition)

# 数值分析

(原书第2版)

(美) Timothy Sauer 著  
乔治梅森大学

裴玉茹 马庚宇 译



# Numerical Analysis

(Second Edition)

# 数值分析

(原书第2版)

(美) Timothy Sauer 著  
乔治梅森大学

裴玉茹 马庚宇 译

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社  
2014.10

Numerical Analysis, Second Edition

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10

ISBN 978-7-111-48013-0

清华大学出版社

2014.10



机械工业出版社  
China Machine Press

## 图书在版编目 (CIP) 数据

数值分析 (原书第 2 版) / (美) 萨奥尔 (Sauer, T.) 著; 裴玉茹, 马赓字译. —北京: 机械工业出版社, 2014.10

(华章数学译丛)

书名原文: Numerical Analysis, Second Edition

ISBN 978-7-111-48013-6

I. 数… II. ①萨… ②裴… ③马… III. 数值分析—研究 IV. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 216229 号

本书版权登记号: 图字: 01-2012-2652

Authorized translation from the English language edition, entitled *Numerical Analysis*, 2E, 9780321783677 by Sauer, Timothy, published by Pearson Education, Inc., Copyright © 2012.

All rights reserved. No part of this book may be reproduced or transmitted in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording or by any information storage retrieval system, without permission from Pearson Education, Inc.

Chinese simplified language edition published by Pearson Education Asia Ltd., and China Machine Press Copyright © 2014.

本书中文简体字版由 Pearson Education (培生教育出版集团) 授权机械工业出版社在中华人民共和国境内 (不包括中国台湾地区和中国香港、澳门特别行政区) 独家出版发行. 未经出版者书面许可, 不得以任何方式抄袭、复制或节录本书中的任何部分.

本书封底贴有 Pearson Education (培生教育出版集团) 激光防伪标签, 无标签者不得销售.

本书介绍现代数值分析中的重要概念与方法, 包括线性和非线性方程与方程组的求解、数值微分和积分、插值、最小二乘、常微分方程与偏微分方程的求解、特征值与奇异值的计算、随机数与压缩方法, 以及优化技术. 全书穿插介绍了收敛、复杂度、条件、压缩以及正交这几个数值分析中最重要的概念.

本书内容广泛, 实例丰富, 可作为自然科学、工程技术、计算机科学、数学、金融等专业人员进行教学和研究的参考书.

出版发行: 机械工业出版社 (北京市西城区百万庄大街 22 号 邮政编码: 100037)

责任编辑: 朱秀英

责任校对: 殷虹

印刷: 北京诚信伟业印刷有限公司

版次: 2014 年 11 月第 1 版第 1 次印刷

开本: 186mm × 240mm 1/16

印张: 37.25

书号: ISBN 978-7-111-48013-6

定价: 99.00 元

凡购本书, 如有缺页、倒页、脱页, 由本社发行部调换

客服热线: (010) 88378991 88361066

投稿热线: (010) 88379604

购书热线: (010) 68326294 88379649 68995259

读者信箱: hzjsj@hzbook.com

版权所有·侵权必究

封底无防伪标均为盗版

本书法律顾问: 北京大成律师事务所 韩光/邹晓东

# 译者序

我从 2007 年开始讲授工科院系本科生的数值分析课程，寻找一本好的教学参考书是一直以来的愿望。不同于面向数学专业的数值分析教学，工科学生一般难以从数值分析略显枯燥的数值方法介绍中获得乐趣。能够和实际问题有机结合，特别是与日常工程问题求解结合可以大大提高教学的效果以及学习兴趣。这本书恰恰具有这个特点，贯穿全书的实际工程问题分析是本书的一大亮点。

此外全书对于数值分析中的重要问题如正交、收敛等的不断强调也有利于有机地理解各个数值分析方法。

本书的前言、第 1~8 章、第 12~13 章和附录由裴玉茹翻译，第 9~11 章由马赓宇翻译，最后由裴玉茹统校全书。感谢在翻译过程中我们的家人和朋友所给予的支持和帮助。

由于译者能力有限，本书的翻译中难免出现错误，望读者指正。

裴玉茹

2014 年 6 月于畅春园

# 前 言

本书可以作为工科、理科、数学和计算机专业学生的教科书。初等微积分和矩阵代数是数值分析课程的先修课程。该书的首要目的在于构造并剖析科学和工程问题的求解算法，其次是帮助读者在该领域中寻找某些重要的定理，这些定理集成起来就构成当代数值和计算科学时下研究与发展的活跃领域。

数值分析学科中充溢着有用的理念。本书尽力用大量明晰的技巧讲述该主题，同时避免一些不相关的方法和概念。为了更深入地理解，读者需要学习的不仅仅是如何编码实现牛顿方法、龙格-库塔方法，以及快速傅里叶变换，而是必须领会那些重要的定理。这些定理深深渗入数值分析学科，并融入数值分析中关于精度和效率的重要概念。

