SHUZHI FANGFA

数值方法

浙江科学技术出版社

数 值 方 法

易大义 蒋叔豪 李有法编

浙 江 科 学 技 术 出 版 社

责任编辑：周伟元
封面设计：翁祖団

数 值 方 法

易大义　蒋叔豪　李有法编

浙江科学技术出版社出版
浙 江 新 华 印 刷 厂 印 刷
浙 江 省 新 华 书 店 发 行
开本850×1168　1/32　印张15.125　字数369,000
1984年9月第 一 版
1984年9月第一次印刷
印数：1—12,700

统一书号：　7221·53
定　　价：　2.22 元

内 容 提 要

本书由浙江大学计算数学教研室易大义等编写.

全书共分十一章，着重介绍计算机上常用的计算方法，包括多项式插值、数值积分与微分、线性及非线性方程组解法、微分方程数值解等方面的基础知识，以及在计算机上实现的步骤.

该书内容力求精练，从典型实际问题着手，循序渐进，易于教学.每章都有小结，并配有习题，适合作为工科院校各专业开设计算方法课教材或参考书；也可作为业余科技大学、电视大学有关专业及工程技术人员自学与进修计算方法用书.

5531
8

前　言

本教材是为工科院校高年级学生和工科研究生学习数值方法编写的，着重介绍计算机上常用的计算方法，同时也引进一些基本概念及理论.

全书共分两部分：第一部分包括第一章到第九章，讲授时间大约为72学时（不包括打“*”号部分）；第二部分包括第十章和第十一章，可供理工科有关专业学习偏微分方程数值解时选用，讲授时间大约为24学时.

本教材每一章中的主要方法都写有计算步骤或算法，可供读者参考. 书内还配有较多的数值例子，便于读者自学.

1983年11月，在武汉召开的教育部直属工科院校应用数学协作组计算数学教材讨论会上，对本教材进行了审议. 参加的学校有清华大学，西安交通大学，华中工学院，大连工学院，天津大学，南京工学院，重庆大学，华侨大学等院校的老师，并由清华大学李庆扬副教授负责主审. 他们对初稿提出了不少宝贵的意见和建议，谨此向他们表示深切的谢意.

本书第一至四章由李有法编写，第五至八章由易大义编写，第九至十一章由蒋叔豪编写.

限于水平，书中缺点和错误一定不少，希望读者批评指正.

编　者

1984年2月

目　录

第一章　误差 …………………………………………………………（ 1 ）
§ 1　误差的来源 …………………………………………………………（ 1 ）
§ 2　绝对误差、相对误差与有效数字 …………………………………（ 3 ）
2·1 绝对误差与绝对误差限 ……………………………………………（ 3 ）
2·2 相对误差与相对误差限 ……………………………………………（ 4 ）
2·3 有效数字 ……………………………………………………………（ 5 ）
2·4 有效数字与相对误差间的联系 ……………………………………（ 6 ）
§ 3　估计误差的一个基本方法 …………………………………………（ 8 ）
§ 4　数值计算中必须注意的几个问题 …………………………………（ 10 ）
习题一 …………………………………………………………………（ 13 ）
第二章　多项式插值 ……………………………………………………（ 14 ）
§ 1　引言 …………………………………………………………………（ 14 ）
1·1 本章要解决的问题 …………………………………………………（ 14 ）
1·2 多项式插值问题的基本提法 ………………………………………（ 14 ）
1·3 插值多项式的存在唯一性 …………………………………………（ 15 ）
§ 2　插值多项式的求法 …………………………………………………（ 16 ）
2·1 基本插值多项式 ……………………………………………………（ 16 ）
2·2 拉格朗日插值多项式 ………………………………………………（ 17 ）
§ 3　差分与用差分表示的插值多项式 …………………………………（ 20 ）
3·1 差分 …………………………………………………………………（ 20 ）
3·2 前插公式与后插公式 ………………………………………………（ 23 ）
3·3 均差与牛顿基本插值多项式 ………………………………………（ 27 ）
§ 4　插值多项式的余项 …………………………………………………（ 31 ）
§ 5　埃尔米特插值 ………………………………………………………（ 34 ）
5·1 本节要解决的问题 …………………………………………………（ 34 ）

