数值计算基础

（第二版）

沈剑华　编

同济大学出版社

数值计算基础

（第二版）

沈剑华　编

同济大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

数值计算基础/沈剑华编．—上海：同济大学出版社，1999.8
(2004.5 第二版)

ISBN 7-5608-2061-1

Ⅰ．数…　Ⅱ．沈…　Ⅲ．数值计算—理论　Ⅳ．O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 21138 号

数值计算基础(第二版)

作　者　沈剑华编

责任编辑　林武军　责任校对　郁　峰　封面设计　李志云

出版发行　同济大学出版社

(上海四平路 1239 号　邮编 200092　电话 021-65985622)

经　销　全国各地新华书店

印　刷　同济大学印刷厂印刷

开　本　850mm×1168mm　1/32

印　张　14.375

字　数　416800

印　数　1—4100

版　次　2004 年 5 月第 2 版　2004 年 5 月第 1 次印刷

书　号　ISBN 7-5608-2061-1/O・174

定　价　20.00 元

本书若有印装质量问题，请向本社发行部调换

内容提要

本书是为工科大学生学习“数值计算方法”课而编写的教材，内容包括：插值与逼近，数值积分与数值微分，非线性方程的数值解法，线性代数方程组的数值解法，常微分方程初值问题的数值解法等计算机上常用的数值计算方法及有关的基础理论。

本书不仅系统地介绍了求各类数学问题的最基本的数值方法，而且在阐明各种数值计算方法的同时，从理论上作必要的分析和论证。每章都给出 典型例题并配有一定数量的习题，便于练习，书末有习题答案，并在附录中列举了几个数值方法应用程序，便于上机实习。

本书可作为工科院校各专业“数值计算方法”课程的教材或参考书，也可供工程技术人员参考。

再版前言

本书第一版自1999年出版以来，深受广大读者的厚爱，被许多院校选作为教材，到目前为止，已重印多次。这既是对我们工作的肯定和鼓励，也是一种鞭策。

当前，无论在传统学科领域，还是在高科技领域均少不了数值计算，特别是它已成为优化工程设计，进行数值模拟实验的重要手段。因此，学习和掌握用计算机解决数值计算问题已成为现代科学教学的重要内容。为了更好地适应和满足当前教学改革和读者使用的需要，本书第二版在保持第一版的特色基础上作了如下修改：

(1) 在每章后都配置了“学习指导”，包括基本要求与重点，例题分析与解答。所选例题都是集多年的教学实践的经验精心选编的，题型基本而又典型，广泛而不重复，与教材紧密衔接，是每章内容的补充和提高。

(2) 为了适应读者对数学软件的应用，在本书的附录Ⅱ中还特别介绍了两个能进行数学运算的计算机软件——Mathematica和MATLAB，并还给出了用Mathematica软件完成本书中部分习题的过程。

(3) 为便于读者对选编程序和使用软件的实践需要，在本书的附录中还配有适量的上机实习题，对读者进一步理解和掌握本书内容是十分有益的。

本书的第二版得到同济大学应用数学系诸多教师和同济大学

出版社的关心和支持，编者在此表示衷心的感谢！由于编者水平有限，书中错误之处在所难免，恳切希望使用本书的兄弟院校和广大读者批评指正。

编者　2004年3月

第一版前言

数值计算是计算机科学的重要内容,当前,由于科学技术的迅速发展和计算机的广泛应用,使继实验方法、理论方法之后,科学计算已成为科学研究的第三种方法,学习和掌握计算机上常用的数值计算方法及有关的基础理论,已成为现代科学教育的重要内容,这方面的知识对于当代的工科大学生来说,是非常需要的.

本书是为同济大学工科大学生学习"计算方法"课程而编写的基础教材,全书共分六章,内容主要包括:插值与逼近,数值积分与数值微分,非线性方程的数值解法,线性代数方程组的数值解法,常微分方程初值问题的数值解法等计算机上常用的数值计算方法及有关的理论.每章都给出典型例题并配有一定数量的习题,便于练习.书后附有习题答案,并在附录中列举了几个数值方法应用程序,便于上机实习和提高数值计算工作的能力.