收敛、复杂度、条件、压缩以及正交是数值分析中最重要的五个概念。当提供足够的计算资源时，任何有价值的近似方法都必须能够收敛到正确的解。该近似方法的复杂度是其使用计算资源的一种度量方式。一个问题的条件，或者对于误差放大的敏感性，是知晓该问题受到攻击可能性的基础。大量数值分析最新应用尽力以更短或者压缩的方式理解数据。最后，正交是许多算法中提升效率的关键，特别是在条件也是算法中的一个方面，或者数据压缩是算法的目标时。

在本书中，当代数值分析中的五大大概念使用加方框的方式重点强调，利用这些概念对主题进行即时评述，同时描述与该书其他部分出现的相同概念的其他表达方式非正式的联系。我们希望以这样显式的方式强调五大大概念，可以如同希腊合唱团一般，突出当前理论的重点。

我们都知道数值分析的理念对于现代工程和科学实践尤为重要，“事实验证”板块提供了利用数值方法解决重要的科学和技术问题的实例。本书选择的这些扩展的应用贴合时代并贴近日常的体验。尽管不可能(可能也不需要)提供这些问题的所有细节，但事实验证还是尽量深入地展示一个技术或者算法如何利用少量的数学知识获得技术和功能上的巨大回报。事实验证被证明是第1版中学生作业和项目的—个主要来源，第2版中对其进行了扩展和详述。

**新版特色。**第2版主要扩展了方程组求解方法。在第2章中加入了楚列斯基(Cholesky)分解法求解对称的正定矩阵方程。在第4章中针对大规模的线性系统，加入对于 Krylov 方法(包括 GMRES 方法)的讨论，以及对于对称和非对称问题的预条件的使用。在新版中还加入了改进的格拉姆-施密特(Gram-Schmidt)正交法和 Levenberg-Marquardt 方法。第8章中的 PDE 问题已被扩展到了非线性 PDE，包括反应-扩散方程和模式形成。为了提高可读性，根据学生的反馈对于注释材料进行了修订，并在整本书中加入新的习题和编程问题。

**技术。**MATLAB 软件工具包用于展示算法，并作为学生作业和项目的平台。在书中 MATLAB 代码的数量认真地调整过，因为事实证明太多的代码往往有负面的作用。在前



面的章节中可以找到更多的 MATLAB 代码,以便读者在阅读的过程中循序渐进地熟悉 MATLAB 代码。在某些提供更详细代码的章节(例如,插值、常微分和偏微分方程),则希望读者可以使用提供的代码作为起点进行开发和扩展。

在使用本书的过程中利用任何特定的计算平台并不重要,但是当前 MATLAB 在工科和理科院系中的使用越来越多,所以本书中使用 MATLAB 进行阐述。在 MATLAB 中,所有数据接口问题,例如数据输入和输出、绘图等,可以一下子解决。数据结构问题(例如研究稀疏矩阵时可能遇到的问题)可以通过使用适当指令对其进行规范化。MATLAB 还可以进行音频和图像文件的输入和输出。由于 MATLAB 内嵌动画指令,很容易实现微分方程仿真。以上这些通过其他方式也可以实现。但是使用一个能在几乎所有操作系统上运行的工具包有助于简化细节,使得学生更专注于真正的数学问题。附录 B 是 MATLAB 教程,可以作为入门介绍,或者用于熟悉 MATLAB 的学生参考。

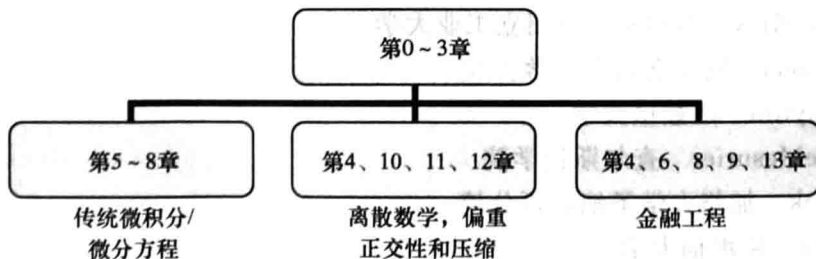
本书网站 [www.pearsonhighered.com/sauer](http://www.pearsonhighered.com/sauer) 中包括所有书中的 MATLAB 程序,以及一些新的材料和更新供读者下载。

**课程设计.** 本书从一开始的基础、初级理论逐步过渡到更加复杂的概念。第 0 章介绍有助于理解书中主要算法的基础知识。部分教师喜欢从头开始,其他一些教师(包括作者)倾向于从第 1 章开始,并在需要的时候再讲述第 0 章中的部分内容。第 1 章和第 2 章讨论各种形式方程的求解问题。第 3 章和第 4 章主要讲述数据拟合、插值和最小二乘法。第 5~8 章又回到了经典的连续数学问题的数值分析领域,包括:数值微分和积分,常微分和偏微分方程在初值条件和边值条件下的求解。