5•2 埃尔米特插值多项式 $H_{2n+1}(x)$ 的求法 ……………………(35)
§ 6　三次样条插值 ………………………………………………(39)
6•1 三次样条插值问题的提法 ……………………………………(41)
6•2 边界条件问题的提出与常见类型 ……………………………(42)
6•3 三次样条插值函数的求法 ……………………………………(43)
小结 ………………………………………………………………(55)
习题二 ……………………………………………………………(55)
第三章　数值微分与数值积分 ………………………………(58)
§ 1　引言 ……………………………………………………………(58)
§ 2　数值微分 ………………………………………………………(59)
2•1 利用插值多项式求数值导数 …………………………………(59)
2•2 利用三次样条插值函数求数值导数 …………………………(63)
§ 3　数值积分初步 …………………………………………………(64)
3•1 构造数值求积公式的方法 ……………………………………(65)
3•2 等距节点下的插值型求积公式 ………………………………(65)
3•3 误差分析 ………………………………………………………(69)
3•4 求积公式的代数精度 …………………………………………(73)
3•5 牛顿——柯特斯公式的稳定性和收敛性简析 ………………(75)
§ 4　复合求积 ………………………………………………………(76)
4•1 复合求积公式 …………………………………………………(76)
4•2 误差分析 ………………………………………………………(78)
4•3 步长的自动选择 ………………………………………………(81)
§ 5　龙贝格算法 ……………………………………………………(83)
5•1 梯形法的逐次分半算法 ………………………………………(83)
5•2 龙贝格算法 ……………………………………………………(86)
§ 6　高斯型求积公式 ………………………………………………(90)
6•1 正交多项式 ……………………………………………………(91)
6•2 高斯点与正交多项式的联系 …………………………………(96)
6•3 高斯型求积公式的构造 ………………………………………(97)
6•4 高斯型求积公式的余项 ………………………………………(99)
6•5 稳定性与收敛性 ………………………………………………(101)

6·6 一般高斯型求积公式及其构造 ……………………………………（102）
§ 7 广义积分的计算* ……………………………………………………（105）
7·1 无穷区间上的广义积分 ……………………………………………（105）
7·2 无界函数的广义积分 ………………………………………………（107）
小结 ……………………………………………………………………（109）
习题三 …………………………………………………………………（110）
第四章 曲线拟合与函数逼近 ……………………………………（113）
§ 1 引言 …………………………………………………………………（113）
§ 2 曲线拟合的最小二乘法 ……………………………………………（114）
2·1 什么是最小二乘法 …………………………………………………（114）
2·2 最小二乘解的求法 …………………………………………………（116）
2·3 切比雪夫多项式在求最小二乘解中的应用 ………………………（126）
§ 3 连续函数的多项式逼近* ……………………………………………（132）
3·1 问题的提法 …………………………………………………………（132）
3·2 最佳一致逼近多项式及其求法 ……………………………………（134）
3·3 最佳平方逼近多项式及其求法 ……………………………………（143）
§ 4 快速富氏变换 ………………………………………………………（148）
4·1 三角函数插值 ………………………………………………………（149）
4·2 离散富氏变换及其逆变换 …………………………………………（152）
4·3 快速富氏变换（FFT） ………………………………………………（153）
4·4 实序列的 FFT 算法 …………………………………………………（159）
小结 ……………………………………………………………………（163）
习题四 …………………………………………………………………（163）
第五章 非线性方程求根 …………………………………………（166）
§ 1 引言 …………………………………………………………………（166）
§ 2 二分法 ………………………………………………………………（166）
§ 3 迭代法 ………………………………………………………………（170）
§ 4 牛顿——雷扶生方法 ………………………………………………（179）
4·1 牛顿公式 ……………………………………………………………（179）
4·2 牛顿法局部收敛性 …………………………………………………（180）
4·3 牛顿下山法 …………………………………………………………（187）

