

全国高等教育精选系列教材

数值

SHUZH
JISUAN FANGFA

计算方法

宋岱才 路永洁 刘国志 陈明明/编著



中国经济出版社
CHINA ECONOMIC PUBLISHING HOUSE

全国高等教育精选系列教材

数值计算方法

宋岱才 路永洁 编著
刘国志 陈明明



中国经济出版社
CHINA ECONOMIC PUBLISHING HOUSE

北 京

图书在版编目 (CIP) 数据

数值计算方法/宋岱才等编著. —北京: 中国经济出版社, 2006. 9

(全国高等教育精选系列教材)

ISBN 7-5017-7745-4

I. 数… II. 宋… III. 数值计算—计算方法—高等学校—教材 IV. 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 109895 号

出版发行: 中国经济出版社 (100037 · 北京市西城区百万庄北街 3 号)

网 址: www.economyph.com

责任编辑: 高书精

责任印刷: 石星岳

封面设计: 白长江

经 销: 各地新华书店

承 印: 北京市地矿印刷厂

开 本: 980mm × 1092mm 1/16

印张: 14.75 字数: 185 千字

版 次: 2006 年 9 月第 1 版

印次: 2006 年 9 月第 1 次印刷

书 号: ISBN 7-5017-7745-4/F · 6451

定价: 18.00 元

版权所有 盗版必究

举报电话: 68359418 68319282

服务热线: 68344225 68369586 68346406 68309176

内 容 提 要

本书为大学教科书，着重介绍了与现代有关的数值计算的基本方法，强调基本概念、理论和应用，特别是数值计算方法在计算机上的实现。以期学生在学完本书之后能够充分掌握这些方法，并能在计算机上进行有关的科学与工程计算。

全书共分九章，主要内容包括插值和逼近，数值积分和微分，解线性代数方程组的直接方法和迭代方法，解非线性方程的数值方法，代数特征值问题和常微分方程初值问题的计算方法。各章配有一定数量的习题，书后附有习题答案和提示。

本书可作为大学本科生教材，也可作为理工科专业研究生和应用数学、物理、计算机等专业大学生数值分析课程的教材或教学参考书，也可供从事科学与工程计算的科技人员学习参考。

序

电子计算机的问世开创了现代科学的新时代。随着计算机的广泛应用,科学计算正逐步上升为一种新的科学方法。在今天,为适应新的技术革命的需要,科学计算中实际课题的规模空前扩大,使科学计算正处于蓬勃发展的新时代。

今天,在科学技术的各个领域,用电子计算机承担的科学计算越来越显示出计算机强大的威力。计算机能力之高超,是其他计算工具所无法比拟的。但是我们知道,用计算机解题,首先必须是编制程序。所谓编程,就是将解题过程逐步进行分解,最后归结为使计算机运行的四则运算和逻辑运算的有限序列。计算数学就是科学计算的一门主体学科。它实际上是数学与计算机科学的交叉学科,它兼有这两门学科的基本特征,即既有数学的抽象性与严密性,又有计算机科学的实践性与技术性。

本书就是为了能使广大计算机的使用者和即将从事科学计算的工作者能得心应手地使用计算机而编写的。书中提出了数值计算方法的基本思想、基本理论,这些思想和理论如此简单,致使读者只需具备



一些高等数学和线性代数的基础知识就能接受。然而这些基本思想、基本理论有着广泛的实际应用。

本书作者编写的这本《数值计算方法》一书，是作者在编写的《数值分析讲义》的基础上修订出版的。该讲义在辽宁石油化工大学本科和工科硕士研究生中使用了近 20 届。结合师生们提出的意见，作者进行了多次的整理、订正，在此基础上才出版了现在的《数值计算方法》教材。

我们认为，作者写的这本《数值计算方法》一书，是他们多年的教学、科研工作的总结。本书作者多年来一直从事数值计算、最优化方法、遗传算法等的教学、科研工作，积累了大量的教学科研经验。书中对各种各样的数值算法提出了几种赋予概括性的设计思想和方法原则。这些思想和原则对从事研究和运用计算方法的科学工作者无疑会有深刻的启迪和指导作用。任何人如能精通并灵活运用这些方法原则，则不仅能圆满地解决实际计算问题，而且还可能有所创新，有所发展。

赵连昌

2006 年 4 月

前 言

随着电子计算机的迅速发展,开设数值分析课程的院校越来越普遍。本书是在作者编写的《数值分析讲义》的基础上修订出版的。该讲义在辽宁石油化工大学本科生和工科硕士研究生中使用了近20届。结合师生们提出的意见,作者进行了多次的整理、订正,在此基础上出版了现在的《数值计算方法》教材。

学习本书必需的数学基础是微积分、线性代数和常微分方程,这是一般理工科大学学生都具备的。全书设计讲授时数为80学时左右。如学时少于80学时,对目录中带*的章节可以少讲或不讲。本书编写时已注意到各章节的独立性,删掉带*的章节不至于影响后面的学习。

本书共分9章。内容包括:插值法和曲线拟合、数值积分和数值微分、常微分方程的数值解法、非线性方程的数值解法、线性方程组的直接解法和迭代解法、矩阵特征值问题的数值解法。各章后均配有习题,书后还有习题答案和提示。教师可配合布置习题,安排上机实习的教学环节。

