数值计算方法

国防工业出版社

数 值 计 算 方 法

冯 康 等编

国 防 工 业 出 版 社

内容简介

本书主要介绍电子计算机上常用的和有效的数值计算方法。全书内容包括：插值、数值积分、谐波分析、曲线拟合与经验公式、回归分析、时间序列分析、蒙特卡洛方法、线性代数方程组的数值解法、非线性方程和非线性方程组的解法、代数特征值问题的解法、常微分方程初值问题数值解法、偏微分方程初值问题数值解法、偏微分方程边值问题数值解法、有限元法等十四章。有些基本算法附有用 BCY 语言编制的程序。在附录中给出了算法语言 BCY 简介，以供参考。

本书的主要对象是使用电子计算机的工作人员，也可供高等学校有关专业的师生参考。

数值计算方法

冯 康 等编

*

国防工业出版社出版

北京市书刊出版业营业許可証出字第 074 号

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

上海商务印刷厂排版 山西新华印刷厂印刷

*

787×1092 1/16 印张 39 1/4 942 千字

1978 年 12 月第一版 1978 年 12 月第一次印刷 印数：00,001—38,000 册

统一书号：15034·1653 定价：4.00 元

序　　言

随着我国社会主义建设事业的迅速发展，电子计算机的应用日益扩大，从而对于计算机上使用的数学方法也提出了更为迫切的要求。

编写本书的主要目的，是方便读者的实际应用。因此，在内容上尽量选常用的、行之有效的计算方法，有些基本算法并附有算法语言编制的程序，以供参考。编者力求阐明算法思想和计算步骤，力所能及地对方法选择原则以及计算注意事项提供了一些参考意见。本书具有汇编性质，各章具有相对独立性，读者可以根据需要选读有关章节。

本书是由中国科学院计算技术研究所“数值计算方法”编写组编写。参加编写的主要成员有冯康、张建中、张绮霞、杨自强、曹维潞等同志。另外，在编写过程中还得到许多同志的大力协助，在此表示感谢。

由于本书脱稿于1973年，近年发展起来的一些新方法未能编入；又由于我们实践经验不多，编写经验缺乏，缺点和错误一定不少。我们热忱希望读者批评指正。

编　　者

目　　录

第一章 插 值

§1.1 引 言

在生产实践的许多领域里，例如机械工业、造船、汽车制造，常常有这样的问题：给了一批离散样点，要求作出一条光滑曲线(乃至于曲面)，使其通过或尽可能地靠近这些样点，以便满足设计要求或者据此进行机械加工。在过去，这种放样工作大都是用人工方式进行的。为了提高劳动生产率、提高设计质量，日益需要在计算机的协助下，用数学的方法自动进行。这就是所谓数学放样以及曲线、曲面的自动产生的问题。

另外，在使用计算机解题时，由于机器只能执行算术的和逻辑的操作，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解算。例如计算积分时，采用离散点函数值累加，即数值积分的方法，计算微分用差商即数值微分的方法，解微分方程用格网即差分方法，以及有限元方法等等，也都直接或间接地要用到在离散数据的基础上补插出连续函数的思想和方法。

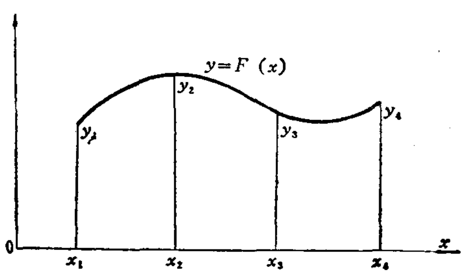

图 1.1

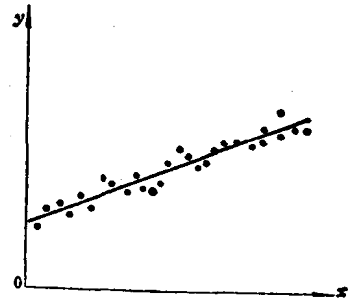

图 1.2

与此相关的一类数学问题是插值问题，即当原始数据(x_0, y_0)，(x_1, y_1)，…，(x_n, y_n)是精确的或者可靠度较高时，要求定出一个便于计算的“初等”的函数或曲线$y=F(x)$(例如多项式，或者分段多项式等等)通过给定的离散样点

$$F(x_0)=y_0,\quad F(x_1)=y_1,\ \cdots,\quad F(x_n)=y_n$$

如图1.1。这时待定函数的自由度，即待定参数(例如多项式的系数)的个数与给定的插值条件个数相当。这就是本章的主题。

另一类是最优拟合或最小偏差问题，即当原始数据本身含有“噪音”，即含有不可避免的误差时，要求定出一个初等的函数$F(x)$，不是要求严格地通过样点，而是要求最优地靠近样点，即在某种意义下总的偏差为最小(图1.2)。这时待定函数的自由度恒小于、甚至于远小于样点个数，从而可以达到滤去噪音的目的。这将在§1.6和第四章中讨论。