第 9 章讲述随机数(用于提供第 5~8 章问题的补充方法),包括:作为标准数值积分替代的蒙特卡罗方法,以及对应的随机微分方程,这些方法在模型中出现不确定性的情况下是必需的。

尽管压缩方法通常隐藏在插值、最小二乘、傅里叶变换的描述中,但压缩是数值分析的一个核心问题,我们在第 10 章和第 11 章中讲述现代压缩技术。在第 10 章中,利用快速傅里叶变换从精确和最小二乘的观点实现三角插值。在第 11 章中,强调了和语音压缩的联系,阐述了离散余弦变换——现代语音和图像压缩中的一个标准方法。在第 12 章中,特征值与奇异值的描述用于强调其与数据压缩的联系,这在当前的应用中变得越来越重要。第 13 章是对优化技术的一个简短描述。

该书通过精选章节,可用于一个学期的课程。第 0~3 章是该领域中任何课程的基础。一个学期的课程设计如下:



## 致谢

第2版要感谢很多人,包括选修过该课程的学生,他们曾经阅读过第1版并给出建议.此外要特别感谢 Paul Lorczaek、Maurino Bautista 和 Tom Wegleitner,他们帮助我避免了令人尴尬的失误.还要大力感谢 Nicholas Allgaier、Regan Beckham、Paul Calamai、Mark Friedman、David Hiebeler、Ashwani Kapila、Andrew Knyazev、Bo Li、Yijang Li、Jeff Parker、Robert Sachs、Evelyn Sander、Gantumur Tsogtgerel 和 Thomas Wanner,他们提出了很多建议. William Hoffman、Caroline Celano、Beth Houston、Jeff Weidenaar 与 Brandon Rawnsley 这些在培生出版集团工作能力很强的人员,以及在 Integra-PDY 工作的 Shiny Rajesh 使得第2版的出版过程令人愉快.最后,要感谢如下来自各个大学的读者,他们鼓励了这本书的出版并对第1版的改进提出了不可或缺的建议:

Eugene Allgower 科罗拉多州立大学

Constantin Bacuta 特拉华大学

Michele Benzi 埃默里大学

Jerry Bona 伊利诺伊大学芝加哥分校

George Davis 佐治亚州立大学

Chris Danforth 佛蒙特大学

Alberto Delgado 布拉德利大学

Robert Dillon 华盛顿州立大学

Qiang Du 宾夕法尼亚州立大学

Ahmet Duran 密歇根大学安娜堡分校

Gregory Goeckel 长老会学院

Herman Gollwitzer 德雷塞尔大学

Don Hardcastle 贝勒大学

David R. Hill 天普大学

Hideaki Kaneko 欧道明大学

Daniel Kaplan 玛卡莱斯特学院

Fritz Keinert 爱荷华州立大学

Akhtar A. Khan 罗彻斯特理工学院

Lucia M. Kimball 本特利大学

Colleen M. Kirk 加利福尼亚州立工业大学

Seppo Korpela 俄亥俄州立大学

William Layton 匹兹堡大学

Brenton LeMesurier 查尔斯顿学院

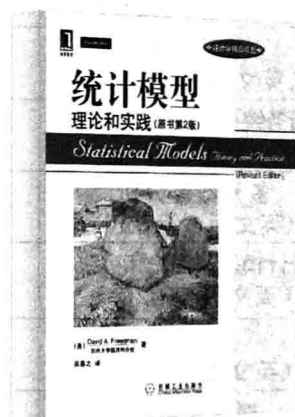
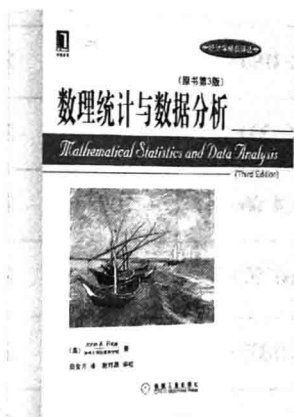
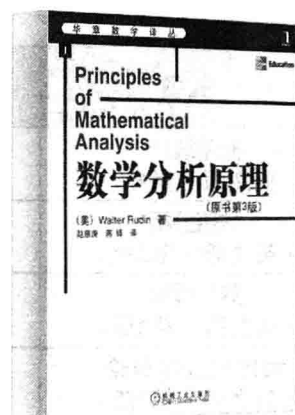
Melvin Leok 加州大学圣地亚哥分校

Doron Levy 斯坦福大学

Shankar Mahalingam 加州大学河滨分校  
Amnon Meir 奥本大学  
Peter Monk 特拉华大学  
Joseph E. Pasciak 得克萨斯 A&M 大学  
Jeff Parker 哈佛大学  
Steven Pav 圣地亚哥加州大学  
Jacek Polewczak 加州州立大学  
Jorge Rebaza 密苏里州立大学  
Jeffrey Scroggs 北卡罗来纳州立大学  
Sergei Suslov 亚利桑那州立大学  
Daniel Szyld 天普大学  
Ahlam Tannouri 摩根州立大学  
JinWang 欧道明大学  
BrunoWelfert 亚利桑那州立大学  
Nathaniel Whitaker 麻省大学



