研究生公共数学系列教材

数值计算

◎ 周国标　宋宝瑞　谢建利

Numerical Calculation

高等教育出版社

研究生公共数学系列教材

数值计算

周国标　宋宝瑞　谢建利

高等教育出版社

内容提要

本书的内容属于科学计算的基础部分，包括数值线性代数、数值逼近和方程数值求解三大板块，课程框架由计算方法的设计和算法的数值分析组成，前者研究和提出基于合理数学原理的计算方法，后者对提出的计算方法，从精度和效率两个方向进行分析评价。先后对线性代数方程组、矩阵特征值、非线性方程（组）、插值与拟合逼近、数值微积分、常微分方程初值等问题的数值计算进行详尽的讨论。

全书的叙述体系注重从各种数值现象和实际问题开始，引导读者观察与思考，培养“问题意识”，防止数学概念和定义莫名其妙地从天而降；在突出基本内容的同时，为具有较好数学功底的读者提供了提高的空间。全书采用启发式模式，叙述力求严谨，强调数学训练的难度和强度；每章附有较多的练习题和数值实验。

本书主要为理工医农类与经济管理类学科研究生的公共数学课程编写，也可供数学系本科作为“数值分析”的教材或参考书。对需要较多科学与工程计算的科技人员，本书也是一本合适的参考书。

图书在版编目（CIP）数据

数值计算／周国标，宋宝瑞，谢建利. —北京：高等教育出版社，2008.9

ISBN 978-7-04-024892-0

Ⅰ.数… Ⅱ.①周…②宋…③谢… Ⅲ.数值计算—高等学校—教材 Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2008）第 124114 号

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010－58581118
社　　址	北京市西城区德外大街 4 号	免费咨询	800－810－0598
邮政编码	100120	网　　址	http://www.hep.edu.cn
总　　机	010－58581000		http://www.hep.com.cn
		网上订购	http://www.landraco.com
经　　销	蓝色畅想图书发行有限公司		http://www.landraco.com.cn
印　　刷	北京民族印刷厂	畅想教育	http://www.widedu.com

开　　本	787 × 960　1/16	版　　次	2008 年 9 月第 1 版
印　　张	34.5	印　　次	2008 年 9 月第 1 次印刷
字　　数	640 000	定　　价	58.00 元

物料号　24892-00

前　言

科学计算的兴起是20世纪中意义最重要、影响最深远的科学进步之一，计算机的快速发展，使科学计算与理论分析、实验研究三足鼎立，成为当今科学技术活动的三种主要方式。科学计算能力是现代科学、工程和管理人才不可或缺的基本素养。“数值计算”这门课程（常被称为“数值分析”或“计算方法”）研究如何运用计算机有效地解决常见的数值计算问题及由此衍生的相关数学理论，是理工医农类与经济管理类学科研究生的一门重要数学基础课程，许多学校在本科高年级也开设了它。它的内容属于科学计算的基础部分，包括数值线性代数、数值逼近和方程数值求解三大板块，课程框架由计算方法的设计和算法的数值分析组成，前者研究和提出基于合理数学原理的计算方法，后者对提出的计算方法，从精度和效率两个方面进行分析评价。

研究生数学教育的根本目的是要在较高的层面上引导学生接受理性思维的熏陶、沉淀和积累，提高定量分析的能力，这远比获取知识本身更重要更深刻。数学教学包括“授术”与“传道”。术者，数学知识、方法也；道者，科学视野、精神、思想也，两者不能分离，脱离“术”的道是空洞的，缺乏“道”的术没有根基。“数值计算”特有的内容和思想方法有可能使读者将本科基本数学课程中掌握的概念和理论在“计算”平台上产生升华，从而在学习“术”的同时，领悟“道”的真谛。针对应试教育的弊端，我们在编写本教材时关注下列诸方面。

一、从各种数值现象和实际问题开始，引导读者观察与思考，培养“问题意识”，防止数学概念和定义莫名其妙地从天而降。保持对未知世界的好奇心和理性认识的愿望，是任何创新的基石，提高学生学习兴趣和探索未知的积极性，应从“有”问题开始。科学研究并不神秘，第一步就是观察现象、搜集数据、归纳和提出问题，这也是研究型教学的开端。数值计算中有许多有趣的现象值得引导读者去观察、分析，引导学生养成敏锐地观察有关现象、学会如何去分析、寻找其中的原因、探索解决的道路、设计合理的方法的习惯，是提高学习效果的最好途径。