§1.2 多项式插值

为了讨论的方便，统一约定一些记号和名词如下：恒设有某个原函数$f(x)$，它在一些节

点 $x=x_0, x_1, \cdots$ 处的值为 $f_0=f(x_0)$, $f_1=f(x_1)$, $\cdots$。必要时还引用导数值 $f'_0=f'(x_0)$, $f'_1=f'(x_1)$, $\cdots$。命 $F(x)$ 为适当的插值多项式。原函数与插值函数的差 $f(x)-F(x)$ 也叫做插值余项。符号 $[x_0, x_1, \cdots]$ 表示含有点 $x_0, x_1, \cdots$ 的最小区间，也就是以 $\max(x_0, x_1, \cdots)$ 和 $\min(x_0, x_1, \cdots)$ 为端点的区间。

1.2.1 最简单的插值公式

介绍几种简单常用的插值公式。它们可以启示一般插值(1.2.2 节)的作法，也是分段插值(§1.3)的基础。为了方便，在各个公式后都附列余项估计，但不加证明。

(一)一点零次——水平插值

过样点 (x_0, f_0) 作水平线(图 1.3)，即

$$F(x)=f_0 \tag{1.2.1}$$

$$f(x)-F(x)=f'(\xi)(x-x_0),\ \xi\in[x_0, x] \tag{1.2.2}$$

这是零次插值，对于函数值在插点邻近有一阶精度，但对于导数则没有逼近性。

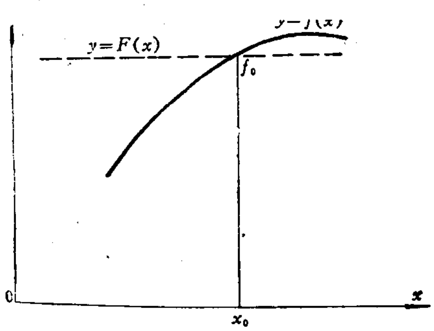

图 1.3

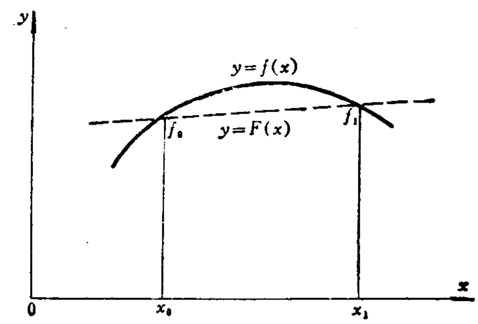

图 1.4

(二)两点一次——线性插值

过两个样点 (x_0, f_0), (x_1, f_1) 作直线(图 1.4)，即

$$F(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f_1 \tag{1.2.3}$$

$$f(x)-F(x)=\frac{1}{2}f''(\xi)(x-x_0)(x-x_1),\ \xi\in[x_0, x_1, x] \tag{1.2.4}$$

这是一次插值，对于函数值有二阶精度，同时对于导数也有了逼近性。

为了分析的方便，可以命

$$l_0(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1},\quad l_1(x)=\frac{x-x_0}{x_1-x_0} \tag{1.2.5}$$

显然有

$$l_0(x)+l_1(x)\equiv 1$$

$$l_0(x_0)=1,\quad l_0(x_1)=0,\quad l_1(x_0)=0,\quad l_1(x_1)=1$$

而线性插值可以表为

$$F(x)=f_0l_0(x)+f_1l_1(x) \tag{1.2.6}$$

函数 $l_0(x)$, $l_1(x)$ 可以称为线性插值的基函数。

(三)三点二次——抛物插值

过三个样点(x_0, f_0), (x_1, f_1), (x_2, f_2)作抛物线(图1.5),在解析上可以表为

$$F(x)=f_0 l_0(x)+f_1 l_1(x)+f_2 l_2(x) \tag{1.2.7}$$

这里插值基函数是

$$l_0(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)},\quad l_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)},\quad l_2(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \tag{1.2.8}$$

