李庆扬 编著

科学计算方法基础

清华大学出版社

科学计算方法基础

李庆扬 编著

清华大学出版社

北 京

内容提要

本书是为“科学计算方法”课程而编写的教材。在编写过程中力求做到：在内容上取材适中，突出重点，强调方法的构造与应用；在讲解方式上论述思路清晰，推导过程简捷，既重视理论分析，又避免过多的理论证明；在算法方面注重原理介绍，而将具体过程与数学软件 MATLAB 结合起来介绍。

书中各章均配有评注内容，除指出本章重点外，还对未涉及的内容给出参考书目，供学生进一步学习时选用。为了帮助学生巩固基本概念，掌握基本内容和方法，引导学生思考和复习并培养用数学软件解决问题的能力，各章都安排了复习与思考题、习题与实验题。

图书在版编目(CIP)数据

科学计算方法基础/李庆扬编著. —北京：清华大学出版社，2006.4
ISBN 7-302-12422-1

Ⅰ.科…　Ⅱ.李…　Ⅲ.计算方法—教材　Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 005699 号

出 版 者：清华大学出版社　**地　　址**：北京清华大学学研大厦
http://www.tup.com.cn　**邮　　编**：100084
社 总 机：010-62770175　**客户服务**：010-62776969
责任编辑：刘　颖
印 装 者：清华大学印刷厂
发 行 者：新华书店总店北京发行所
开　　本：140×203　**印张**：6　**字数**：156 千字
版　　次：2006 年 4 月第 1 版　2006 年 4 月第1 次印刷
书　　号：ISBN 7-302-12422-1/O·516
印　　数：1～5000
定　　价：10.00 元

前　言

本书是根据新世纪理工科各专业普遍需要开设“科学计算方法”课程而编写的教材，由于计算机使用的普及，利用计算机进行工程与科学计算已成为理工科学生必备的知识.“科学计算方法”介绍科学计算中最常用和最基本的数值方法，它是在“高等数学”与“线性代数”课的基础上开设的重要的数学选修课，虽然学时较少(一般在32～48学时)，但仍要求较全面地了解各类数值计算问题的算法，在满足教学大纲要求的基础上又有提高的空间. 为此，本书力求在内容上取材适中，突出重点，强调方法的构造与应用；在讲解方式上论述思路清晰，推导过程简捷，既重视理论分析，又避免过多的理论证明；至于具体算法及编程已有现成的数学软件，如MATLAB等，非常方便读者使用，故只做原则介绍.

本书各章后均有评注，除指出本章重点外，还对未涉及的内容给出参考书目，以便有需要者进一步学习。复习与思考题则是为了帮助学生巩固基本概念，掌握基本内容，引导学生多思考. 习题是为了使学生更好地复习课堂内容，掌握基本方法及其理论. 实验题需使用MATLAB软件自己编程计算，以便对数值计算有更直接的感受，也是学好本门课程的重要一环.

本书是在清华大学出版社的鼎力支持下编写的，特别是刘颖博士为本书的编辑出版付出了辛勤劳动，在此表示衷心感谢.

本人虽然写过各种不同要求的“数值分析”教材，但少学时的“科学计算方法”教材还是初次编写，不当之处希望读者批评指正.

编　者

2005 年 11 月

目　录

第1章　算法引论与误差分析

1.1　计算方法对象与特点

1.1.1　什么是计算方法

计算方法是指用计算机进行科学计算使用的数值算法. 现代计算机已渗透到各个领域,成为工作和生活中不可缺少的工具,然而计算机的发明与发展主要是科学计算的推动. 目前的超级计算机,其计算速度达每秒万亿次,这也是大规模科学计算的需求刺激的结果. 计算机本质上就是进行计算,计算就必须有算法. 科学计算就是先将各种要解决的问题通过建立数学模型归结为数学问题,然后提供解决数学问题且适合于在计算机上实现的算法,它涉及数学的各个分支,内容十分广泛,形成了一个新的数学分支,称为计算数学. 作为入门的"计算方法"课只涉及计算数学中最常用、最基础的数值计算方法,它包含方程求根、线性方程组数值解法、插值与最小二乘法、数值积分与常微分方程数值解法等内容,其他数学问题的数值计算方法可在一些更专门的计算数学著作中找到,但有了本教材的基础,学习其他内容将不会很困难.