本书可作为工科大学生学习"计算方法"课程的基础教材,也可作为要想了解这方面知识的工程技术人员的参考用书.本书是编者多年来在同济大学为工科研究生和本科大学生讲授"数值分析"和"计算方法"课程的教材基础上经反复整理、修改和补充而写成的,在编写过程中参考了国内外的较多的优秀教材、文献资料,并总结了编者在教学实践中的体会,使本书在内容上尽力做到重概念,重方法,重应用,重能力的培养,并在阐明各种数值计算方法的同时,作必要的理论分析和论证.

本书内容安排由浅入深,通俗易懂,完全按照教学规律编写,

易于教学，便于自学.阅读本书只要求读者具备高等数学、线性代数和算法语言的基础知识.全书讲授时间约为50～60学时.

在本书编写过程中，得到计算数学教研室许多老师的帮助，特别是黄自萍教授和陈素琴老师均仔细地审阅了全书，并提出了宝贵意见.在本书的出版过程中，得到同济大学教务处、教材科、出版社的大力支持和帮助，在此，笔者对为本书的出版给予过帮助和付出辛勤劳动的同志们一并谨表诚挚的谢意.

因编者水平有限，书中难免有错误和不妥之处，诚恳希望读者批评指正.

编者

1999 **年** 7 **月**

目　录

第一章　引　论

1.1　数值计算方法的对象和特点

一、研究的对象

数值计算方法是近代数学的一个重要分支，它是研究各种数学问题的**数值解法**（近似解法），包括方法的构造和求解过程的理论分析.

数值计算方法又称为**计算方法**或**数值分析**，当前是一门与计算机应用密切结合的实用性很强的数学课程.

利用计算机解决科学计算问题一般有以下几个大过程：

$\boxed{\text{实际问题}} \to \boxed{\text{构造数学模型}} \to \boxed{\text{选择数值计算方法}} \to \boxed{\text{程序设计}} \to \boxed{\text{上机计算求出结果}}$

可见，研究怎样通过计算机所能执行的基本运算，求得各类数学问题的**数值解**，这就是数值计算的根本任务. 更确切地说，数值计算方法是对给定问题的输入数据和所需计算结果之间关系的一种明确的描述.

众所周知，人类的计算能力是计算工具的性能与计算方法效率的总和，因此，计算能力的提高有赖于这两方面. 例如，有人统计过，在 1955～1975 年的 20 年间，计算机的计算速度提高了数千倍，而同一时间内解决一定规模的椭圆型偏微分方程的计算方法效率竟提高了 100 万倍！这说明研究和选择好的数值计算方法对提高计算速度，在某种意义上说比提高计算机速度更重要，因为计算方法研究所付出的代价比改进计算机的硬件设备毕竟要小得多.

随着计算机的发展与普及，继实验方法、理论方法之后，科学

计算已成为科学实践的第三种手段，求解各种数学问题的数值方法已被广泛应用于不仅是自然科学，还包括生命科学、经济科学和社会科学等各领域. 因此，数值计算的内容是相当丰富的，本书仅向大家介绍在微积分、线性代数、常微分方程等基础数学中常用的、行之有效的数值计算方法，并通过典型例子阐明构造算法的基本思想和技巧，引出相应算法的步骤，便于大家更好地应用.

本书的内容可分为三大部分：

(1) 数值逼近与数值微积分；

(2) 数值代数；

(3) 常微分方程的数值解法.

二、主要特点

数值计算方法是以数学问题为研究对象的，它是数学的一个分支，只是它不像纯数学那样只研究数学本身的理论，而着重研究求解的数值计算方法及与此相关的理论，包括方法的收敛性、稳定性及误差分析，还要根据计算机特点研究计算时间最省的计算方法. 有的方法尽管在理论上还不够严格，但通过实际计算，对比分析等手段，被证明是行之有效的也可采用. 因此，数值计算既有纯数学的高度抽象性与严密的科学性的特点，又有应用的广泛性与数值试验的高度技术性的特点，当前已发展成为一门与使用计算机密切结合的实用性很强的数学课程. 它的任务就是提供在计算机上实际可行的、理论可靠的、计算复杂性好的各种数值方法. 除此以外，它还有以下几个基本特点：

1. 采用“构造性”方法

数值方法中许多问题的存在性的证明都是以“构造性”方法为基础. 所谓用构造性的方法证明一个问题的存在性，就是指具体地把这个问题的计算公式构造出来，这种方法不但证明了问题的存在性，而且有了具体的计算公式，就便于编制程序上机计算.

我们用一个简单的例子说明这个特点.

