计算数学基础

沈剑华　编著

同济大学出版社

内 容 提 要

本书主要介绍电子计算机上常用的数值计算方法及有关的基础理论，全书包括引论、插值法、函数逼近、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、矩阵的特征值和特征向量的计算及常微分方程初值问题的数值解法等八章基础知识。每章后都有小结和习题，书末有习题答案，并在第九章中列举了几个应用实例，便于实习应用。本书内容安排由浅入深，通俗易懂，易于教学，便于自学。阅读本书只需具备高等数学、线性代数和算法语言等基础知识。

本书可作工科高等院校研究生和大学生教材，也可供工程技术人员自学参考。

责任编辑 李炳钊
封面设计 王肖生

计 算 数 学 基 础
沈剑华 编著
同济大学出版社出版
（上海四平路1239号）
新华书店上海发行所发行
崇明永南印刷厂印刷

开本 850×1168 1/32 印张 13.75 字数 343 千字
1989年10月第1版 1989年10月第1次印刷

印数 1～5,000 定价 6.00元

ISBN 7-5608-0372-5/O·48

序　言

计算数学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电子计算机的广泛应用，计算数学这个学科发展很快，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知识，已成为现代科学教育的重要部分，这方面的知识对于当代的工科研究生和大学生来说，更是非常需要的。

全书共分九章，前八章着重介绍电子计算机上常用的数值计算方法及其基础理论。内容主要包括插值法、函数逼近、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、矩阵的特征值和特征向量的计算、常微分方程初值问题的数值解法等计算数学中常用的数值方法和建立数值方法的基本原理，每章之后都有小结和习题，书后附有习题解答，在第九章中还介绍了几个应用实例。通过本书的学习可使读者掌握计算数学的基本理论知识，具备解决数值问题、进行数据处理的基本能力，并为读者学习使用更进一步的数值方法，如概率统计计算方法、优化方法、有限元法等打下良好的基础。

本书可以作为工科院校研究生或本科高年级大学生学习“计算方法”或“数值分析”课程的基础教材，也可以作为要想了解这方面知识的工程技术人员的一本自学用书。本书是编者根据1986年12月在重庆召开的全国十九所工科院校研究生“数值分析”课程教学工作研讨会上拟定的教学大纲，结合自己多年来给同济大学的工科专业的研究生和大学生讲授“数值分析”课程的教学体会基础上，参考国内外现代教科书的一些成果，把多年来用的讲稿和油印讲义反复修改、整理而写成。全书讲授时间大约为60学时。

本书特点：一、在内容编排上，完全按教学规律编写，易于教学，内容丰富，取材由浅入深，重要结果皆以定理形式给出，文字条理清楚，通俗易懂，以期给初学者以清晰的思路。二、本书各章内容具有一定的独立性，可以根据需要予以取舍。三、本书各章内容中都通过典型例子阐明数值方法构造的基本思想和技巧，并在第九章中给出几个在计算机上实施过的应用实例和 FORTRAN 程序，便于读者实习应用，以提高读者实际从事数值计算工作的能力。

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。

本书在编写过程中，承上海交通大学数学系胡鸿钊先生认真、细致地审阅了全书，并提出了不少有价值的修改意见，我校许多同志也给予我很大的帮助和支持，编者谨在此向他们致以衷心的感谢。

由于编者水平有限，书中一定还有缺点和不妥之处，恳切地希望读者批评指正。

沈剑华

1988 年 9 月于同济大学

目　录

第一章　引　　论

§1　计算数学的研究对象和特点

一、计算数学研究的对象

计算数学是近代数学的一个重要分支，它专门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。

我们知道，计算必须依靠计算工具进行，但进行数字计算的工具所能执行的只是对具有一定数位的数进行加、减、乘、除四则运算，即使是现代的电子计算机也是如此。因此，计算数学的主要内容是研究怎样把数学问题的求解运算归结为对有限数位数的四则运算。计算数学是计算机科学的重要内容，随着科学技术的发展和计算机的广泛应用，掌握计算数学的基本概念和研究计算机上常用的算法，对计算机使用者来说是非常必要的，只有掌握了各类数学问题的数值计算方法才能更好地使用计算机，才能更有效地解决实践中提出的各类数学问题。为了更具体地说明计算数学的研究对象，了解学习计算数学的重要性，下面我们来简单分析一下利用计算机解决实际问题时经历的几个大过程：

实际问题 → 构造数学模型 → 选择数值计算方法 → 程序设计 → 上机计算求出结果

也即用计算机解决科学计算问题的过程是：首先要把实际问题经过抽象简化成为确定的数学问题，这就是建立描述实际问题的数学模型，如微分方程、积分方程、线性代数方程和方程组等