全书由宋岱才教授编写;刘国志教授提供了全部习题;路永洁副教授提供了全部习题答案。全书由陈明明教授主审。田秋菊同志使用

了初稿，并提供了许多宝贵的建议和意见。本书的写作过程中，参考了许多作者编著的书籍，在此向这些作者表示感谢。另外，辽宁石油化工大学教务处的同志对本书的出版做了许多积极的工作，这里一并表示感谢。

由于作者水平有限，书中的不当之处，恳请读者批评指正，以期修订时改进完善。

本书可作为理工科专业研究生和应用数学、物理、计算机等专业大学生数值分析课程的教材或教学参考书，亦可供从事科学与工程计算的科技人员学习参考。

编 者
2006 年 3 月

目 录

第一章 绪论	(1)
§1 数值分析的研究对象与特点	(1)
§2 误差及误差分析的重要性	(1)
§3 误差的基本概念	(5)
3-1 误差与误差限	(5)
3-2 有效数字	(5)
3-3 数值运算中的误差估计	(7)
§4 数值运算中应注意的几个问题	(8)
习题一	(9)
第二章 插值法	(11)
§1 引言	(11)
§2 拉格朗日 (Lagrange) 插值多项式	(12)
2-1 插值多项式的存在性和唯一性	(12)
2-2 Lagrange 插值多项式	(12)
2-3 插值余项	(16)
§3 均差与 Newton 插值多项式	(19)
3-1 均差的定义及其性质	(19)

3-2 Newton 插值多项式及其余项	(21)
§4 差分与等距节点插值公式*	(22)
4-1 差分及其性质	(23)
4-2 等距节点插值公式	(24)
§5 Hermite 插值*	(27)
§6 分段低次插值	(32)
6-1 分段线性插值	(32)
6-2 分段三次 Hermite 插值*	(33)
§7 三次样条 (Spline) 插值*	(35)
7-1 三次 Spline 插值问题的提法及常见边界条件	(35)
7-2 三次样条插值函数的求法	(36)
习题二	(44)
第三章 函数逼近及最小二乘法	(48)
§1 内积空间及函数的范数*	(48)
§2 正交多项式*	(50)
2-1 勒让得 (Legendre) 正交多项式	(51)
2-2 车比雪夫 (Chebyshev) 正交多项式	(53)
§3 函数逼近*	(55)
3-1 利用勒让得正交多项式求最佳平方逼近多项式	(56)
3-2 利用车比雪夫正交多项式求近似最佳一致 (均匀) 逼近多项式	(57)
§4 曲线拟合的最小二乘法	(58)
4-1 一般最小二乘问题	(58)
4-2 用正交函数作最小二乘拟合*	(62)
习题三	(65)

第四章 数值积分与数值微分	(67)
§1 引言	(67)
1-1 数值积分的基本思想	(67)
1-2 代数精度的概念与插值型求积公式	(68)
§2 牛顿-柯特斯 (Newton-Cotes) 求积公式	(70)
2-1 牛顿-柯特斯 (Newton-Cotes) 求积公式及其余项公式	(70)
2-2 复化求积公式及其余项	(73)
§3 Romberg (龙贝格) 算法	(77)
3-1 梯形公式的递推化	(77)
3-2 龙贝格 (Romberg) 公式	(78)
§4 高斯 (Gauss) 公式*	(81)
§5 数值微分	(86)
习题四	(88)
第五章 常微分方程数值解法	(90)
§1 引言	(90)
§2 欧拉 (Euler) 方法 (折线法)	(91)
2-1 欧拉公式	(91)
2-2 梯形公式	(93)
§3 龙格-库塔 (Runge-Kutta) 方法	(96)
3-1 龙格-库塔方法的基本思想	(96)
3-2 龙格-库塔方法	(98)
§4 单步法的收敛性与稳定性*	(100)
4-1 收敛性	(100)
4-2 稳定性	(101)

§5 线性多步法	(103)
§6 方程组与高阶方程的情形*	(109)
习题五	(111)
第六章 方程求根	(114)
§1 根的搜索	(114)
1-1 逐步搜索法	(114)
1-2 二分法	(115)
§2 简单迭代法	(117)
2-1 简单迭代法	(117)
2-2 迭代加速方法	(120)
§3 Newton 迭代法	(122)
3-1 Newton 法迭代公式	(122)
3-2 Newton 法的局部收敛性	(123)
3-3 Newton 法的改进*	(125)
习题六	(127)
第七章 解线性方程组的直接方法	(130)
§1 Gauss 消去法	(130)
1-1 Gauss 消去法	(130)
1-2 Gauss 消去法的计算工作量	(135)
§2 Gauss 主元素消去法	(136)
2-1 完全主元素消去法*	(136)
2-2 列主元素消去法	(137)
§3 用三角分解法解线性方程组	(137)
3-1 矩阵的三角分解	(137)
3-2 不选主元的直接三角分解法	(140)