# 推荐阅读



■ **时间序列分析及应用：R语言（原书第2版）**

作者：Jonathan D. Cryer Kung-Sik Chan  
ISBN: 978-7-111-32572-7  
定价：48.00元

■ **随机过程导论（原书第2版）**

作者：Gregory F. Lawler  
ISBN: 978-7-111-31544-5  
定价：36.00元

■ **数学分析原理（原书第3版）**

作者：Walter Rudin  
ISBN: 978-7-111-13417-6  
定价：28.00元

■ **实分析与复分析（原书第3版）**

作者：Walter Rudin  
ISBN: 978-7-111-17103-9  
定价：42.00元

■ **数理统计与数据分析（原书第3版）**

作者：John A. Rice  
ISBN: 978-7-111-33646-4  
定价：85.00元

■ **统计模型：理论和实践（原书第2版）**

作者：David A. Freedman  
ISBN: 978-7-111-30989-5  
定价：45.00元

# 推荐阅读

书名	书号	定价	出版年	作者
概率统计 (英文版·第4版)	978-7-111-38775-6	139	2012	(美) Morris H. DeGroot等
数值分析 (英文版·第2版)	978-7-111-38582-0	89	2013	(美) Timothy Sauer
数论概论 (英文版·第4版)	978-7-111-38581-3	69	2013	(美) Joseph H. Silverman
数理统计学导论 (英文版·第7版)	978-7-111-38580-6	99	2013	(美) Robert V. Hogg等
代数 (英文版·第2版)	978-7-111-36701-7	79	2012	(美) Michael Artin
线性代数 (英文版·第8版)	978-7-111-34199-4	69	2011	(美) Steven J. Leon
商务统计: 决策与分析 (英文版)	978-7-111-34200-7	119	2011	(美) Robert Stine等
多元数据分析 (英文版·第7版)	978-7-111-34198-7	109	2011	(美) Joseph F. Hair, Jr等
统计模型: 理论和实践 (英文版·第2版)	978-7-111-31797-5	38	2010	(美) David A. Freedman
实分析 (英文版·第4版)	978-7-111-31305-2	49	2010	(美) H. L. Royden
概率论教程 (英文版·第3版)	978-7-111-30289-6	49	2010	(美) Kai Lai Chung
初等数论及其应用 (英文版·第6版)	978-7-111-31798-2	89	2010	(美) Kenneth H. Rosen
数学建模 (英文精编版·第4版)	978-7-111-28249-5	65	2009	(美) Frank R. Giordano
复变函数及应用 (英文版·第8版)	978-7-111-25363-1	65	2009	(美) James Ward Brown
数学建模方法与分析 (英文版·第3版)	978-7-111-25364-8	49	2008	(美) Mark M. Meerschaert
数学分析原理 (英文版·第3版)	978-7-111-13306-3	35	2004	(美) Walter Rudin
实分析与复分析 (英文版·第3版)	978-7-111-13305-6	39	2004	(美) Walter Rudin
泛函分析 (英文版·第2版)	978-7-111-13415-2	42	2004	(美) Walter Rudin

# 目 录

译者序	1.5.1 割线方法及其变体	54
前言	1.5.2 Brent 方法	57
	事实验证 1 Stewart 平台运动学	59
	软件与进一步阅读	61
<b>第 0 章 基础知识</b>	<b>第 2 章 方程组</b>	62
0.1 多项式求值	2.1 高斯消去法	62
0.2 二进制数字	2.1.1 朴素的高斯消去法	62
0.2.1 将十进制转化为二进制	2.1.2 操作次数	64
0.2.2 将二进制转化为十进制	2.2 LU 分解	69
0.3 实数的浮点表示	2.2.1 高斯消去法的矩阵形式	69
0.3.1 浮点格式	2.2.2 使用 LU 分解回代	71
0.3.2 机器表示	2.2.3 LU 分解的复杂度	73
0.3.3 浮点数加法	2.3 误差来源	75
0.4 有效数字缺失	2.3.1 误差放大和条件数	75
0.5 微积分回顾	2.3.2 淹没	80
软件与进一步阅读	2.4 $PA=LU$ 分解	83
<b>第 1 章 求解方程</b>	2.4.1 部分主元	83
1.1 二分法	2.4.2 置换矩阵	85
1.1.1 把根括住	2.4.3 $PA=LU$ 分解	86
1.1.2 多准? 多快	事实验证 2 欧拉-伯努利横梁	91
1.2 不动点迭代	2.5 迭代方法	94
1.2.1 函数的不动点	2.5.1 雅可比方法	94
1.2.2 不动点迭代几何	2.5.2 高斯-塞德尔方法和 SOR	96
1.2.3 不动点迭代的线性收敛	2.5.3 迭代方法的收敛	99
1.2.4 终止条件	2.5.4 稀疏矩阵计算	100
1.3 精度的极限	2.6 用于对称正定矩阵的方法	105
1.3.1 前向与后向误差	2.6.1 对称正定矩阵	105
1.3.2 威尔金森多项式	2.6.2 楚列斯基分解	106
1.3.3 根搜索的敏感性	2.6.3 共轭梯度方法	109
1.4 牛顿方法	2.6.4 预条件	113
1.4.1 牛顿方法的二次收敛	2.7 非线性方程组	118
1.4.2 牛顿方法的线性收敛	2.7.1 多元牛顿方法	118
1.5 不需要导数的根求解		