二、探索启发式教学模式。我们在教学实际中感受到，使初学者困惑的并不是弄清计算方法的步骤，而是算法是怎么“想”出来的，为什么要对算法做这样或那样的讨论和分析。作为教材不仅要告诉学生具体的方法是什么，数值分析是怎样进行的，更要启发学生为什么能够这样设计，为什么需要从这几个角度分析，为什么要这样进行分析。对每一种计算方法，我们尽量从自然的角度引导

思考，推出计算步骤，努力不讲“百分之百正确的”却让学生没有“感觉”的数学，改变传统数学教科书中的“定义—定理—证明”的灌输式模式，采用启发式的教学模式，尽量把定义的引入原因和理由，把对定理的证明思想和方法融化在对问题解决的探索过程中。事实证明，这样的叙述体系比较符合认识和接受新事物的认知规律性。

三、加强练习和动手能力的训练，提高训练的强度。数学不可能是手把手“教”会的，较好的方式是在教师的引导下自己去“学”会，在不断地犯错误的过程中领悟真谛，许多数值现象在自己通过计算和思考后才能深切地认识。在教学诸环节中，突出和强调课前预习，课后练习和数值实验。讲课要精，没有必要什么都讲，代替学生思考；练习要多，只有自己体会到的才能真正理解。很多本来需要课堂讲解的内容，可以通过习题让学生自己来得出，这样做远比教师灌输强。

四、我们认为作为研究生教材，除了公认的特点如系统性、严密性、先进性等外，还需要具备另一些要求。比如，要注意培养学生的批判性。创新需要怀疑与批判精神，在应试模式下，年轻人固有的好奇心和怀疑批判精神被压抑和弱化，常习惯于从老师和书本那里知道问题和结果。研究生教材必须改变之，应该让学生知道现有知识的局限性，阶段性和可证伪性，需要指出研究的前沿在哪里，为什么在那里，有什么可能突破的动向等。更重要的是，为了适应研究生培养模式的多样化，教材不能“一刀切”，仅包含大纲指定的基本内容，让同一批学生获得同样的信息和训练。我们希望有不同学术追求和品味、不同数学基础的读者，在学习这门课时，能够得到不同层次的启发、收获和提高。因此，本书除了基本内容外，还搭建了较大的提高空间，以满足那些求知欲望强烈的同学的需要。最后，教材不等同于课堂讲稿，讲课要精，但教材不必，而且要具有可读性，因为即便是研究生，作为数学基础课，教材还是他们的第一手阅读材料。对本书中的内容，任课教师可以根据学生的实际情况作适当的取舍。

我们的上述初衷能否得到体现，需要时间和实践的检验，还希望得到读者的批评指正。

全书由周国标策划，分章编写，周国标编写第一、二、三、四、五、八章，宋宝瑞编写第六、七章，谢建利编写第九章。

我们在研究生公共数学课程改革的探索工作，得到校领导的支持和学校985项目的资助；本书的编写，是在研究生院杜朝辉、刘明柱副院长，数学系主任王维克教授，章璞教授，王承国教授等直接关心下完成的。没有这些支持，本书的问世是不可能的。数学系计算与运筹教研组的同仁们给予很大鼓励，李大明为第二、三、五章做了很多准备工作，编选了部分习题。我们的研究生在文稿输入和习题方面，做了很多具体工作。高等教育出版社的张长虹、蒋青、李茜编辑

为提高本书的质量付出了辛勤的劳动。在此表示衷心感谢。编写过程中我们参考了国内外众多文献，难以在参考文献中全部列出，恕不一一致谢。

本教材许多章节的处理虽经再三修改依然不太满意，在加强基础内容的同时，如何引出数值计算的近代发展，把握得不准，习题的编选和数值实验的设计，还缺少反复修订。各人编写成章，也使全书风格不统一。我们深切地感到编写一本好的数学基础教材的不易。限于作者的水平，问题和不足之处在所难免，诚盼得到同行和读者的批评指正，以便改进和提高。

作　者

于上海交通大学思源湖畔

2008.4

目　录

第一章　数值计算导论

本章主要介绍"数值计算"这门课程的研究对象、内容、数值计算基本思想及实现方法、误差分析基础和算法的若干重要概念,引导读者对科学计算及本课程有一个大致的直观认识和了解.