而插值余项为

$$f(x)-F(x)=\frac{1}{3!}f'''(\xi)(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2),\ \xi\in[x_0,\ x_1,\ x_2,\ x] \tag{1.2.9}$$

很容易验证

$$l_0(x_0)=1,\quad l_0(x_1)=0,\quad l_0(x_2)=0$$
$$l_1(x_0)=0,\quad l_1(x_1)=1,\quad l_1(x_2)=0$$
$$l_2(x_0)=0,\quad l_2(x_1)=0,\quad l_2(x_2)=1$$

因此函数(1.2.7)确实满足插值条件

$$F(x_0)=f_0,\ F(x_1)=f_1,\ F(x_2)=f_2$$

从图1.5以及余项估式(1.2.9)可以看出,这里逼近程度又提高了。函数值有三阶精度,并且直到二阶导数都有逼近性。

以上几种都是以节点的函数值f_0, f_1, …为基础的插值,即所谓拉格朗日(Lagrange)插值。当在节点上除了函数值f_0, f_1, …外还掌握导数值f'_0, f'_1, …时,则还可以采用带导数的插值,即所谓埃尔米特(Hermite)插值。除了"过点"外还要求"相切",密合程度就会更好些。举出两种最简单的情况:

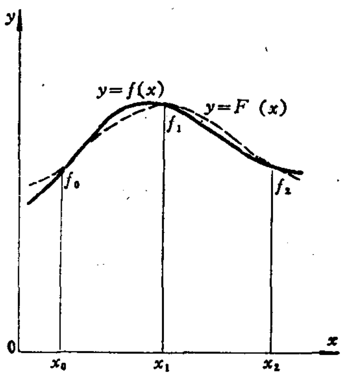

图 1.5

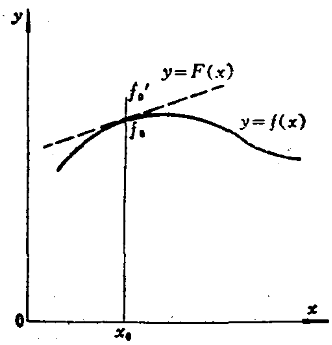

图 1.6

(四)一点一次带导数插值

$$F(x)=f_0+(x-x_0)f'_0 \tag{1.2.10}$$

$$f(x)-F(x)=\frac{1}{2}f''(\xi)(x-x_0)^2,\ \xi\in[x_0,\ x]$$

这就是切线插值(图1.6)。显然式(1.2.10)满足插值条件

$$F(x_0)=f_0,\quad F'(x_0)=f'_0$$

(五)两点三次带导数插值

要求作三次多项式

$$F(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3 \tag{1.2.11}$$

满足(图 1.7)

$$F(x_0)=f_0,\quad F'(x_0)=f'_0,\quad F(x_1)=f_1,\quad F'(x_1)=f'_1 \tag{1.2.12}$$

利用这四个条件可以解出四个系数 a_0, a_1, a_2, a_3, 它们都线性地依赖于 f_0, f'_0, f_1, f'_1。这里演算是初等的，但比较繁琐，故从略，而直接给出最终表达式

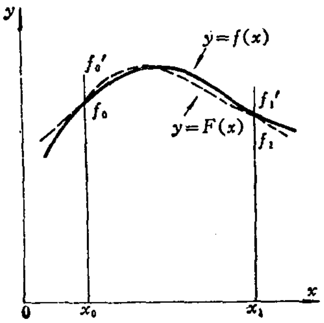

图 1.7

$$F(x)=f_0\alpha_0(x)+f'_0\beta_0(x)+f_1\alpha_1(x)+f'_1\beta_1(x) \tag{1.2.13}$$

这里插值函数 α_i, β_i 可以通过两点线性插值的基函数(1.2.5)

$$\left.\begin{array}{c} l_0(x)=\dfrac{x-x_1}{x_0-x_1},\quad l_1(x)=\dfrac{x-x_0}{x_1-x_0}, \\ l_0(x)+l_1(x)\equiv 1 \end{array}\right\} \tag{1.2.14}$$

