浙江省级重点学科应用数学教学改革与科学研究丛书

数值计算基础

主　编　陆建芳
副主编　谢聪聪　练晓鹏

科 学 出 版 社

浙江省级重点学科应用数学教学改革与科学研究丛书

数值计算基础

主　编　陆建芳

副主编　谢聪聪　练晓鹏

浙江工业大学重点教材建设项目基金资助

科学出版社

北　京

内 容 简 介

本书弱化了理论的严密证明，代之以简单的推导与方法的说明，加强了例题的示范作用，是浙江工业大学教学改革的系列教材之一.

本书主要介绍数值计算的基本理论与方法，内容包括数值计算引论、解线性方程组的直接法、解线性方程组的迭代法、非线性方程(组)的数值解法、插值法、逼近、数值积分与数值微分、常微分方程初值问题数值算法等. 对于数学系的学生，教学内容可侧重算法的理论部分；对于一般工科的学生，教学内容可侧重算法的实用性和实验性部分.

本书可作为应用数学、工程技术和其他相关专业本科生或研究生"数值计算"课程的教材，也可作为计算数学和工程技术人员的参考用书.

图书在版编目(CIP)数据

数值计算基础/陆建芳主编. —北京：科学出版社，2013
(浙江省级重点学科应用数学教学改革与科学研究丛书)
ISBN 978-7-03-037624-4

I. ①数… II. ①陆… III. ①数值计算 IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 114624 号

责任编辑：石 悦/责任校对：刘亚琦
责任印制：阎 磊/封面设计：华路天然设计工作室

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

新科印刷有限公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2013 年 9 月第 一 版 开本：720 × 1000 B5
2013 年 9 月第一次印刷 印张：17 3/4
字数：341 000

定价：35.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

“浙江省级重点学科应用数学教学改革与科学研究丛书”

编　委　会

总　　序

近年来, 关于数学的各种新观点不断出现.

有一种观点认为, 随着数学的发展, 数学已经从自然科学中分离出来, 成为独立的科学门类——数学科学.

持这种观点的学者的依据是：①从现代数学的发展情况可以看出, 数学的许多内容和方法的产生, 不再是基于研究自然界中存在的物质运动规律的需要, 而是基于数学自身的需要. 例如, 6=3+3, 8=3+5, 10=5+5=3+7, 等等, 即每一个大于等于6的偶数都可以表示为两个奇素数的和, 这就是哥德巴赫猜想, 至今没有证明. 但是, 这样一个在数学中显得十分重要的著名的猜想, 其结果的对与否, 不会对数学之外的任何学科产生影响, 证明它不是自然科学的需要, 而仅仅是数学科学的需要. ②数学不仅具有应用功能, 而且具有其他学科不能比拟的教育功能. 数学的应用功能表现在：没有数学, 现代科技无从谈起；任何一种学科, 只有应用了数学, 才能成为科学学科. 数学的教育功能表现在：在中国, 语文、数学、英语被认为是初等教育中最重要的三门课程；在世界范围内, 有不学中文的学生, 有不学英语的学生, 但没有不学数学的学生.

我同意这种观点, 希望在数学教学改革和科学研究中体现这种观点.

数学教学改革, 首先需要的是教材的改革, 而教材的改革, 涉及的只有两个方面：一是内容; 二是方法.

如何在一本数学教材中以数学科学的观点选取内容、介绍方法?

我的认识是：无论是选取内容方面, 还是介绍方法方面, 都要关注数学的应用功能和教育功能的展现.

在内容的选取方面, 既不是不管数学的教育功能, 狭隘地全部以目前生产生活的实际应用为目的, 打乱系统, 什么“有用”就选什么, 什么“没用”就跳过什么; 也不是完全从数学的需要出发, 一点也不考虑所选取的内容和实际应用的联系. 本套丛书采取有实际应用背景的内容优先选取的原则. 我们的考虑是：没有迹象表明, 没有实际应用背景的内容在体现数学的教育功能时强于有实际应用背景的内容, 既然如此, 后者更有利于同时展现数学的应用功能和教育功能.

