



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

内容提要

研究生公共数学系列教材

数值计算

周国标 宋宝瑞 谢建利

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 978-7-04-024893-0

I. ①数… II. ①周… ②宋… ③谢… III. ①数值计算—高等学校—教材 IV. ①O241

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	地址	北京市西城区德胜大街4号	邮政编码	100130	总发行	010-2881000
社址	北京市西城区德胜大街4号	网址	http://www.hep.edu.cn	电话	800-810-0298	电子邮箱	010-28811118
社址	北京市西城区德胜大街4号	网址	http://www.hep.com.cn	电话	800-810-0298	电子邮箱	010-28811118
社址	北京市西城区德胜大街4号	网址	http://www.landao.com.cn	电话	800-810-0298	电子邮箱	010-28811118
社址	北京市西城区德胜大街4号	网址	http://www.landao.com.cn	电话	800-810-0298	电子邮箱	010-28811118
社址	北京市西城区德胜大街4号	网址	http://www.widedu.com	电话	800-810-0298	电子邮箱	010-28811118

高等教育出版社

010-2881000

开本 787×960 1/16

版次 2008年9月第1版

印次 2008年9月第1次印刷

本社地址: 北京市西城区德胜大街4号
邮政编码: 100130

电话: 010-2881000

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
社 址 北京市西城区德外大街 4 号
邮政编码 100120
总 机 010-58581000

经 销 蓝色畅想图书发行有限公司
印 刷 北京民族印刷厂

购书热线 010-58581118
免费咨询 800-810-0598
网 址 <http://www.hep.edu.cn>
<http://www.hep.com.cn>
网上订购 <http://www.landraco.com>
<http://www.landraco.com.cn>
畅想教育 <http://www.widedu.com>

开 本 787 × 960 1/16
印 张 34.5
字 数 640 000

版 次 2008 年 9 月第 1 版
印 次 2008 年 9 月第 1 次印刷
定 价 58.00 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

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	1
§1 数学问题与数值计算问题	1
§2 数值计算的基本数学思想与方法	9
2.1 数值计算的基本思想	9
2.2 数值计算的基本方法	16
§3 计算误差的基本概念和误差分析	18
3.1 误差来源的分类	19
3.2 绝对误差、相对误差与有效数字	21
3.3 算术运算的误差	25
3.4 适定性与稳定性	29
3.5 避免和减少误差的若干计算原则	33
§4 算法性态分析概述	35
4.1 计算复杂度——计算的代价	36
4.2 收敛率——计算的速度	39
§5 问题与探索	41
5.1 数值问题的病态性	41
5.2 迭代法的收敛性及其收敛速度(收敛率)	43
5.3 20 世纪十大算法	44
5.4 线性代数方程组问题与建模	45
习题一	47
数值实验一	50
数值实验 1.1 迭代法的设计与运行	50
数值实验 1.2 函数逼近	50
第二章 求解线性代数方程组的直接方法	52
§1 引言	52
§2 初等下三角形矩阵——Gauss 变换矩阵	55
§3 Gauss 消元法	58
3.1 顺序 Gauss 消元法	58
3.2 消元过程的可行性	64
3.3 Gauss 消元法的矩阵分析	66
3.4 Gauss 主元消元法	68
§4 三角分解法	72
4.1 直接三角分解法	72