表达如下：

$$\left.\begin{array}{l} \alpha_0(x)=l_0^2(1+2l_1)=3l_0^2-2l_0^3 \\ \alpha_1(x)=l_1^2(1+2l_0)=3l_1^2-2l_1^3 \\ \beta_0=hl_0^2l_1=h(l_0^2-l_0^3) \\ \beta_1=-hl_1^2l_0=-h(l_1^2-l_1^3) \\ h=x_1-x_0 \end{array}\right\} \tag{1.2.15}$$

由于(1.2.14)以及

$$l'_0(x_0)=l'_0(x_1)=-\frac{1}{h},\quad l'_1(x_0)=l'_1(x_1)=\frac{1}{h}$$

不难看出

$$\begin{array}{llll} \alpha_0(x_0)=1, & \alpha'_0(x_0)=0, & \alpha_0(x_1)=0, & \alpha'_0(x_1)=0 \\ \beta_0(x_0)=0, & \beta'_0(x_0)=1, & \beta_0(x_1)=0, & \beta'_0(x_1)=0 \\ \alpha_1(x_0)=0, & \alpha'_1(x_0)=0, & \alpha_1(x_1)=1, & \alpha'_1(x_1)=0 \\ \beta_1(x_0)=0, & \beta'_1(x_0)=0, & \beta_1(x_1)=0, & \beta'_1(x_1)=1 \end{array}$$

因此(1.2.13)确实满足插值条件(1.2.12)，它就是所要求的三次插值函数，而余项估计则为

$$f(x)-F(x)=\frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi)(x-x_0)^2(x-x_1)^2,\ \xi\in[x_0,\ x_1,\ x] \tag{1.2.16}$$

比以前几种又提高了精度，具有直到三阶导数的逼近性。

表达式(1.2.15)还可以换个写法，命

$$\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)$$

于是

$$\omega'(x_0)=(x_0-x_1),\quad \omega'(x_1)=(x_1-x_0),\quad \omega''(x_0)=\omega''(x_1)=2$$

$$\left.\begin{array}{l} \alpha_i(x)=(l_i(x))^2\left[1-\dfrac{\omega''(x_i)}{\omega'(x_i)}(x-x_i)\right] \\ \beta_i(x)=(l_i(x))^2(x-x_i),\quad i=0,\ 1 \end{array}\right\} \tag{1.2.17}$$

这种形式便于推广到高次埃尔米特插值(1.2.2 节)，而形式(1.2.15)则便于推广到分段埃尔米特插值(1.3.1 节)。

1.2.2 一般的多项式插值和误差

首先讨论拉格朗日插值。对于 $n+1$ 个节点 $x_0, \cdots, x_n$ 的函数值 $f_0, \cdots, f_n$ 要求作 n 次多项式

$$F(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n \tag{1.2.18}$$

使得

$$F(x_i)=f_i, \quad i=0, 1, \cdots, n \tag{1.2.19}$$

根据 1.2.1 节中式(1.2.3)的启发,可以作 $n+1$ 个基函数

$$l_i(x)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}\frac{x-x_k}{x_i-x_k}, \quad i=0, 1, \cdots, n \tag{1.2.20}$$

显然可见

$$l_i(x_j)=\delta_{ij}=\begin{cases}1, & 当\ i=j\\0, & 当\ i\neq j\end{cases} \tag{1.2.21}$$

因此

$$F(x)=\sum_{i=0}^{n}f_il_i(x) \tag{1.2.22}$$

满足插值条件(1.2.19),它就是所要求的多项式。也可以命

$$\omega(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k) \tag{1.2.23}$$

不难验证

$$\omega'(x_i)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}(x_i-x_k) \tag{1.2.24}$$

因此,基函数(1.2.20)也可以表成

$$l_i(x)=\frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}, \quad i=0, 1, \cdots, n \tag{1.2.25}$$

利用微积分中的洛尔定理可以证明(见[5]):n 次拉氏插值的余项可以表为

$$f(x)-F(x)=\frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi)\omega(x), \quad \xi\in[x_0, \cdots, x_n, x] \tag{1.2.26}$$

1.2.1 节中式 (1.2.3) 的余项都是此式的特例。命 h 为区间 $[x_0, \cdots, x_n]$ 的宽度, M_{n+1} 为 $|f^{(n+1)}|$ 在这个区间上的极大值,则还可证明,函数连同导数有如下的估计式

$$|f^{(p)}(x)-F^{(p)}(x)|\leqslant\frac{1}{(n+1-p)!}M_{n+1}h^{n+1-p}, \quad 0\leqslant p\leqslant n, \quad x\in[x_0, \cdots, x_n] \tag{1.2.27}$$