2.7.2 Broyden 方法 .....	120	4.3.1 格拉姆-施密特正交与 最小二乘 .....	188
软件与进一步阅读 .....	123	4.3.2 改进的格拉姆-施密特正交 ..	194
<b>第 3 章 插值</b> .....	124	4.3.3 豪斯霍尔德反射子 .....	196
3.1 数据和插值函数 .....	124	4.4 广义最小余项(GMRES) 方法 .....	201
3.1.1 拉格朗日插值 .....	125	4.4.1 Krylov 方法 .....	201
3.1.2 牛顿差商 .....	127	4.4.2 预条件 GMRES .....	203
3.1.3 经过 $n$ 个点的 $d$ 阶多项式 有多少 .....	130	4.5 非线性最小二乘 .....	205
3.1.4 插值代码 .....	131	4.5.1 高斯-牛顿方法 .....	205
3.1.5 通过近似多项式表示函数 .....	132	4.5.2 具有非线性参数的模型 .....	208
3.2 插值误差 .....	136	4.5.3 Levenberg-Marquardt 方法 ..	210
3.2.1 插值误差公式 .....	136	<b>事实验证 4 GPS、条件和非线性 最小二乘</b> .....	212
3.2.2 牛顿形式和误差公式的 证明 .....	137	软件与进一步阅读 .....	214
3.2.3 龙格现象 .....	139	<b>第 5 章 数值微分和积分</b> .....	216
3.3 切比雪夫插值 .....	141	5.1 数值微分 .....	216
3.3.1 切比雪夫理论 .....	141	5.1.1 有限差分公式 .....	216
3.3.2 切比雪夫多项式 .....	143	5.1.2 舍入误差 .....	219
3.3.3 区间的变化 .....	145	5.1.3 外推 .....	221
3.4 三次样条 .....	149	5.1.4 符号微分和积分 .....	222
3.4.1 样条的性质 .....	150	5.2 数值积分的牛顿-科特斯 公式 .....	225
3.4.2 端点条件 .....	156	5.2.1 梯形法则 .....	226
3.5 贝塞尔曲线 .....	160	5.2.2 辛普森法则 .....	227
<b>事实验证 3 利用贝塞尔曲线定义 字体</b> .....	164	5.2.3 复合牛顿-科特斯公式 .....	229
软件与进一步阅读 .....	167	5.2.4 开牛顿-科特斯方法 .....	231
<b>第 4 章 最小二乘</b> .....	168	5.3 龙贝格积分 .....	234
4.1 最小二乘与法线方程 .....	168	5.4 自适应积分 .....	237
4.1.1 不一致的方程组 .....	168	5.5 高斯积分 .....	241
4.1.2 数据的拟合模型 .....	172	<b>事实验证 5 计算机辅助建模中的 运动控制</b> .....	245
4.1.3 最小二乘的条件 .....	176	软件与进一步阅读 .....	247
4.2 模型概述 .....	179	<b>第 6 章 常微分方程</b> .....	248
4.2.1 周期数据 .....	179	6.1 初值问题 .....	248
4.2.2 数据线性化 .....	182		
4.3 QR 分解 .....	188		