§1　数学问题与数值计算问题

运用数学理论和方法解决实际问题的一般过程包括几个阶段.第一阶段为建立模型.这个阶段可分成两步.先把一个实际问题归纳、抽象、提炼为一个恰当的数学问题,这是极为关键的一步.同一个实际问题,根据不同的研究角度和要求,可以抽象为不同的数学问题.第二步是将提出的数学问题用合适的数学模型来描述,数学问题的提法不同,可得出不同类型的模型.研究者的数学修养和能力在这一步常起到决定性作用.

建立模型之后,第二阶段便是分析与求解该模型.分析和求解问题常以对应数学分支的数学理论作为支撑,提供求解方法,由此求得的解称为**理论解或解析解**.我们以前学的各门数学课程,基本上属于分析和寻求理论解的内容.不幸的是,许多已有数学理论常常难以为求得解析解提供可接受的途径.实践表明,求解数学模型,特别是对从实际中提炼出的问题所得到的数学模型,采用数值计算方法是求解的现实之路.正是这个事实,成为激励和促进计算数学发展的主要动力.

进行科学计算的第一步,需要把一个数学问题转化为一个相应的**数值问题(或数值计算问题),数值问题是指输入数据(即问题实例所提供的原始数据)与输出数据(即该问题要求的计算结果)之间函数关系的一个确定而无歧义的描述**.数值方法是相对于数值计算问题而言的.有些数学问题本身就是一个数值计算问题;很多数学问题不是数值问题,但它往往可用数值问题来逼近.所以科学计算面对的是数值计算问题.

例 1.1　解常微分方程 $\dfrac{dy}{dx}=x^2+y^2, y(0)=5$,是一个数学问题,要求输出的解是连续函数 $y=y(x)$.许多微分方程难以直接求出函数 $y=y(x)$,如果改为规定输出 $y(x)$ 在离散点 $x=h,2h,3h,\cdots,nh$ 处的函数近似值,这就把原问题转化为一个数值问题.我们在"高等数学"学过的 Euler 折线法是一种比较简单但

精度甚低的数值计算方法. 本课程将系统地研究这类问题.

又如,计算多项式 $P(x)=a_0x^n+a_1x^{n-1}+\cdots+a_{n-1}x+a_n$ 在 $x=5$ 的值,这本身是数学问题,但同时又是一个数值问题,因为输入数据为数值 $a_0,a_1,\cdots,a_n,x$,输出数据为 $P(5)$ 的数值.

按照建立数值问题的基本形式,数学问题基本上可归为**两大类**. **一类包含非有理函数或未知函数**,比如积分和微分计算,微分方程求解等,对它们的求解和计算一般需要转化为数值问题,转化的基本途径是利用函数逼近或离散化,常变为多项式或有理函数的表达形式,这是因为多项式或有理函数在计算机上容易作四则运算. **另一类数学问题主要是代数问题**,它们不含非有理函数,本身就是数值问题,不用再作转化. 非线性方程求解也属于此类.

作为数值计算的基础部分,本课程主要面向**三大类**计算任务.

第一类计算任务是求值,指数字运算和对数学对象计算其数值,包括四则运算、乘方开方、多项式求值、一般函数的求值、代数运算求值、微积分运算求值等,这是最常见的计算. 例如,求正数 a 的平方根,求计算多项式在某点的值,求函数 $F(x_1,x_2,x_3)$ 关于某变量偏导数在某点的值,求积分 $\int_0^{\pi}\sqrt{1+k\sin^2 x}\,\mathrm{d}x$ 的值,求复杂函数 $F(x)$ 的增量比 $\dfrac{\Delta F}{\Delta x}$ 等. 表面上看,这些计算都很常规,但是在实际计算并在计算机上实现时,会出现我们以前学习过的"纯粹"数学计算所没有关注的现象与问题. 从下面两个例子可以看到即使是简单的求值也不那么"直接"与方便.