1.1.2　数学与科学计算

数学是科学之母. 科学技术离不开数学,它通过建立数学模型与数学产生紧密联系. 数学又以各种形式应用于科学技术各领域. 几十年来由于计算机及科学技术的快速发展,求解各种数学问题的数值方法即计算数学也愈来愈多地应用于科学技术各领域,新

的计算性交叉学科分支纷纷兴起，如计算力学、计算物理、计算化学、计算生物、计算经济学等，统称为科学计算.科学计算涉及数学的各分支，研究它们适合于计算机编程的数值计算方法，就是计算数学的任务，它是各种计算性学科的联系纽带和共性基础，兼有基础性、应用性和边缘性的数学学科.计算数学作为数学科学的新分支，当然具有数学科学抽象性与严密性的特点，它面向的是数学问题本身而不是具体的物理模型，但它又是各计算学科共同的基础.

科学计算、理论研究、科学实验是现代科学发展的三种主要手段，它们相辅相成又互相独立.科学计算是一门工具性、方法性、边缘性的学科，发展迅速.在实际应用中所导出的数学模型其完备形式往往不能方便地求出精确解，于是只能转化为简化模型，如将复杂的非线性模型忽略一些因素而简化为线性模型，但这样做往往不能满足精度要求。因此，目前使用数值方法来直接求解较少简化的模型，可以得到满足精度要求的结果，使科学计算发挥更大作用，这正是得益于计算机与计算数学的快速发展.

1.1.3　计算方法与计算机

计算方法与计算工具发展密切相关，在电子计算机出现以前，计算工具只有算图、算表、算尺和手摇及电动计算机，计算方法只能计算规模较小的问题.计算方法是数学的一个重要组成部分，很多计算方法都与当时著名科学家的名字相联系，如 Newton(牛顿)插值公式，方程求根的 Newton 法，解线性方程组的 Gauss(高斯)消去法.求多项式值的秦九韶算法，此算法是我国宋代数学家秦九韶(公元 13 世纪)最先提出的.还有我国古代数学家祖冲之(公元 5 世纪)利用“缀术”求得圆周率 $\pi\approx3.1415926$，这是 16 世纪前最好的结果.这都说明计算方法是数学科学的一部分，它没有形成单独的学科分支，只有在计算机出现以后，才使计算方法迅速

发展并成为数学学科中一个独立分支——计算数学.

当代计算能力的大幅度提高既来自计算机的进步,也来自计算方法的进步,两者发展相辅相成又互相促进.例如,1955 年至 1975 年的 20 年间计算机的运算速度提高数千倍,而同一时期解决一定规模的椭圆型偏微分方程计算方法的效率提高约一百万倍,说明计算方法的进步对提高计算能力更为显著.由于计算规模的不断扩大和计算方法的发展启发了新的计算机体系结构,诞生并发展了并行计算机.而计算机的更新换代也对计算方法提出了新的标准和要求.自计算机诞生以来,经典的计算方法业已经历了一个重新评价、筛选、改造和创新的过程,与此同时涌现了许多新概念、新课题和能发挥计算机解题潜力的新方法,这就构成了现代意义下的计算数学.

1.1.4 数值问题与算法

能用计算机计算的"数值问题"是指输入数据(即问题中的自变量与原始数据)与输出数据(结果)之间函数关系的一个确定而无歧义的描述,输入输出数据可用有限维向量表示.根据这种定义,"数学问题"有的是"数值问题",如线性方程组求解,也有不是"数值问题"的,如常微分方程$\frac{dy}{dx}=x^2+y^2$,$y(0)=0$,它不是数值问题,因为输出不是数据而是连续函数 $y=y(x)$.但只要将连续问题离散化,使输出数据是 $y(x)$ 在求解区间$[a,b]$上的离散点 $x_i=a+ih(i=1,2,\cdots,n)$上的近似值,就是"数值问题",它可用各种数值方法求解,这些数值方法就是算法.计算方法就是研究各种"数值问题"的算法.