例 1.1 对命题"实系数二次方程

$$x^2+2bx+c=0$$

当 $b^2>c$ 时,有两个实根."

分别给出构造性与非构造性的证明.

证明 (1) 非构造性证明(如用反证法)

令
$$f(x)=x^2+2bx+c$$

若设方程无实根,即 $f(x)$没有零点,从而 $f(x)$恒不为零.由于 $f(x)$是 x 的连续函数,可知对所有 x,或者 $f(x)$是恒正的,或者 $f(x)$是恒负的.

根据对 b 和 c 所附加的条件

$$b^2>c$$

有
$$f(-b)=b^2-2b^2+c=c-b^2<0$$

因而 $f(x)$必须是恒负的.

另一方面,当$|x|$很大时,$x^2>|2bx+c|$,因此当$|x|$很大时,又有 $f(x)>0$,从而导出矛盾.这矛盾的由来是假设方程无实根,故假设错误,从而 $f(x)=0$ 至少有一个实根.

其次,若设方程仅有一个实根,则由 $f(x)$的连续性必有

① 当 x 很大时,$f(x)>0$; $-x$ 很大时,$f(x)<0$.

或者② 当 x 很大时,$f(x)<0$; $-x$ 很大时,$f(x)>0$.

这和无论 x 取什么符号,只要$|x|$很大,就有 $f(x)>0$ 的事实相矛盾.所以方程有两个实根.但上述证明过程并没有提供求根的方法.称之为"非构造性证明".

(2) 构造性证明

对任意 x,b 和 c,由

$$x^2+2bx+c=x^2+2bx+b^2-b^2+c$$

$$=(x+b)^2+c-b^2$$

因此，当且仅当

$$(x+b)^2+c-b^2=0$$

时，x 是它的根，亦即

$$(x+b)^2=b^2-c$$

将两端开方并注意 $b^2-c>0$，可以推出

当且仅当 $$x+b=\pm\sqrt{b^2-c}$$

时，x 是根，从而

$$x=-b\pm\sqrt{b^2-c} \tag{1.1}$$

这样就证明了方程存在两个实根，并且可以根据式(1.1)具体算出这两个实根，即同时得到计算根的方法.

在本书的各章内容中，许多存在性证明都是运用了构造性的方法. 亦即这种证明同时还提供了具体的计算公式，使需要证明其存在的对象通过数值演算过程来完成.

2. 采用"离散化"方法

把求连续变量问题转化为求离散变量问题，称为**离散化**.

一个连续的数学问题要上机计算，必须进行离散化. **离散化**可以认为是数值计算中最基本的概念和方法之一. 例如把定积分离散成求和，把微分方程离散成差分方程等等.

例 1.2 计算定积分

$$I=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \tag{1.2}$$

解 这是一个连续性的数学问题，直接在计算机上计算有困难. 但大家知道，定积分可用复合梯形公式近似计算，即

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{n}\left[\frac{1}{2}(y_0+y_n)+y_1+\cdots+y_{n-1}\right] \quad (1.3)$$

其中 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ 是 n 等分区间 $[a,b]$ 的分点，$y_0, y_1, \cdots, y_n$ 是被积函数在各分点的函数值. 公式(1.3) 就是把定积分离散成为求和运算. 用(1.3) 的近似公式就可以求出积分(1.2) 的近似值.

3. 采用"递推化"方法

所谓**递推化**,其基本思想就是将一个复杂的计算过程归结为简单过程的多次重复. 由于递推化算法便于编写计算机程序,所以数值计算中的许多数值方法常常采用"递推化"方法.

例 1.3 对给定的 x,计算多项式

$$P_n(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0$$

的值.

解 可利用递推公式

$$\begin{cases} u_0=a_n \\ u_k=u_{k-1}x+a_{n-k} \end{cases} \quad (1.4)$$

对 $k=1,2,\cdots,n$ 反复执行式(1.4),最终得到的 u_n 就是多项式 $P_n(x)$ 的值.

用公式(1.4) 计算多项式 $P_n(x)$ 的值不但逻辑结构简单,而且计算量最小. 这个方法就是历史上著名的**秦九韶**方法.

4. 采用"近似替代"方法

计算机运算必须在有限次停止,所以数值方法常表现为一个无穷过程的截断,把一个无限过程的数学问题,转化为满足一定误差要求的有限步来近似替代.

例 1.4 计算无理数 e 的近似值.

解 根据泰勒公式得