等；有了符合实际问题的数学模型，还必须选择好的数值计算方法。因为，计算机只能作算术运算和逻辑运算，而数学运算的范围是极为广阔的，既有算术运算，也有代数运算，还有各种各样的函数运算。而科学研究和工程设计中提出的各种问题，在建立了数学模型之后，还不能立刻用计算机直接求解，所以，当用计算机求解时，就需要研究确定解决这些数学模型的适合于计算机上采用的数值计算方法，将数学公式转换成一系列相应的算法步骤，并由此出发，编制出'个正确的计算程序，才能上机计算出数值结果。研究怎样通过计算机所能执行的基本运算，求得各类问题的数值解，就是计算数学的根本任务。数值计算关心的是运算的数值结果，虽然多数数值计算方法是为使用计算机而提出的，但是数值计算方法的研究对象与计算机程序设计、信息处理也是不同的。

本书将向大家介绍在科学研究，工程设计，管理和教育等方面所遇到的各种数学问题中常用的、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，以便于大家更好地实际应用。

本书的内容可分为三大部分：

（1）数值逼近；

（2）数值代数；

（3）常微分方程的数值解法。

二、计算数学的特点

计算数学是以数学问题为研究对象的，它是数学的一个分支，只是它不象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方法也可采用。因此，计算数

学既有纯数学的高度抽象性与严密科学性的特点，又有应用的广泛性与实际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。除此以外，计算数学中的数值方法还有以下几个基本特点：

1. 采用“构造性”方法

计算数学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。而数学中常用的“反证法”证明解的存在性就不是构造性的方法。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

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

这样就证明了方程存在两个实根，并且可以根据(1.1)式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能实际地构造出来。

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**。离散化可以认为是计算数学中基本的概念与方法之一。

因为计算机只能执行算术的和逻辑的运算，因此，任何涉及连续变量的计算问题都需要经过离散化以后才能运算。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

$$I=\int_0^1 e^{-x^2}dx \tag{1.2}$$

解 这是一个连续性的数学问题，无法在计算机上实现。但大家知道，定积分可用复合梯形公式近似计算，即

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

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(1.2)的积分了。

再例如，微分方程或积分方程的解本来是连续变量，而在数值计算中常常只计算它在某些点处的值。这些值当然是离散化的。

把一个连续型问题运用所谓的"离散化"方法，将其化为一个离散型问题，这在数值计算中对于处理连续型问题是很关键的一步。这在本书的各章内容中都会遇到。

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，所以计算数学中的许多数值方法常常具有递推化。

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 可利用递推化公式

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

对 $k=1,\ 2,\ \cdots,\ n$ 反复执行(1.4)式，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

有许多数学问题的解，不可能经过有限次算术运算计算出来。例如要计算任意函数的积分，求非线性方程的根，求一般微分方程的解等等。

而计算机运算必须在有限次停止，所以在计算数学中，必须把一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完成。对于这类问题，计算数学常常采用近似替代的办法，也即把不能用有限次运算求解的问题，转化为比较简单的可以用有限次运算求解的问题，从而用简化问题的解作为原来问题的近似解。

例 1.4 计算无理数e的近似值。

解 根据泰勒(Taylor)公式

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots$$

取 $x=1$ 得

$$e = 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \cdots + \frac{1}{n!} + \cdots \tag{1.5}$$

这是一个无限过程，计算机无法实现。只能在(1.5)中取有限项计算。再估计误差。若取

$$e \approx 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \cdots + \frac{1}{n!}$$

其误差为

$$|R_n| < \frac{e}{(n+1)!} < \frac{3}{(n+1)!}$$

此外，数值方法还要体现函数逼近的思想与数值分析方法的结合，以逼近思想为指导做认真的数值分析。

以上这些特点，将在以后各章中叙述，了解这些特点，对学习计算数学很有好处。

§2 误差及有关概念

一个物理量的真实值和我们算出来的值往往存在差异，它们的差称为**误差**。许多数值方法给出的解答仅仅是所要求的真解的某种近似，因而研究数值方法，必须注重误差分析，分析误差的来源，误差的传播情况以及对计算结果给出合理的误差估计。

一、误差的来源

误差的来源是多方面的，但主要有以下几方面。

1. 模型误差

用计算机解决科学计算问题首先要建立数学模型，它是对被描述的实际问题进行抽象、简化而得到的。是在一定条件下理想化，所以总要加上许多限制，忽略一些次要因素，简化许多条件，因而总是近似的，这就不可避免地要产生误差。我们把这种数学模型的解与实际问题的解之间出现的误差，叫做**模型误差**。只有实际问题提法正确，建立数学模型时又抽象、简化得合理，才能得到好的结果。研究数值方法并不涉及模型误差，通常都假定数学模型是合理的。

2. 观测误差

在数学模型中通常总包含有一些观测数据，如温度、长度、电压等等，这些数据的值一般是由观测或实验得到的。由于观测手段的限制，得到的数据和实际大小之间必然有误差，这种观测产生的误差称为**观测误差**。

3. 截断误差(也称方法误差)

由实际问题建立起来的数学模型，在很多情况下要得到准确解是困难的。当数学模型不能得到准确解时，通常要用数值方法求它的近似解，例如常把无限的计算过程用有限的计算过程代替，这种模型的准确解和数值方法的准确解之间的误差称为**截断**