在方法的介绍方面, 既不完全采用公理化体系的做法, 让读者在接受严格数学训练的基础上自然地受到数学科学的熏陶; 也不完全摒弃数学特有的推理过程, 以急功近利的方式只讲结果, 只讲计算公式. 我们知道, 公理化体系的做法是将数学的训练目的不直接说出来, 而是藏起来, 藏在严密的过程背后, 让学生不知不觉得到严格的数学训练. 这种体系在介绍内容时, 不交代前因后果, 一上来就是莫名其妙的定义、公理, 然后一步步以极其严密的方式展开讨论. 这种做法在知识门类相对少的过去是有效的, 但在知识爆炸、课程门类不断增加、学生同时要有做学问和实际应用两

手准备的现在, 没有时间这样做. 训练要有, 但训练目的不是藏起来, 而是尽可能直接讲出来. 例如, 数学书籍中一定会用到归纳法、演绎法、反证法, 这些方法不是数学特有的, 但可以被数学最为有效地传授给学生, 这一事实恰好可以说明数学的教育功能的强大. 但是, 如果我们去问一下数学系的毕业生什么是演绎法, 恐怕很少有人能说周全, 究其原因, 是我们的教材没有明确地告诉学生演绎法的基本内容和过程. 本套丛书将致力于改变这种状况.

本套丛书注意到：根据课程和授课对象的不同, 数学的应用功能和教育功能的展现需分层次, 两种功能的展现要有机配合. 例如, 有的数学分支本来就属于应用数学, 对这样的课程, 在选取内容和介绍方法时必须首先保证应用方面的需要, 其次才考虑教育功能的融入; 有的授课对象是文科学生, 对这些学生, 在编写教材时就要充分注意他们的基础、兴趣、思维方式和希望通过数学的学习要达到的目的, 因此要首先考虑数学的教育功能, 其次才考虑应用功能的融入.

现代化的标志是数字化, 也就是要在所有的领域尽最大可能地使用计算机技术, 因此, 在数学教学中, 对数字化的配合和适应是必需的. 为了展现数学的应用功能, 在数学教学的每个环节, 都应该关注计算机技术, 包括有意考虑内容的计算机实现, 如算法问题, 内容与几个成功的数学软件的结合问题. 我们知道, 介绍如何应用数学软件的最好环境, 当为相应的数学课程. 因此, 本套丛书中的教材, 特别注意介绍与主要内容配套的软件的应用, 例如, 介绍相应的MATLAB 软件包的使用.

科学研究成果整理成学术著作, 可以总结和条理化研究问题, 这对于传播研究成果、深化研究工作是有利的, 这些著作还可以作为研究生教材使用.

本套丛书中学术著作的撰写遵循了如下的原则:

首先, 作为介绍学术成果的学术著作要有新内容、新观点, 学术系统应是明显的, 不是杂乱的、拼凑的, 特别是著作中作者的成果应有重要的分量.

其次, 本套丛书中的学术著作特别注意内容的系统性、完备性.

再次, 也是最重要的, 本套丛书中的学术著作, 和教材一样注意展现数学的应用功能和教育功能, 在必要时, 还考虑内容的计算机实现, 如算法问题, 内容与几个成功的数学软件的结合问题.

最后, 在写作细节上, 本套丛书要求作者以严格的科学态度对待自己的著作, 概念和符号应明确, 推导和介绍要细致, 避免突然出现翻遍全书都找不到介绍的概念和符号, 避免用显然、易知等词语掩盖困难的证明过程.

教学改革涉及的问题很多, 有些问题需要一步步解决, 有的还需要根据形势的变化调整解决方案. 我们仅做了初步的尝试, 加之水平有限, 本套丛书中的问题一定很多, 迫切希望读者批评指正.

邱继征
2013年3月8日

前　言

数值计算方法是一种研究并解决数学问题的数值近似方法, 简称计算方法, 在科学研究和工程技术中都会用到. 例如, 在航空航天、地质勘探、城市规划、车辆制造、桥梁设计、天气预报等方面都有计算方法的踪影.

"数值计算基础"是一门专业基础课程, 主要介绍科学计算的基本理论和基本方法, 着眼于算法的构造、实现, 收敛性与稳定性分析及应用等. 它既有数学类课程中理论上的抽象性和严谨性, 又有工程类课程中技术方面的实用性和实验性, 是一门理论性和实践性都很强的课程. 在20世纪70年代以前, 大多数学校仅在数学系的计算数学专业和计算机系开设这门课程. 随着计算机技术的迅速发展和普及, 现在"数值计算基础"几乎已成为所有理工科学生的必修课程.