6.1.1 欧拉方法 .....	250	7.3 排列与有限元方法 .....	321
6.1.2 解的存在性、唯一性和 连续性 .....	254	7.3.1 排列 .....	321
6.1.3 一阶线性方程 .....	256	7.3.2 有限元以及 Galerkin 方法 .....	323
6.2 IVP 求解器的分析 .....	258	软件与进一步阅读 .....	328
6.2.1 局部和全局截断误差 .....	258	<b>第 8 章 偏微分方程</b> .....	329
6.2.2 显式梯形方法 .....	262	8.1 抛物线方程 .....	329
6.2.3 泰勒方法 .....	264	8.1.1 前向差分方法 .....	330
6.3 常微分方程组 .....	266	8.1.2 前向差分方法的稳定分析 .....	332
6.3.1 高阶方程 .....	267	8.1.3 后向差分方法 .....	334
6.3.2 计算机仿真: 钟摆 .....	268	8.1.4 Crank-Nicolson 方法 .....	338
6.3.3 计算机仿真: 轨道力学 .....	271	8.2 双曲线方程 .....	344
6.4 龙格-库塔方法和应用 .....	276	8.2.1 波动方程 .....	345
6.4.1 龙格-库塔家族 .....	276	8.2.2 CFL 条件 .....	347
6.4.2 计算机仿真: Hodgkin-Huxley 神经元 .....	278	8.3 椭圆方程 .....	349
6.4.3 计算机仿真: Lorenz 方程 .....	281	8.3.1 椭圆方程的有限差分方法 .....	351
<b>事实验证 6 Tacoma Narrows 大桥</b> ..	283	<b>事实验证 8 冷却散热片的热分布</b> ..	355
6.5 可变步长方法 .....	286	8.3.2 椭圆方程的有限元方法 .....	357
6.5.1 龙格-库塔嵌入对 .....	286	8.4 非线性偏微分方程 .....	366
6.5.2 4/5 阶方法 .....	288	8.4.1 隐式牛顿求解器 .....	367
6.6 隐式方法和刚性方程 .....	292	8.4.2 二维空间中的非线性方程 .....	372
6.7 多步方法 .....	295	软件与进一步阅读 .....	378
6.7.1 构造多步方法 .....	295	<b>第 9 章 随机数和应用</b> .....	380
6.7.2 显式多步方法 .....	298	9.1 随机数 .....	380
6.7.3 隐式多步方法 .....	301	9.1.1 伪随机数 .....	381
软件与进一步阅读 .....	305	9.1.2 指数和正态随机数 .....	385
<b>第 7 章 边值问题</b> .....	306	9.2 蒙特卡罗模拟 .....	387
7.1 打靶方法 .....	306	9.2.1 幂律和蒙特卡罗模拟 .....	387
7.1.1 边值问题的解 .....	306	9.2.2 拟随机数 .....	389
7.1.2 打靶方法的实现 .....	309	9.3 离散和连续布朗运动 .....	392
<b>事实验证 7 圆环的扭曲</b> .....	312	9.3.1 随机游走 .....	393
7.2 有限差分方法 .....	314	9.3.2 连续布朗运动 .....	394
7.2.1 线性边值问题 .....	314	9.4 随机微分方程 .....	397
7.2.2 非线性边值问题 .....	316	9.4.1 有噪声的微分方程 .....	397
		9.4.2 数值方法求解 SDE .....	399
		<b>事实验证 9 Black-Scholes 公式</b> .....	405
		软件与进一步阅读 .....	407

<b>第 10 章 三角插值和 FFT</b> .....	408	12.1.2 幂迭代的收敛	468
10.1 傅里叶变换 .....	408	12.1.3 幂迭代的逆 .....	469
10.1.1 复数算术 .....	408	12.1.4 瑞利商迭代 .....	470
10.1.2 离散傅里叶变换 .....	410	<b>12.2 QR 算法</b> .....	472
10.1.3 快速傅里叶变换 .....	413	12.2.1 同时迭代 .....	472
10.2 三角插值 .....	415	12.2.2 实数舒尔形式和 QR 算法 .....	475
10.2.1 DFT 插值定理 .....	415	12.2.3 上海森伯格形式 .....	477
10.2.2 三角插值函数的效率 .....	418	<b>事实验证 12 搜索引擎如何评价</b>	
10.3 FFT 和信号处理 .....	421	<b>页面质量</b> .....	481
10.3.1 正交性和插值 .....	421	<b>12.3 奇异值分解</b> .....	484
10.3.2 用三角函数进行最小二乘 拟合 .....	424	12.3.1 找出一般的 SVD .....	486
10.3.3 声音、噪声和滤波 .....	427	12.3.2 特例: 对称矩阵 .....	487
<b>事实验证 10 维纳滤波</b> .....	429	<b>12.4 SVD 的应用</b> .....	489
软件与进一步阅读 .....	431	12.4.1 SVD 的性质 .....	489
<b>第 11 章 压缩</b> .....	432	12.4.2 降维 .....	490
11.1 离散余弦变换 .....	432	12.4.3 压缩 .....	492
11.1.1 一维 DCT .....	432	12.4.4 计算 SVD .....	493
11.1.2 DCT 变换和最小二乘近似 .....	435	软件与进一步阅读 .....	494
11.2 二维 DCT 和图像压缩 .....	437	<b>第 13 章 最优化</b> .....	496
11.2.1 二维 DCT .....	437	<b>13.1 不使用导数的无约束优化</b> .....	497
11.2.2 图像压缩 .....	440	13.1.1 黄金分割搜索 .....	497
11.2.3 量化 .....	443	13.1.2 持续的抛物线插值 .....	500
11.3 霍夫曼编码 .....	449	13.1.3 Nelder-Mead 搜索 .....	502
11.3.1 信息论和编码 .....	449	<b>13.2 使用导数的无约束优化</b> .....	505
11.3.2 JPEG 格式中的霍夫曼 编码 .....	452	13.2.1 牛顿方法 .....	505
11.4 改进的 DCT 和音频压缩 .....	454	13.2.2 最速下降 .....	507
11.4.1 改进的 DCT .....	455	13.2.3 共轭梯度搜索 .....	507
11.4.2 位量化 .....	460	<b>事实验证 13 分子形态和数值优化</b> .....	509
<b>事实验证 11 一个简单的音频</b>		软件与进一步阅读 .....	511
<b>编解码器</b> .....	462	<b>附录 A 矩阵代数</b> .....	512
软件与进一步阅读 .....	464	<b>附录 B MATLAB 介绍</b> .....	518
<b>第 12 章 特征值与奇异值</b> .....	465	<b>部分习题答案</b> .....	527
12.1 幂迭代方法 .....	465	<b>参考文献</b> .....	558
12.1.1 幂迭代 .....	466	<b>索引</b> .....	569