§4 解对称正定矩阵方程组的平方根法	(142)
§5 解三对角线方程组的追赶法	(145)
§6 向量和矩阵的范数	(148)
§7 误差估计	(153)
习题七	(158)
第八章 解线性方程组的迭代法	(161)
§1 迭代法的一般概念	(161)
§2 Jacobi 迭代法与 Gauss-Seidel 迭代法	(163)
2-1 Jacobi 迭代法	(163)
2-2 Gauss-Seidel 迭代法	(164)
§3 迭代法的收敛性	(165)
§4 解线性方程组的超松弛迭代法 (SOR)	(171)
习题八	(176)
第九章 矩阵特征问题的计算方法 *	(179)
§1 引言	(179)
§2 幂法与反幂法	(181)
2-1 幂法	(181)
2-2 加速方法	(185)
2-3 反幂法	(188)
§3 Jacobi 方法	(189)
3-1 引言	(189)
3-2 Jacobi 方法	(190)
3-3 Jacobi 过关法	(196)
§4 QR 方法	(198)
4-1 Householder 变换	(198)

4-2 矩阵的 QR 分解	(201)
4-3 基本 QR 算法及其收敛性	(205)
习题九	(208)
习题答案与提示	(210)
参考文献	(219)

第一章 绪 论

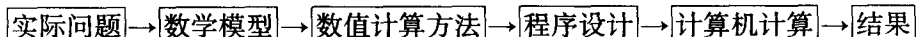
§1 数值分析的研究对象与特点

在计算机成为数值计算的主要工具的今天,人们对适合于计算机的数值计算方法的需要就显得越来越重要。对于同一个计算问题,选择的计算方法不同所得结果就会有很大差别,当然人力、物力、财力等的消耗也不尽相同。《数值分析》课程的主要内容就是研究如何较好地用计算机求解数学问题的数值方法和理论。简称数值计算方法或数值分析。它是数学的一个重要分支,其内容不像纯数学那样只研究理论,而是着重研究求解的数值方法及相关的理论。这些理论包括方法的收敛性、稳定性及误差分析。

《数值分析》课程所包含的内容:函数的数值逼近、数值积分和数值微分、数值线性代数、微分方程的数值解法等。本课程的特点是既有纯数学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实验的高度技术性的特点,是一门与使用计算机密切结合的实用性很强的数学课程。

§2 误差及误差分析的重要性

我们先来考察一下用计算机解决实际问题的主要过程:



在以上的过程中可以产生下列误差：

模型误差：由实际问题转化为数学模型时产生的误差。

观测误差：通过对数据的观测所产生的误差。

截断误差（方法误差）：近似解与精确解之间的误差。

例如：

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

若求 e^2 ，则有 $e^2 = 1 + 2 + \frac{2^2}{2!} + \frac{2^3}{3!} + \cdots$ ，由于不可能得到精确值，若取 $n=4$ ，则

$$e^2 \approx 1 + 2 + \frac{2^2}{2!} + \frac{2^3}{3!} + \frac{2^4}{4!} \quad \text{此时的截断误差为 } \frac{2^5}{5!} + \frac{2^6}{6!} + \cdots。$$

另外，由于计算机在计算过程中并非是精确运算，只是对有限位数进行运算，对于超过位数的数字便自动施行四舍五入，这样在计算过程中又产生一定的误差，这种误差称为舍入误差。

本课程主要研究截断误差和舍入误差。

以下举例说明误差分析的重要性。

例1 求 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx \quad n=0, 1, \cdots, 20$

解：容易求得， $I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx + \int_0^1 \frac{5x^{n-1}}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n} \quad n=1, \cdots, 20$

又 $I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln \frac{6}{5} = \ln 1.2$ ，而 $\ln 1.2$ 是个无理数，不可能取到精确值，若

$$\text{取 } I_0 \approx 0.18232155, \text{ 得到一个递推公式: } (A) \begin{cases} I_n = -5I_{n-1} + \frac{1}{n} & n=1, \cdots, 20 \\ I_0 = 0.18232155 \end{cases}$$

计算结果见下表 1-1。

表 1-1

n	$I_n(A)$	n	$I_n(B)$
0	0.18232155 ↓	0	0.18232155 ↑
1	0.088392216	1	0.088392216
2	0.058038918	2	0.058038919
3	0.043138742	3	0.043138734
4	0.03430208	4	0.03430633
5	0.02848958	5	0.02846835
6	0.02421875	6	0.02432491
7	0.02176339 ↓	7	0.02123260 ↑
8	0.01618305 ↓	8	0.01883699 ↑
9	0.03019588	9	0.01692617
10	-0.05097941	10	0.01536914
11	0.017324710	11	0.014071338
12	-0.003290219	12	0.012976641
13	-0.093374172	13	0.012039867
14	-0.39544229	14	0.0112229233
15	2.0438787 ↓	15	0.010520499 ↑
16	-10.156890	16	0.009897504
17	50.843276	17	0.009336007
18	-254.16082	18	0.008875522
19	1270.8567	19	0.0082539682
20	-6354.2338 ↓	20	0.0087301587 ↑

注:上表前两列是由公式(A)计算所得值,后两列是由以下的公式(B)计算所得值。