据此,对于(1.2.3)各式的导数逼近性可以得出相当的结论。

埃尔米特插值也可以推广到一般的情况。对于 $n+1$ 个节点 $x_0, \cdots, x_n$ 上的函数值 $f_0, \cdots, f_n$ 及一阶导数值 $f'_0, \cdots, f'_n$, 根据 $2(n+1)$ 个插值条件

$$F(x_i)=f_i, \quad F'(x_i)=f'_i, \quad i=0, 1, \cdots, n \tag{1.2.28}$$

可以唯一地定出 $2n+1$ 次的插值多项式 $F(x)$。在 1.2.1 节中式(1.2.13)、(1.2.17)的启发下,可以取 $2(n+1)$ 个基函数

$$\left.\begin{aligned}\alpha_i(x)&=(l_i(x))^2\left[1-\frac{\omega''(x_i)}{\omega'(x_i)}(x-x_i)\right]\\\beta_i(x)&=(l_i(x))^2(x-x_i), \quad i=0, 1, \cdots, n\end{aligned}\right\} \tag{1.2.29}$$

这里 $l_i(x)$, $\omega(x)$ 由式(1.2.20), (1.2.23)给出。不难验证

$$\alpha_i(x_j)=\delta_{ij}, \quad \alpha_i'(x_i)=0$$
$$\beta_i(x_j)=0, \quad \beta_i'(x_j)=\delta_{ij}$$

因此

$$F(x)=\sum_{i=0}^{n}[f_i\alpha_i(x)+f_i'\beta_i(x)] \tag{1.2.30}$$

确实满足插值条件(1.2.28)，它就是所要求的埃尔米特插值多项式。类似于式(1.2.26)，(1.2.27)有余项估计

$$f(x)-F(x)=\frac{1}{(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\xi)(\omega(x))^2, \quad \xi\in[x_0, \cdots, x_n, x] \tag{1.2.31}$$

$$|f^{(p)}(x)-F^{(p)}(x)|\leqslant\frac{1}{(2n+2-p)!}M_{2n+2}h^{2n+2-p}, \quad 0\leqslant p\leqslant 2n+1, x\in[x_0, \cdots, x_n] \tag{1.2.32}$$

埃尔米特插值还可以推广到包含更高阶导数以及各节点包含的导数阶不均等的情况，这里就不赘述了。

关于插值过程的稳定性

根据余项估计(1.2.26)、(1.2.31)，似乎会认为插值的次数愈高愈好，但并不尽然。实际上，在插值过程中误差有两种来源：一是由原函数$f(x)$被代以插值函数$F(x)$引起的，这就是上面说到的余项，即截断误差；另一是由节点数据f_i本身的误差所引起的。通常由于实验的误差，或者计算过程中的舍入等等，总会带来数据误差，这种误差在插值过程中可能被扩散和放大，这就是插值的稳定性问题。

以拉氏插值为例，设真值f_i被代以含误差的$\bar{f}_i=f_i-\delta f_i$，命$\bar{F}(x)$为以$\bar{f}_0, \cdots, \bar{f}_n$为基础的插值多项式，于是最终的误差是

$$f(x)-\bar{F}(x)=[f(x)-F(x)]+[F(x)-\bar{F}(x)]$$

右端第一项就是余项，根据式(1.2.22)第二项表为

$$F(x)-\bar{F}(x)=\sum_{i=0}^{n}\delta f_i l_i(x)$$

因此，在节点x_i上的数据误差δf_i是通过该点的插值基函数$l_i(x)$而全面扩散乃至放大的。因此，插值基函数也就是数据误差的"影响函数"。图1.8表示一个$l_i(x)$，它在基本区间$[x_0, \cdots, x_n]$内，即内插时作波动状；在基本区间之外则按距离的n次幂放大。因此当n趋大时，插值过程对于样点的数据误差非常敏感，这就是说高次插值具有数值不稳定性。