误差。因为截断误差是方法固有的，又称为**方法误差**。

例 1.5 函数$f(x)$的泰勒(Taylor)展开式

$$
\begin{aligned}
f(x)=&f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)\\
&+\frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n\\
&+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1},
\end{aligned}
$$

其中 ξ 在 x_0 与 x 之间

若记 $$S_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k$$

$$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1}$$

则 $$f(x)=S_n(x)+R_n(x)$$

若取

$$f(x)\approx S_n(x)$$

则其截断误差为$R_n(x)$，也即用$f(x)$的泰勒展开式的部分和$S_n(x)$来近似函数$f(x)$，其余项$R_n(x)$就是真值$f(x)$的截断误差。

4. 舍入误差

在实际计算中遇到的数可能位数很多，甚至是无穷小数，如π，$\sqrt{2}$，$\frac{1}{3}$等，由于数值计算是按有限位进行的，例如用计算机做数值计算时，由于计算机位数有限，对超过位数的数字就要进行舍入。此外，在作乘法、除法时，得到的积和商都只能保留一定的位数，这也要进行舍入。这种由于在计算过程中对数进行舍入而引起的误差，称为“**舍入误差**”。例如，用3.1416作π的近似值产生的误差就是舍入误差。我们知道少量运算的舍入误差一般是微不足道的，但是，在计算机上完成千百万次运算以后，舍入误差的积累就可能很惊人，是不可忽视的。

上述几种误差。都会影响计算结果的准确性，因此了解与研究这些误差对数值计算是有帮助的。计算数学中除了研究求解数学问题的数值方法外，还要研究计算结果的误差是否满足精度要求，这就是误差估计问题。但前二种误差往往不是计算工作者所能独立完成的，计算数学中用不到描述自然现象，也用不到观测测量，而主要研究的是截断误差与舍入误差对计算结果的影响。

重视误差分析和控制误差扩散是十分重要的，没有误差分析的数值计算结果是不可信的。

二、绝对误差，相对误差和有效数字

如何来定义误差？人们常用绝对误差、相对误差或有效数字来说明一个近似值的准确程度，这些概念在高等数学、物理以及力学等课程中早已接触过，由于它们在科学计算中的重要性，有必要再进行简单的论述。

1. 绝对误差和相对误差

定义1.1 设 x 为准确值，x^* 为 x 的一个近似值，称 $e_a=x^*-x$ 为近似值 x^* 的**绝对误差**，简称**误差**。

必须指出，通常无法得到准确值 x，从而不可能得到 x^* 的绝对误差 e_a 的真值，只能根据测量的工具或计算的情况，估计出误差的绝对值的一个上界 ε_a，即

$$|e_a|=|x^*-x|\leqslant\varepsilon_a$$

这个正数 ε_a 通常叫做近似值x^*的**绝对误差限**。有了绝对误差限，就可知道真值 x 的范围

$$x^*-\varepsilon_a\leqslant x\leqslant x^*+\varepsilon_a$$

这范围有时也表示为

$$x=x^*\pm\varepsilon_a$$

绝对误差的大小，在许多情况下还不能完全刻划一个近似值的准确程度，例如测量 1000 米和 1 米两个长度，若它们的绝对误差都是 1 厘米，显然前者的测量比较准确。由此可见，决定一

个量的近似值的精确度，除了考虑绝对误差的大小外，还需要考虑该量本身的大小，为此引入相对误差的概念。

定义 1.2 设 x 为准确值，x^* 是近似值，则称

$$e_r = \frac{e_a}{x} = \frac{x^* - x}{x} \qquad (x \neq 0)$$

为近似值 x^* 的**相对误差**。

在实际计算中，由于真值 x 一般是不知道的，但可以证明，当 e_r 较小时，e_r 中分母 x 可用 x^* 代替，其两者之差

$$\frac{e_a}{x} - \frac{e_a}{x^*} = \frac{(e_a/x^*)^2}{1 - e_a/x^*}$$

是 e_r 的平方项级，故可忽略不计。因此，在实际计算中常取

$$e_r = \frac{e_a}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$$

作为相对误差，要比用 $\frac{e_a}{x}$ 更方便。

相对误差可正可负，它的绝对值上界叫做**相对误差限**，即，如果已知正数 ε_r 使

$$|e_r| \leqslant \varepsilon_r$$

则称 ε_r 为 x^* 的**相对误差限**。

由于在讨论近似数运算的误差时，相对误差更能反映出误差的特征，因此，在误差分析中，相对误差比绝对误差更重要。

2. 有效数字

为了可以从近似数的有限位小数表示本身就能知道近似数的精度，我们引入有效数字概念。大家知道，当 x 有很多位数字时，常按照“四舍五入”原则，取 x 的前几位数字作为 x 的近似值 x^*。

例如

$$x = \sqrt{2} = 1.41421356237\cdots$$

若只取到小数后四位数字得