本书是编者在多年从事"数值分析"、"计算方法"课程教学的基础上, 总结教学经验, 根据浙江工业大学实际情况并吸收众多参考资料长处的基础上编写而成的, 是浙江工业大学教学改革的系列教材之一. 本书以方法为中心, 以例题为载体, 将传统的理论基础和公式推导与算法构造和应用融为一体, 有意忽略复杂繁琐的理论证明和推导, 详细介绍各种算法的基本思想、实现步骤和算法优劣, 用算法缩小数学理论和方法应用的差距. 通过本课程的学习, 学生能够理解并掌握现代科学计算中常用的数值计算方法及原理, 并通过上机实习, 熟练掌握数值计算与数学软件的结合运用, 为解决科学与工程中的实际问题打好基础, 同时为后继课程的学习提供必要的知识.

本书共8章, 主要内容包括数值计算引论、解线性方程组的直接法、解线性方程组的迭代法、非线性方程(组)的数值解法、插值法、逼近、数值积分与数值微分、常微分方程初值问题数值算法. 每章都配备了一定量的习题, 其中(一)为基础题, (二)为较复杂的计算题、证明题及实用性很强的上机题. 书后附有部分习题答案. 对于数学系的学生, 教学内容可侧重算法的理论部分; 对于一般工科的学生, 教学内容可侧重算法的实用性和实验性部分. 我们的宗旨是, 既不以严谨的理论推导为主导, 也不以全篇的数据计算为宗旨, 而是两者兼顾.

本书第1, 3~6章由陆建芳编写, 第7章及各章数值实验部分由谢聪聪编写, 第2, 8章由练晓鹏编写. 全书由陆建芳统稿、审稿, 由谢聪聪完成电子稿的修改及校对工作.

本书可作为应用数学、工程技术和其他相关专业本科生或研究生"数值计算"课程的教材, 也可作为计算数学和工程技术人员的参考用书.

由于编者水平有限, 书中难免有不足之处, 恳请广大读者批评指正.

编　者

2012 年 9 月

目　　录

第 1 章　数值计算引论

1.1　数值计算的对象与特点

数值计算也称**数值分析**或者**计算方法**, 是近代数学的一个重要分支, 它研究用计算机求解各种数学问题的数值方法及其理论分析与计算机实现.

随着计算机的发展和科学技术的进步, 科学与工程计算的应用范围不断扩大, 已经形成了一系列的交叉学科, 如计算物理、计算化学等, 数值计算方法不仅被广泛应用于自然科学, 而且渗透到社会科学的各个领域.

1.1.1　数值计算的目的

我们看到的是一个物理世界, 如机电产品的设计、建筑工程项目的规划、天气预报、尖端武器的研制等, 这些科学技术问题往往会转化成数学问题, 并且运用计算机进行求解. 应用计算机求解各种科学计算问题需要经过以下几个过程:

首先, 根据实际问题建立数学模型. 例如, 建立代数方程、微分方程、积分方程等.

其次, 由数学模型给出数值计算方法. 例如, 函数的插值与逼近、微分与积分的数值计算、线性方程组与非线性方程(组)的数值求解及常微分方程的数值求解等.

最后, 用计算机实现这个过程. 例如, 根据计算方法编制程序, 上机调试并计算出数值结果.

以上是应用计算机解决科学计算问题的标准流程. 研究怎样通过计算机所能执行的基本运算, 求各类数学问题的近似解, 这是数值计算的根本任务, 也是数值计算研究的对象, 所以“数值计算”是一门与计算机密切相关且实用性很强的数学课程. 数值计算的目的是为电子计算机提供计算的依据, 计算机是实现科学计算的工具.