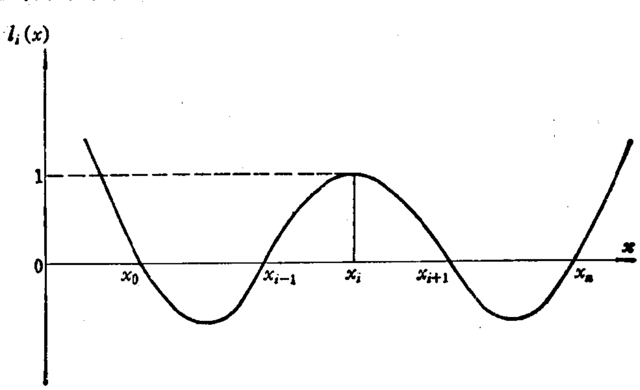

图 1.8

1.2.3 关于多项式插值的运用

单纯的多项式插值是简单而通用的方法，但是它也有其弱点，即具有上面所说的高次时的数值不稳定性。因此，在实际运用时不可盲目使用，否则会导致严重的差错。

(一)提高精度的问题

比较图1.5～图1.9可以看出，当插值的次数提升时，逼近程度也逐步改善。例如二次插值在小范围内就有很好的密合。事实上，当函数$f(x)$在整个实数轴$-\infty<x<\infty$上为解析函数，并且作为复变函数$f(z)$在整个z平面上为解析，则可以证明：在实轴的任意区间$a\leqslant x\leqslant b$上采用等距节点，并且逐次加密的插值过程收敛于原函数$f(x)$，在这种情况下精确度是随次数升高而提高的。

对于不光滑的函数情况就不相同了。例如取$f(x)=|x|$，它在$x=0$处有导数间断，可以证明在区间$|x|\leqslant 1$上逐次加密的等距插值过程是发散的。更有甚者，如取函数

$$f(x)=\frac{1}{1+x^2}$$

(图1.9)，它在整个实轴上解析，因此是高光滑度的函数。但是，可以证明，在区间$|x|\leqslant 5$上逐次加密的等距插值过程是发散的。这一事实与前引结果并不矛盾，因为$f(x)$在复数平面内的延拓$f(z)=\frac{1}{1+z^2}$在虚轴上有两个奇点$z=\pm i$，发散性正是由这两个“隐藏”的奇点引起的。图1.10中的实线表示一个通过十个点的九次插值，在区间的两端出现大幅度的波动扭拐，显然是“多余”的，不合理的。

由于上述原因，盲目地提高插值次数是不可取的，甚至会导致极坏的后果。实践中，插值次数高于6、7次就很少了。一般是采用分段低次的插值来提高精度。图1.10中的虚线是用分段三次，即所谓样条插值的结果，比单纯的九次插值有显著改进(参考§1.3)。