4.2 列主元三角分解法	76
4.3 带状对角形方程组的三角分解法	76
4.4 正定矩阵的三角分解法	84
§5 向量与矩阵的范数	87
5.1 线性空间中的范数	87
5.2 几个常用的向量范数	90
5.3 向量范数的等价性	93
5.4 矩阵范数	94
5.5 几个常用的诱导矩阵范数	97
5.6 范数的若干应用	100
§6 线性方程组的误差分析及其性态	103
6.1 直接法的误差分析	103
6.2 线性方程组的条件数	106
§7 问题与探索	107
7.1 条件数的近似计算	107
7.2 迭代改善法	109
7.3 求解拟三对角线性方程组的直接方法	109
本章评述	111
习题二	111
数值实验二	116
数值实验 2.1 电阻网络问题的求解	116
数值实验 2.2 时间序列模型的求解	116
第三章 求解线性代数方程组的迭代法	118
§1 引言	118
§2 基本迭代法及其构造	123
§3 基本迭代法的收敛理论	132
3.1 迭代法的收敛性分析	132
3.2 收敛定理	133
3.3 误差估计	136
§4 几类特殊方程的基本迭代法的收敛性	138
4.1 对角占优矩阵方程的基本迭代法的收敛性	138
4.2 对称正定矩阵方程的基本迭代法的收敛性	142
4.3 SOR 迭代格式的收敛性	144
4.4 Richardson 迭代格式的收敛性	147
§5 迭代加速方法	148
5.1 多项式加速方法	148
5.2 SOR 迭代的最优松弛因子	150
§6 求解 $Ax=b$ 的变分原理与共轭梯度法	158

6.1 求解 $Ax = b$ 的变分原理与最速下降法	158
6.2 最速下降法的收敛性	161
6.3 共轭方向法	163
6.4 共轭梯度法	166
6.5 共轭梯度法的收敛性	169
6.6 求解非奇异方程组的共轭梯度法	170
§ 7 问题与探索	171
7.1 不动点原理	171
7.2 预处理共轭梯度法	175
7.3 最优松弛因子的实用选择方法	178
本章评述	178
习题三	179
数值实验三	184
数值实验 3.1 基本迭代法的运行(1)	184
数值实验 3.2 基本迭代法的运行(2)	185
数值实验 3.3 迭代法的进一步认识(1)	185
数值实验 3.4 迭代法的进一步认识(2)	185
第四章 非线性方程组的数值求解	186
§ 1 概述	186
§ 2 非线性方程的根的定位和二分法	187
2.1 根的定位	187
2.2 二分法	193
§ 3 基于不动点原理的迭代法	195
3.1 不动点方程与不动点迭代法	195
3.2 不动点的存在性与迭代法的全局收敛性	197
3.3 迭代法的局部收敛性与收敛阶	199
3.4 迭代法收敛的加速方法	201
§ 4 Newton 法(切线法)	206
4.1 Newton 法及其迭代格式	206
4.2 Newton 法的收敛性	207
4.3 求重根的修正 Newton 法	210
4.4 Newton 法的进一步研究	212
§ 5 非线性方程组的数值求解的基本方法	218
5.1 概述	218
5.2 向量值函数的可微性	221
5.3 不动点迭代法及其局部收敛性	225
5.4 Newton 迭代法	228
§ 6 非线性方程组的数值方法的进一步研究	232

6.1	同伦算法	232
6.2	拟 Newton 法	234
§ 7	问题与探索	236
7.1	方程重根数的计算方法	236
7.2	基于变分原理的最小二乘法	237
7.3	矩阵特征值问题的实例	238
	本章评述	241
	习题四	241
	数值实验四	246
数值实验 4.1	算法的设计和性能比较研究	246
数值实验 4.2	Newton 法收敛域的结构和局部收敛性	246
数值实验 4.3	一般迭代格式的复杂行为	247
数值实验 4.4	非线性方程组的数值求解	247
第五章 矩阵特征值问题的数值方法		248
§ 1	矩阵特征值问题的有关基础	248
§ 2	乘幂法与反乘幂法	254
2.1	乘幂法的基本原理	254
2.2	乘幂法的计算格式	258
2.3	加速收敛技术	261
2.4	反乘幂法与 Rayleigh 商迭代法 (RQI)	263
2.5	基于乘幂法的降阶收缩方法	265
§ 3	常用的线性变换工具	267
3.1	正交上三角化变换	267
3.2	Householder 反射变换	268
3.3	实现正交三角分解的 Givens 旋转变换和 Schmidt 变换	276
§ 4	求解一般矩阵特征值问题的 QR 方法	280
4.1	基本 QR 迭代格式	280
4.2	QR 方法的收敛性	282
4.3	QR 方法的预处理	284
4.4	带平移 QR 迭代方法	289
§ 5	对称矩阵特征值问题	293
5.1	乘幂法	293
5.2	对称 QR 方法	294
5.3	Householder 方法	295
5.4	Jacobi 方法	299
§ 6	问题与探索	304
6.1	Krylov 子空间方法的基本思想	304
6.2	Arnoldi 过程	305