1.1.2　算法的优劣

所谓**算法**, 就是给定一些数据, 按照某种规定的次序进行计算的一个运算序列, 是一个近似的计算过程. 同一个数学问题可以选择不同的算法实现, 但所需的计算量和得到的精确度可能相差很大. 评价算法的优劣有以下三条标准:

(1) 计算量的大小. 求解同一问题可以用不同的算法, 但是它们计算量的大小可能相差很大. 例如, 解n元线性方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b},$$

由Cramer法则

$$x_i = \frac{D_i}{D}, \quad i = 1, 2, \cdots, n,$$

其中

$$D = \det(\boldsymbol{A}), \quad D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1,i-1} & b_1 & a_{1,i+1} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,i-1} & b_n & a_{n,i+1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}.$$

由于行列式的计算是取自不同的行、列元素乘积的代数和, 所以求解线性方程组的n个未知量共要计算$n!(n-1)(n+1)$次乘法运算, n次除法运算(加、减运算量不计), 总运算量为

$$N = n!(n-1)(n+1) + n.$$

如果$n = 20$, 则$N \approx 9.7073 \times 10^{20}$次运算量. 这项计算即使用千亿次超级计算机, 也要连续工作300年才能完成. 这样的运算量的算法显然是不可取的, 更何况实际问题中碰到的未知量会更多. 如果选用数值计算中的Gauss消去法求解n元线性方程组, 则大约需要$N = \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{n}{3}$次乘除运算. 如果$n = 20$, 则共计3060次乘除运算, 只需要使用小型计算机就能很快地解出来.

(2) 存储量的多少. 计算机的工作单元是固定的, 在计算大型数学问题时, 应尽可能地节省存储量, 一种有效的方法是采用“动态”存储.

(3) 算法的误差. 一个实际问题的真值与计算出来的近似值之间往往存在差异, 这种差异称为误差. 由于人为因素产生的差异称为**过失误差**; 由于方法原因产生的差异称为**非过失误差**. 数值分析要讨论的是非过失误差问题.

1.1.3 数值计算中常用的方法

1. “构造性”方法

在数值计算中, 许多问题的存在性证明都是以“构造性”方法出现的. 具体地讲, 就是把问题的计算公式构造出来, 这样不仅证明了问题的存在性, 而且有了具体的计算公式.

例如, 设函数$y = f(x)$在$[a, b]$上有$n+1$个互异点$a \leqslant x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leqslant b$的函数值$y_0, y_1, \cdots, y_n$, 则存在$n$次多项式

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n,$$

满足

$$P_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \cdots, n,$$

其中, $a_i\ (i=0,1,\cdots,n)$为$n+1$个待定系数.

下面介绍Lagrange插值构造方法.

首先, 构造Lagrange基函数

$$l_i(x)=\prod_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j},\quad i=0,1,\cdots,n.$$

其次, 构造Lagrange插值多项式

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}y_il_i(x).$$

不难验证, $L_n(x)$确实满足$L_n(x_i)=y_i\ (i=0,1,\cdots,n)$, 并且它是$n$次多项式. 这不仅说明插值多项式的存在性, 而且给出了它的表达形式.

2. 近似代替法

数值计算是通过计算机解决数学问题的一门学科, "近似代替"是数值计算的核心, 最常用的近似代替方法是用"有限"代替"无限". 由于计算机运算不可能是无限制进行的, 所以通常用有限步算术运算来近似代替无限过程.

例1.1.1 计算无理数e的近似值.

解 根据e^x在$x=0$处的Taylor展开得

$$\mathrm{e}=1+1+\frac{1}{2!}+\frac{1}{3!}+\cdots+\frac{1}{n!}+\cdots,$$

在实际计算中只能取有限步, 如取$n=5$时的值2.7167来近似代替e, 也可以取精度高一点的$n=10$时的值2.7183来近似代替e.

3. 简单代替复杂

在数值计算中, 数值逼近也是一种常用的近似方法, 它是用简单的函数去代替复杂的函数或者代替那些不能用解析式表示的函数$f(x)$. 所谓简单函数主要是指可以用四则运算进行计算的函数, 而较简单的则是多项式$P_n(x)$.

例如, 用

$$I=\int_a^b[f(x)-P_n(x)]^2\mathrm{d}x$$

作为准则, 寻找$P_n(x)=\sum\limits_{k=0}^{n}a_kx^k$使$I$为最小的问题归结为求解线性方程组

$$\frac{\partial I}{\partial a_k}=0,\quad k=0,1,\cdots,n.$$

此外, 对给定的函数$f(x)$, 在一些离散点$x_1,x_2,\cdots,x_m$处考虑其逼近问题, 称为曲线拟合. 关于逼近问题将在第6章中详细讨论.