计算的基本单位称为算法元,它由算子、输入元和输出元组成.算子可以是简单操作,如算术运算(+,-,×,/)、逻辑运算,也可以是宏操作如向量运算、数组传输、基本初等函数求值等;输入

元和输出元可分别视为若干变量或向量. 由一个或多个算法元组成一个进程，它是算法元的有限序列，一个数值问题的算法是指按规定顺序执行一个或多个完整的进程. 通过它们将输入元变换成一个输出元. 面向计算机的算法可分为串行算法和并行算法两类，只有一个进程的算法适合于串行计算机，称为串行算法. 两个以上进程的算法适合于并行计算机，称为并行算法. 对于一个给定的数值问题可以有许多不同的算法，它们都能给出近似答案，但所需的计算量和得到的精度可能相差很大. 一个面向计算机，有可靠理论分析且计算复杂性好的算法就是一个好算法. 理论分析主要是连续系统的离散化及离散型方程的数值问题求解，它包括误差分析、稳定性、收敛性等基本概念，它刻画了算法的可靠性、准确性. 计算复杂性包含时间复杂性与空间复杂性两方面. 在同一规模、同一精度条件下，计算时间少的算法为时间复杂性好，而占用内存空间少的算法为空间复杂性好，它实际上就是算法中计算量与存储量的分析. 对解同一问题的不同算法其计算复杂性可能差别很大，例如解 n 阶的线性方程组，若依照 Cramer(克拉默)法则用行列式解法要算 $n+1$ 个 n 阶行列式值，对 $n=20$ 的方程组就需要 9.7×10^{21} 次乘除法运算，若用每秒亿次的计算机也要算 30 万年，这是无法实现的，若用 Gauss 列主元消去法(见本书第 3 章)则只需做 3060 次乘除运算. 且 n 愈大相差就愈大，这表明算法研究的重要性，也说明只提高计算机速度，而不改进和选用好的算法是不行的.

1.2　数值计算的算法设计与技巧

1.2.1　多项式求值的秦九韶算法

多项式求值只用乘法和加法运算，适合在计算机上计算，用多项式逼近连续函数也是函数计算的基本方法之一，因此多项式求

值作为计算机中的一个宏操作是经常被使用的.

设给定多项式

$$p(x)=a_0x^n+a_1x^{n-1}+\cdots+a_{n-1}x+a_n=\sum_{i=0}^{n}a_ix^{n-i},\tag{1.2.1}$$

求 x 处的值 $p(x)$，每一项 a_ix^{n-i} 要做 $n-i$ 次乘法，如逐项计算再累加，共需乘法次数为

$$S=\sum_{i=0}^{n}(n-i)=1+2+\cdots+n=\frac{n(n+1)}{2}=O(n^2)$$

次，加法运算次数为 n 次. 若将 $p(x)$ 改为

$$p(x)=((a_0x+a_1)x+\cdots+a_{n-1})x+a_n,$$

可表示为

$$\begin{aligned}&b_0=a_0,\quad b_1=b_0x+a_1,\\&b_i=b_{i-1}x+a_i,\quad i=1,2,\cdots,n,\end{aligned}\tag{1.2.2}$$

则 $b_n=p(x)$ 即为所求，称(1.2.2)式为秦九韶算法，它只用 n 次乘法和 n 次加法，且只需用 $n+2$ 个存储单元，乘法次数由 $O(n^2)$ 降为 $O(n)$，这是计算多项式值复杂性最好的算法. 秦九韶是我国南宋数学家，他于 1247 年提出此算法. 国外称此算法为 Hornor 算法，是 1819 年才给出的，比秦九韶算法晚了 500 多年。

减少乘除法运算次数是算法设计中十分重要的问题，在信号处理中广泛使用的离散 Fourier 变换(DFT)，由于计算量太大无法使用，直至 20 世纪 60 年代提出了快速 Fourier 变换(FFT)才使计算成为可能，这是快速计算的典型范例.

1.2.2 迭代法与开方求值

迭代法是一种逐次逼近真值的算法，是计算方法中普遍使用的重要算法. 以开方运算为例，它不是四则运算，在计算机中计算开方用的就是迭代法.