6.3 Lanczos 过程	308
本章评述	310
习题五	311
数值实验五	316
数值实验 5.1 矩阵特征值问题条件数的估计	316
数值实验 5.2 QR 方法的实施	316
数值实验 5.3 对称矩阵特征值问题的不同方法的比较	317
第六章 数值逼近问题(I)——插值及其数值计算	318
§1 插值的基本概念	318
§2 多项式插值	319
2.1 Lagrange 插值	319
2.2 插值多项式的插值余项	321
2.3 Newton 插值	323
2.4 有限差分计算	325
2.5 等距节点上的插值公式	330
2.6 Hermite 插值	332
2.7 Newton-Hermite 插值公式	333
§3 分段线性插值	334
§4 三次样条插值	336
4.1 三次样条函数	336
4.2 三次样条插值的计算	337
4.3 误差界与收敛性	339
§5 B-样条函数	339
5.1 n 次样条函数空间	340
5.2 B-样条及其性质	341
§6 问题与探索	345
6.1 Lagrange-Hermite 插值公式	345
本章评述	348
习题六	348
数值实验六	352
数值实验 6.1 观察 Lagrange 插值的 Runge 现象	352
数值实验 6.2 验证三次样条函数插值是否有几何不变性	352
第七章 数值逼近问题(II)——函数的最优逼近与拟合	354
§1 线性赋范空间中的逼近问题	354
1.1 函数逼近与函数空间	354
1.2 赋范线性空间中的最佳逼近	355
§2 最佳一致逼近	356
§3 最小零偏差多项式及其应用	358

3.1	Chebyshev 多项式	358
3.2	代数插值余项的极小化	360
3.3	Taylor 级数项数的节约	361
§4	最佳平方逼近	363
4.1	线性内积空间	363
4.2	线性内积空间的最佳逼近	363
4.3	函数的最佳平方逼近	366
4.4	正交基	369
§5	正交多项式	371
5.1	Legendre 多项式	371
5.2	Chebyshev 多项式	373
5.3	无穷区间上的正交多项式	374
§6	离散情况的最佳平方逼近	375
§7	数据拟合的最小二乘法	378
7.1	问题的引入	378
7.2	一般提法	380
§8	有理函数插值与逼近	383
§9	Padé 逼近方法	388
§10	快速 Fourier 变换 (FFT)	393
10.1	三角函数插值和有限 Fourier 变换	393
10.2	快速 Fourier 变换	395
10.3	计算实例与倒地址问题	398
§11	问题与探索	399
11.1	最小二乘法模型中的线性和非线性函数	399
11.2	带约束条件的最小二乘法	400
	本章评述	404
	习题七	404
	数值实验七	407
	数值实验 7.1 非线性最小二乘拟合方法的比较	407
	数值实验 7.2 最佳平方逼近多项式的收敛性	407
	数值实验 7.3 Padé 逼近的收敛性	407
	数值实验 7.4 函数平方逼近多项式的均方误差计算	408
	第八章 数值积分与数值微分	409
§1	概述	409
1.1	数值积分与数值微分问题	409
1.2	数值积分的基本思想	409
§2	插值型求积法	413
2.1	插值型求积公式	413