4. 外推法

外推法是利用已知的低精度计算值, 通过合理组合得到一个高精度近似计算值的一种方法. 这是数值计算中一个很重要的技巧, 通过外推可以提高计算精度, 加速收敛.

例如, 在定积分$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$的近似计算中, 由梯形公式

$$T_1 = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

和复化梯形公式($n=2$)

$$T_2 = \frac{b-a}{4}\Big[f(a)+2f\Big(\frac{a+b}{2}\Big)+f(b)\Big]$$

经过线性组合得到

$$S_1 = \frac{4T_2-T_1}{4-1} = \frac{b-a}{6}\Big[f(a)+4f\Big(\frac{a+b}{2}\Big)+f(b)\Big],$$

这是计算定积分的Simpson公式, 它的精度比梯形公式更高.

5. 迭代法

迭代法是一种利用同一公式重复计算逐次逼近精确解的方法, 是数值计算中的一类重要方法, 尤其是在求解线性或非线性方程(组)中经常使用.

例如, 在求解非线性方程$f(x)=0$中, 常用到的Newton迭代法. 假设方程$f(x)=0$的根x^*的一个近似值为x_0, 将函数$f(x)$在x_0处Taylor展开得

$$f(x) = f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{f''(\xi)}{2}(x-x_0)^2,$$

其中ξ在x与x_0之间. 取上式右端前两项近似代替$f(x)$, 即用线性方程

$$f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)=0$$

近似代替非线性方程$f(x)=0$. 然后利用线性方程的根作为第一次Newton迭代的近似值, 即$x_1 = x_0-\dfrac{f(x_0)}{f'(x_0)}$, 再将$x_1$作为一个新的近似值, 重复上面的过程得到Newton迭代格式

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k=0,1,2,\cdots.$$

例1.1.2 用Newton迭代法求$\sqrt{3}$.

解 求$\sqrt{3}$等价于解二次方程$x^2-3=0$, 由此导出Newton迭代格式为

$$x_{k+1} = \frac{1}{2}\Big(x_k+\frac{3}{x_k}\Big),$$

取$x_0 = 1$得到

$$x_1 = 2, \quad x_2 = 1.75, \quad x_3 = 1.732143, \quad x_4 = 1.732051.$$

另外, $\sqrt{3} = 1.7320508075\cdots$, 由此可知, 迭代3次, 误差就小于$\frac{1}{2} \times 10^{-6}$了.

6. 离散化方法

变量离散化是数值计算最基本的方法之一. 对于有些函数, 如$y = \sin x$或e^x, 它们的自变量及函数都是连续变化的, 但人们却把它们列成数表, 这相当于把函数离散化. 用离散化的方法也可以计算离散点的近似值.

例如, 常微分方程初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x,y), \quad x \in [a,b], \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

的数值解, 取一系列等距分布的节点$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$, 记$h = x_i - x_{i-1}$. 利用差商代替微商, 即

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h},$$

把微分方程近似地化为

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad i = 0, 1, \cdots, n.$$

因此, 就可以从$y(a) = y_0$出发, 一步一步地计算出离散点x_i处的近似值y_i $(i = 1, 2, \cdots, n)$.

1.2 数值计算的误差

1.2.1 误差的来源及分类

误差的产生是多方面的, 但主要有以下几种途径:

(1) 要进行科学计算, 首先要从实际问题中抽象出数学模型, 这时抓住问题的本质进行抽象简化, 因而不可避免地产生误差, 将这种误差称为**模型误差**(model error).

(2) 计算过程中涉及某些初始条件的数据, 往往需要通过实验、观察、测量等手段给出, 由于实验仪器、测量工具等因素产生的误差, 将其称为**观测误差**(observation error).

从实际问题中抽象出的数学模型都假定是合理的, 并且模型误差难以用数量表示, 所以这种误差在数值计算中不予讨论. 同样也不讨论观测误差. 这里只研究用数值方法求解数学模型产生的误差.