(二)外插的问题

当计算点落在插值基本区间之内时叫做内插，否则叫做外插。有时人们仅在变量的一

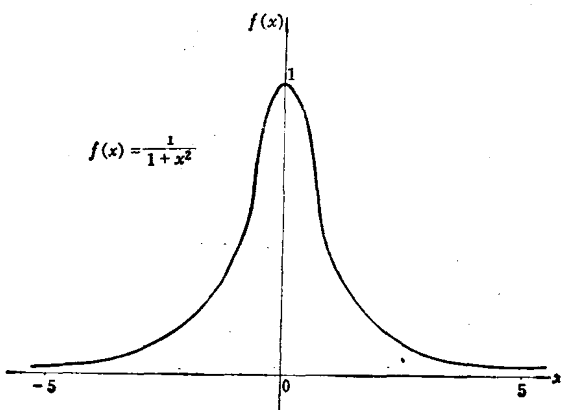

图 1.9

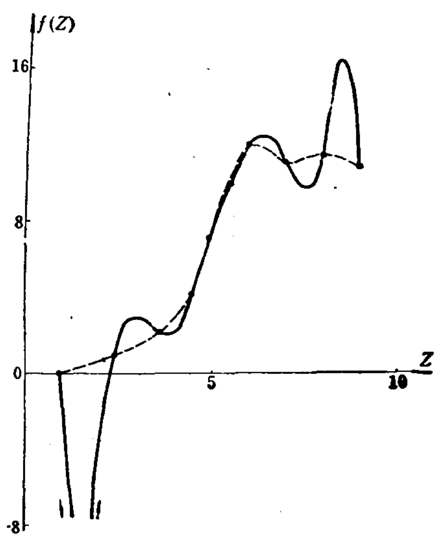

图 1.10

定范围之内掌握数据和规律，需要据此外推在该范围以外的行为，这就要用外插。

据1.2.2节所述，一个节点上的误差的影响，当传出了基本区间之外后，就会按插值次数 n 的幂次而无穷增长。因此外插，特别当次数较高和距离较远时是很不可靠的。

临边节点的布局也影响到外插的可靠性。例如用三点 $x_0=0$，$x_1=\sigma$，$0<\sigma<1$，$x_2=1$ 外插到 $x=1.5$ 及 $x=2$。设在节点 x_1 处函数值 f_1 有误差 $\delta=\pm1$，则它在各点的影响，即放大因子为 $l_1(x)=\mp\dfrac{x(x-1)}{\sigma(1-\sigma)}$。图1.11表示对不同的 σ 时的误差曲线。当 $\sigma=0.9$ 或 0.1 时 $l_1(1.5)=\mp8.33$，$l_1(2)=\mp22.2$。就好像不等臂的杠杆，在短臂端按下一点点，在长臂端就翘起很多。这种现象在外插是常常出现的(图1.11a)。如取 $\sigma=0.5$ 则情况改善，得 $l_1(1.5)=\mp3$(图1.11b)。如果索性抛弃 x_2 改用 x_0，x_1 的线性插值，则在 x_1 处的单位误差影响为 $l_1(x)=\dfrac{x}{\sigma}$，仍取 $\sigma=0.9$，则情况进一步改善，得 $l_1(1.5)=\pm1.7$(图1.11c)。间距的不均匀性，外插点的距离以及插值次数的这些影响，可以从图1.11(a)、(b)、(c)看出。因此进行外插时应该依据对具体问题及插值规律的了解而慎重处理。

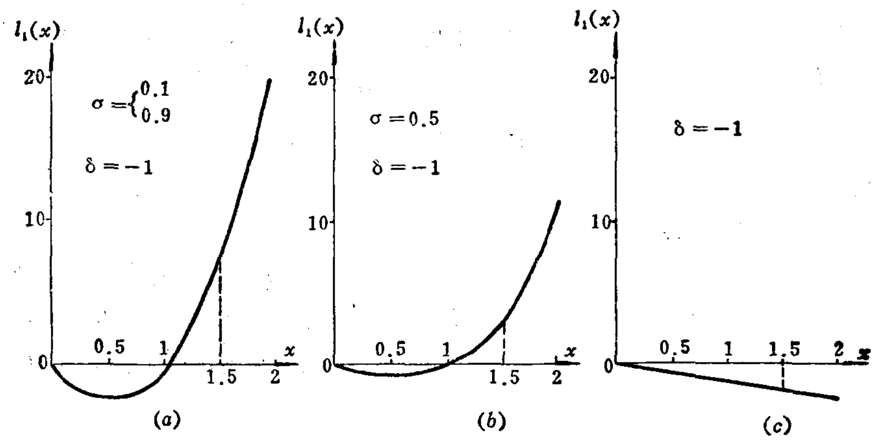

图 1.11

(三)含有间断性的问题

多项式是一种"初等"的解析函数，本身具有最高度的光滑性，因此在本质上只适应于高光滑函数的插值。当原函数自身或其某阶导数有间断时，次数高于间断阶的多项式插值是不适应的。

图1.12中的间断曲线(实线)表示在正态压力下单位质量的水 H_2O 的热容量 C 随温度 T 的变化率。它有两个间断点，即冰点 $T=0$°C 及沸点 $T=100$°C。间断点的跃值分别相应于熔化热及汽化热。曲线的斜率就是比热。如果在固、液、气三相各取一个代表点作二次插值，如图中虚线所示，则显然是相当歪曲了真相的。如果同样取这三个样点，但是分别在三相，那么，即使作0次(即水平)插值，它就大有改进了。

当函数连续而导数间断时，情况也类似。例如：在区间 $-1\leqslant x\leqslant1$ 上，取 $f(x)=1-|x|$，用 $x=-1,\ 0,\ 1$ 用三个样点作抛物线，如图1.13中的虚线，其情况显然不好。如果逐次等距加密节点作高次插值，则可以证明必以发散告终。但如果仍取 $x=-1,\ 0,\ 1$ 为节点，分段作线性插值，则恰好准确地得到原函数。这虽然是个极端的例子，但也足以说明对于插值应该看对象灵活运用，而不要陷于盲目性。