# 第0章 基础知识

本章介绍构成并有助于理解书中主要算法的基础知识，包括初等微积分和函数求值的一些基本思想，在现代计算机上运行机器算术的细节，并讨论因设计较差的计算而带来的有效数字缺失的问题。

在讨论了计算多项式的有效方法后，我们研究二进制数制系统、浮点数字的表达，以及舍入的通用法则。在病态问题中，较小的舍入误差带来的影响可以被无限放大。为了抑制这种有害影响，我们在本书余下的章节中反复讨论了这一主题。

本书的主要目的是阐述并讨论在计算机上求解数学问题的方法。最基础的算术运算是加法和乘法。它们同时也是计算多项式  $P(x)$  在某个特定的  $x$  时对应值所需要的运算。多项式成为众多我们将构造的计算技术的基础并不是一个巧合。

也正因为多项式的重要性，理解如何进行多项式的求值非常重要。读者可能已经知道如何进行多项式的求值运算，并感到在如此简单的问题上花费时间简直可笑！但是越是基本的操作，如果计算方式得当，从中获取的收益也就越大。因而我们将思考如何尽可能有效地完成多项式的求值运算。

## 0.1 多项式求值

比如说，当  $x=1/2$  时，怎么做才是计算下述多项式的最优方式？

$$P(x) = 2x^4 + 3x^3 - 3x^2 + 5x - 1$$

假设多项式的系数和  $x$  的值  $1/2$  都已经保存在内存里，我们试图最小化求值过程中涉及的加法和乘法的计算次数，进而得到多项式的值  $P(1/2)$ 。为了简化问题，我们忽略向内存中保存数字以及从内存中读取数字所花费的时间。

**方法 1** 最先想到的直接方法如下：

$$P\left(\frac{1}{2}\right) = 2 * \frac{1}{2} * \frac{1}{2} * \frac{1}{2} * \frac{1}{2} + 3 * \frac{1}{2} * \frac{1}{2} * \frac{1}{2} - 3 * \frac{1}{2} * \frac{1}{2} + 5 * \frac{1}{2} - 1 = \frac{5}{4} \quad (0.1)$$

需要进行的乘法计算的次数是 10，还要有 4 次加法计算。其中的两次加法运算实际上是减法，但是减法运算可以看做是加上数字的负数，因而我们并不担心加法和减法之间的差异。

很显然还有比式(0.1)更好的方法。我们可以事半功倍——通过消除给定输入  $1/2$  的重复乘法计算节省运算。更好的策略是先计算  $(1/2)^4$ ，保存部分乘积。这对应下面的方法：

**方法 2** 首先找到输入数字  $x=1/2$  的幂，保存幂的值用于后续的计算：

$$\frac{1}{2} * \frac{1}{2} = \left(\frac{1}{2}\right)^2$$

$$\left(\frac{1}{2}\right)^2 * \frac{1}{2} = \left(\frac{1}{2}\right)^3$$

$$\left(\frac{1}{2}\right)^3 * \frac{1}{2} = \left(\frac{1}{2}\right)^4$$

现在我们可以把所有项加起来：

$$P\left(\frac{1}{2}\right) = 2 * \left(\frac{1}{2}\right)^4 + 3 * \left(\frac{1}{2}\right)^3 - 3 * \left(\frac{1}{2}\right)^2 + 5 * \frac{1}{2} - 1 = \frac{5}{4}$$

现在只有关于  $1/2$  的三次乘法，以及其他的 4 次乘法运算。总体算起来，我们将乘法运算降低至 7 次，加法运算的次数仍然是 4 次保持不变。从 14 次到 11 次运算次数的减少真的是那么重要的性能提升吗？如果仅仅需要做一次运算，也许这并不是一个重要的改进。不管使用方法 1 还是方法 2，计算结果在手指离开键盘的同时都可以很快得到。但是，如果需要每秒对多个不同输入的  $x$  多次计算多项式对应的值，在我们需要信息的时候能够及时获取结果，不同方法的差异可能就显得非常关键。