假定 $a>0$，求$\sqrt{a}$等价于解方程

$$x^2 - a = 0. \tag{1.2.3}$$

这是方程求根问题，可用迭代法求解(见本书第 2 章)．现在用简单方法构造迭代法，先给一个初始近似 $x_0>0$，令 $x=x_0+\Delta x$，Δx 是一个校正量，称为增量，于是(1.2.3)式化为

$$(x_0+\Delta x)^2 = a, \quad 即 \quad x_0^2 + 2x_0\Delta x + (\Delta x)^2 = a^2.$$

由于 Δx 是小量，若省略高阶项$(\Delta x)^2$，则得

$$x_0^2 + 2x_0\Delta x \approx a, \quad 即 \quad \Delta x \approx \frac{1}{2}\left(\frac{a}{x_0} - x_0\right).$$

于是

$$x = x_0 + \Delta x \approx \frac{1}{2}\left(x_0 + \frac{a}{x_0}\right) = x_1.$$

这里 x_1 不是$\sqrt{a}$的真值，但它是真值 $x=\sqrt{a}$的进一步近似，重复以上过程可得到迭代公式

$$x_{k+1} = \frac{1}{2}\left(x_k + \frac{a}{x_k}\right), \quad k = 0,1,2,\cdots, \tag{1.2.4}$$

它可逐次求得 $x_1, x_2, \cdots$，若

$$\lim_{k\to\infty} x_k = x^*,$$

则 $x^*=\sqrt{a}$，容易证明序列$\{x_k\}$对任何 $x_0>0$ 均收敛，且收敛很快．

例 1.1　用迭代法(1.2.4)求$\sqrt{3}$，取 $x_0=2$.

解　若计算精确到 10^{-6}，由(1.2.4)式可求得

$$x_1 = 1.75, \quad x_2 = 1.73214,$$

$$x_3 = 1.732051, \quad x_4 = 1.732051$$

计算停止．由于$\sqrt{3}=1.7320508\cdots$，可知只要迭代 3 次误差即小于 $\frac{1}{2}\times 10^{-6}$.

迭代法(1.2.4)每次迭代只做一次除法一次加法与一次移位(右移一位就是除以 2)．计算量很小，计算机中求$\sqrt{a}$一般只要精度

达到 10^{-8} 即可，迭代次数很少，目前计算机(含计算器)中计算$\sqrt{a}$用的就是迭代法(1.2.4).

1.2.3 以直代曲与化整为零

圆周率 π 的计算是古代数学一个光辉成就，早在公元前 3 世纪阿基米德用内接与外切正 96 边形近似圆，求得 $\pi\approx 3.14$. 圆是曲边图形、圆面积的计算是数学方法上以直代曲的典范，公元 3 世纪我国魏晋时期大数学家刘徽(早祖冲之二百多年)用"割圆术"求得 $\pi\approx 3.1416$，他不是将正多边形固定在一个数目上，而是从 6 等分做起，逐次二分各弧段，做 k 次后将圆周分割为 6×2^k 个小扇形，然后以弦代弧，用直线段代替小扇形的曲边，用小三角形面积代替曲边小扇形面积(如图 1.1 所示)，再求和就得圆面积 $S=\pi r^2$ 的近似值 $\bar{S}$，从而可求得 $\pi\approx\dfrac{\bar{S}}{r^2}$. 显然，分割次数越多，结果越准确. "割圆术"中提出"割之又割 "，直至无穷，最终以内接正 6×2^k 边形面积的极限求得圆面积 S，这与 17 世纪发明微积分的思想极其相似！但数值计算不取极限，只是采用以直代曲和化整为零求和的思想. 通常将非线性问题线性化，在几何图形上就是以直代曲. 例如求函数方程 $f(x)=0$ 的根，在几何上 $y=f(x)$是平面上的一条曲线，它与 x 轴交点的横坐标即为方程的根 x^*，假如已给出一个近似根 x_k，用该点$(x_k,f(x_k))$上的切线逼近该曲线，令 x_{k+1} 为该切线与 x 轴交点的横坐标，一般情况下 x_{k+1} 近似方程的根 x^* 比 x_k 近似 x^* 要好(如图 1.2). 上述以直代曲相当于用切线方程

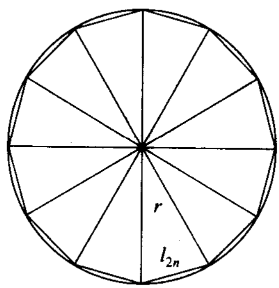

图 1.1

$$y=f(x_k)+f'(x_k)(x-x_k)=0$$