2.2	Newton-Cotes 公式	415
2.3	插值型求积公式的收敛性和数值稳定性	419
§ 3	复化求积法	421
3.1	复化梯形公式	421
3.2	复化 Simpson 公式	423
3.3	复化 Cotes 公式	425
§ 4	外推积分法与 Romberg 求积公式	426
4.1	外推法的基本思想	426
4.2	Euler-Maclaurin 求和公式	428
4.3	Richardson 外推法	431
4.4	Romberg 求积公式	433
§ 5	Gauss 求积法	435
5.1	引言	435
5.2	Gauss 数值求积原理及其性质	437
5.3	几种常用的 Gauss 求积公式	442
§ 6	重积分的数值计算	447
6.1	矩形区域上的二重梯形公式	447
6.2	矩形区域上的二重 Simpson 公式	449
§ 7	数值微分	450
7.1	基于插值法的数值微分法	450
7.2	样条插值函数数值微分法	452
7.3	化微分问题为积分问题的数值微分法	453
§ 8	问题与探索	454
8.1	积分方程的数值解	454
8.2	非标准权函数的 Gauss 求积公式的构造	456
8.3	常微分方程问题及其模型	457
本章评述		459
习题八		460
数值实验八		464
数值实验 8.1	复化梯形积分法、复化 Simpson 积分法和 Gauss 积分法的实验比较	464
数值实验 8.2	数值积分法用于积分方程求解	465
数值实验 8.3	数值微分法用于偏微分方程求解	465
数值实验 8.4	样条插值函数求积法	465
第九章	常微分方程初值问题的数值方法	467
§ 1	引言	467
1.1	解析解的理论结果	467
1.2	数值求解的基本思想	468

§ 2 简单的数值方法及其分析	469
2.1 Euler 法及其几何解释	469
2.2 Euler 法误差分析	471
2.3 其他简单单步法	474
2.4 单步法的局部截断误差与阶	476
§ 3 Runge-Kutta 方法	478
3.1 Taylor 级数法	478
3.2 RK 方法的构造	479
3.3 二阶显式 RK 方法	480
3.4 三阶与四阶显式 RK 方法	482
3.5 隐式与半隐式 RK 方法	484
§ 4 单步法的收敛性与稳定性	485
4.1 收敛性与相容性	486
4.2 整体截断误差估计及其应用	488
4.3 绝对稳定性与绝对稳定区域	491
§ 5 线性多步法	494
5.1 线性多步法的构造——数值积分法	494
5.2 线性多步法的构造——待定系数法	496
5.3 线性多步法的收敛性和稳定性	498
5.4 线性多步法的应用	504
§ 6 求解方程组和高阶方程的数值方法	507
6.1 一阶方程组	508
6.2 化高阶方程为一阶方程组	510
§ 7 问题与探索	511
7.1 刚性微分方程问题	511
7.2 微分方程边值问题的数值方法	512
7.3 微分方程的动力迭代法	515
本章评述	517
习题九	517
数值实验九	522
数值实验 9.1 观察显式 Euler 法的数值不稳定性	522
数值实验 9.2 观察当解不光滑时数值方法的收敛性	522
数值实验 9.3 初步认识刚性微分方程	522
数值实验 9.4 边值问题的数值方法	522
数值实验 9.5 简单的捕食模型	523
主要参考文献	524
名词索引	527

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 and 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 $\frac{dy}{dx} = x^2 + y^2, y(0) = 5$, 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 $x = h, 2h, 3h, \dots, nh$ 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 $\int_0^\pi \sqrt{1+k\sin^2 x} dx$ 的值, 求复杂函数 $F(x)$ 的增量比 $\frac{\Delta F}{\Delta x}$ 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 $\left. \frac{\Delta f}{\Delta x} \right|_{x=x_0}$.

解: 容易写出 $\left. \frac{\Delta f}{\Delta x} \right|_{x=x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$, 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, Δx 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 $\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$, 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).

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

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.

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

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 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 $Ax = b$ 和另一类特殊的线性方程组 $Ax = \lambda x$ 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