方法 2 是对于四阶多项式计算的最好方法吗？难以想象可以再消除 3 次乘法计算，但实际上可以。下述方法是这类问题的最优的基本求解方法：

**方法 3** (嵌套乘法) 将多项式重写后，可以从内到外对多项式求值：

$$\begin{aligned} P(x) &= -1 + x(5 - 3x + 3x^2 + 2x^3) \\ &= -1 + x(5 + x(-3 + 3x + 2x^2)) \\ &= -1 + x(5 + x(-3 + x(3 + 2x))) \\ &= -1 + x * (5 + x * (-3 + x * (3 + x * 2))) \end{aligned} \quad (0.2)$$

这里多项式是从前向后写，关于  $x$  的幂被分解为与余下的多项式的乘积。我们发现这样写多项式，并不需要额外的计算来进行多项式的新写，所有的系数保持不变。现在从内到外进行计算：

$$\text{乘法 } \frac{1}{2} * 2, \quad \text{加法 } +3 \rightarrow 4$$

$$\text{乘法 } \frac{1}{2} * 4, \quad \text{加法 } -3 \rightarrow -1$$

$$\text{乘法 } \frac{1}{2} * -1, \quad \text{加法 } +5 \rightarrow \frac{9}{2}$$

$$\text{乘法 } \frac{1}{2} * \frac{9}{2}, \quad \text{加法 } -1 \rightarrow \frac{5}{4} \quad (0.3)$$

这种方法被称为**嵌套乘法**或者**霍纳方法**，利用 4 次乘法和 4 次加法计算多项式的值。一般的  $d$  阶多项式可以通过  $d$  次乘法和  $d$  次加法求值。嵌套乘法和多项式算术中的综合除法关系密切。

多项式求值的例子体现了科学计算方法的所有主题的特征。第一，计算机在做简单计算的时候速度很快。第二，由于简单计算可能会被进行多次，尽可能有效地进行简单计算可能非常重要。第三，最好的计算方式可能不是显而易见的那种方法。在 20 世纪后五十年，在数值分析和科学计算领域，结合计算机硬件技术，对于常见问题已经开发了有效的

求解方法.

虽然标准形式的多项式  $c_1 + c_2x + c_3x^2 + c_4x^3 + c_5x^4$  可以用嵌套的形式写为

$$c_1 + x(c_2 + x(c_3 + x(c_4 + x(c_5)))) \quad (0.4)$$

但是有一些应用需要更加一般的形式. 特别是第 3 章的插值计算需要如下的形式:

$$c_1 + (x - r_1)(c_2 + (x - r_2)(c_3 + (x - r_3)(c_4 + (x - r_4)(c_5)))) \quad (0.5)$$

其中我们称  $r_1, r_2, r_3$  和  $r_4$  为基点. 需要注意的是, 若设置式(0.5)中的参数  $r_1 = r_2 = r_3 = r_4 = 0$ , 则变成式(0.4)中传统的嵌套形式.

下面的 MATLAB 代码实现了一般形式的嵌套乘法计算(参照式(0.3)):

```
%程序0.1 嵌套乘法
%使用霍纳方法以嵌套形式计算多项式的值
%输入: 多项式的阶d,
%      d+1个系数构成的数组 c (第一个元素为常数项),
%      x坐标需要进行求值的x位置,
%      如果需要的话, 还有d个基点构成的数组b
%输出: 多项式在x点对应的值y
function y=nest(d,c,x,b)
if nargin<4, b=zeros(d,1); end
y=c(d+1);
for i=d:-1:1
    y = y.*(x-b(i))+c(i);
end
```

运行上面的 MATLAB 程序需要给出输入数据的值, 包括多项式的阶数、系数、需要求值的点  $x$ , 以及基点数组. 例如, 式(0.2)中的多项式在  $x=1/2$  处利用如下 MATLAB 命令进行求值:

```
>> nest(4,[-1 5 -3 3 2],1/2,[0 0 0 0])

ans =

    1.2500
```

结果和我们前面手工计算的结果相同. 当执行以上命令时, nest.m 文件以及本书其他部分展示的 MATLAB 代码, 必须是在 MATLAB 路径或者当前目录可访问路径下.

如果嵌套命令用于求解式(0.2)(其中所有基点为 0), 可以使用如下缩减形式的命令:

```
>> nest(4,[-1 5 -3 3 2],1/2)
```

使用该命令可以得到同样的结果, 这是由于在 nest.m 中对于输入参数的设置. 如果输入参数的个数小于 4, 基点被自动设置为 0.

由于 MATLAB 对于向量表达的无缝处理, 嵌套命令可以同时估计一组  $x$  对应的多项式的值. 下面是一个示例:

```
>> nest(4,[-1 5 -3 3 2],[-2 -1 0 1 2])

ans =

   -15   -10    -1     6    53
```

最后, 第 3 章中将出现的三阶插值多项式

$$P(x) = 1 + x\left(\frac{1}{2} + (x-2)\left(\frac{1}{2} + (x-3)\left(-\frac{1}{2}\right)\right)\right)$$