例 1.2　设函数 $y=f(x)$,计算它在 x_0 处的函数增量比 $\left.\dfrac{\Delta f}{\Delta x}\right|_{x=x_0}$.

解:容易写出 $\left.\dfrac{\Delta f}{\Delta x}\right|_{x=x_0}=\dfrac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x}$,似乎照着计算就可以了,但是分母 $\Delta x=(x_0+\Delta x)-x_0$,两点越靠近,$\Delta x$ 的有效数字的损失就越多,计算误差就越大. 所以,理论上无误的计算,实际上存在着算不准甚至无法算的问题,需要设计合理的计算方法来解决此类问题.

例 1.3　计算积分有著名的 Newton-Leibniz 公式 $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=F(b)-F(a)$,其中 $F(x)$ 是 $f(x)$ 的原函数. 如果被积函数的原函数能够求出,那么定积分问题就化为原函数边界上函数值之差. 但困难的是,大量被积函数的原函数不能够用初等函数表示,有些则难以求出,而且,实际问题中被积函数常用测量数据代替. 所以,数值计算方法是计算复杂积分的基本途径.

第二类计算任务是方程求解. 方程求解是量大面广的数学问题. **所谓方程是含有未知量的等式,方程求解或解方程是指运用数学方法得到未知量**. 根据被求

解的未知量是数值还是函数，方程可分为**数值方程**和**函数方程**两大类.

数值方程指不包含未知量的分析运算（微分，积分，变分等）的方程，常被称为非线性方程（组），它包括**代数方程**、**超越方程**、**差分方程（组）**等. 由多项式等式构成的方程称为代数方程（组），其余的则统称为超越方程（组）. 数值方程的解是一个常值（数，向量或矩阵等）. 求解代数方程是早期代数学的中心课题. 古希腊时已知道解一元一次和一元二次方程的方法；到欧洲文艺复兴时期，又得到了解一元三次和一元四次方程的求根公式，不过计算已比较麻烦. 在以后两百多年中，数学家们苦苦寻求五次及五次以上代数方程的求根公式，却屡遭失败，直到 1826 年，挪威数学家 Abel 证明，五次和高于五次的代数方程不存在有限根式的求根公式. 法国年轻的数学家 Galois 在 1831 年则用全新的概念明确了高次方程有没有根式解取决于其 Galois 群的结构，代数学从此发生了飞跃. 但是，漂亮的理论并没有给出高次方程的求解方法，数值方法是求解高次方程的有效途径.

例 1.4 建筑中的薄壳结构具有令人满意的力学性能和使用效果，工程设计时需要对它作静力分析. 通过壳的静力平衡方程、物理方程、几何方程，可列出一组三个偏微分联立方程. 运用 Fourier 级数方法等可以推导得到一个齐次线性代数方程组（其中符号的意义在此不解释）.

$$\begin{pmatrix} 2t_1\lambda^2-m^2 & m\lambda & 0 \\ m\lambda & 2t_2m^2=\lambda^2 & 2t_2m \\ 0 & t_2m & t_2+\dfrac{k}{f_1\lambda^4-2\lambda^2m^2+f_2m^4} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \\ w_0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{1.1}$$

由线性代数知，上述方程组有非零解的充要条件是其系数矩阵为奇异矩阵，故其行列式为零，由此可得到未知量 m 的 8 次代数方程，求解此方程就只能依靠数值计算方法.

求解数值方程（组）本身是一个数学问题，同时又是一个数值计算问题，因为它的输入是方程数据，输出的解也是数据. 实际中存在大量复杂函数关系的超越方程，除了少数特例，即便是简单的超越方程，也不存在通用的公式解法. 比如下面的非线性超越方程组就难以直接求得其解.

例 1.5 求解
$$\begin{cases} x_1^2-625x_2^2x_3-1=0, \\ 3x_1-\cos\ (x_2x_3)-0.5=0, \\ e^{-x_1x_2}+20x_3+\dfrac{10\pi-3}{3}=0. \end{cases} \tag{1.2}$$

数学和科学、工程中有大量问题，最后归结为求解**数值线性代数问题**，这一大类数值计算问题与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有关，故又称为**矩阵计算**，其核心方程的形式包括线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 和另一类特殊的线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{x}$ 两种. **数值线性代数**是数值计算中一个非常重要的领域，它包括