§ 5 迭代法的收敛阶和加速收敛方法 …………………… (190)
5·1 迭代法的收敛阶 …………………… (190)
5·2 埃特金加速方法(Δ^2-方法) …………………… (194)
§ 6 解非线性方程的插值方法 …………………… (198)
6·1 正割法 …………………… (198)
6·2 抛物线法 …………………… (200)
小结 …………………… (203)
习题五 …………………… (203)
第六章 解线性方程组的直接法 …………………… (206)
§ 1 引言 …………………… (206)
§ 2 高斯消去法 …………………… (207)
2·1 高斯消去法 …………………… (208)
2·2 高斯消去法的计算量 …………………… (213)
2·3 高斯——若当消去法 …………………… (214)
§ 3 高斯主元素消去法 …………………… (216)
3·1 完全主元素消去法 …………………… (217)
3·2 列主元素消去法 …………………… (219)
3·3 标度化列主元素消去法 …………………… (221)
3·4 用高斯——若当消去法(列主元素)求逆矩阵 …………………… (224)
§ 4 用直接三角分解法解方程组 …………………… (228)
§ 5 解对称正定矩阵方程组的平方根法 …………………… (235)
5·1 对称正定矩阵及其性质 …………………… (236)
5·2 平方根法 …………………… (237)
5·3 改进的平方根法 …………………… (240)
5·4 用改进的平方根法解大型带状矩阵方程组 …………………… (244)
§ 6 解三对角线方程组的追赶法 …………………… (245)
小结 …………………… (248)
习题六 …………………… (249)
第七章 解方程组的迭代法 …………………… (252)
§ 1 引言 …………………… (252)
§ 2 向量和矩阵的范数 …………………… (252)

§ 3　解线性方程组的雅可比迭代法与高斯——塞德尔迭代法 ……………………………………………………………… (261)
3·1 迭代法一般概念 ……………………………………………… (261)
3·2 雅可比迭代法 ………………………………………………… (264)
3·3 高斯——塞德尔迭代法 ……………………………………… (266)
§ 4　迭代法的收敛性 ……………………………………………… (268)
§ 5　解线性方程组的超松弛迭代法 ……………………………… (273)
§ 6　误差估计和迭代改善方法 …………………………………… (280)
6·1 矩阵的条件数　病态方程组 ………………………………… (280)
6·2 迭代改善方法* ……………………………………………… (286)
§ 7　解非线性方程组的迭代法 …………………………………… (288)
7·1 解非线性方程组的一般迭代法 ……………………………… (289)
7·2 解非线性方程组的牛顿法 …………………………………… (295)
小结 ……………………………………………………………… (300)
习题七 …………………………………………………………… (300)
第八章　矩阵的特征值与特征向量的计算方法 ……………… (304)
§ 1　引言 …………………………………………………………… (304)
§ 2　幂法及反幂法 ………………………………………………… (308)
2·1 幂法 …………………………………………………………… (308)
2·2 加速方法 ……………………………………………………… (314)
2·3 反幂法 ………………………………………………………… (317)
§ 3　计算对称矩阵特征值的雅可比方法 ………………………… (322)
3·1 引言 …………………………………………………………… (322)
3·2 古典的雅可比方法 …………………………………………… (326)
3·3 雅可比过关法 ………………………………………………… (330)
小结 ……………………………………………………………… (331)
习题八 …………………………………………………………… (331)
第九章　常微分方程初值问题的数值解法 …………………… (333)
§ 1　引言 …………………………………………………………… (333)
§ 2　尤拉方法 ……………………………………………………… (336)
2·1 尤拉方法的导出 ……………………………………………… (336)

2·2 尤拉方法的精度分析 ……………………………………………（339）
2·3 泰勒方法 ……………………………………………………（341）
2·4 改进的尤拉方法 ……………………………………………（344）
§3 龙格——库塔方法 …………………………………………（350）
3·1 龙格——库塔方法的导出 …………………………………（351）
3·2 高阶龙格——库塔方法 ……………………………………（353）
3·3 步长的自动选择 ……………………………………………（358）
§4 线性多步方法 ………………………………………………（360）
4·1 阿达姆斯显式与隐式线性多步方法 ………………………（362）
4·2 阿达姆斯预估——校正方法 ………………………………（367）
§5 一阶方程组与高阶方程的数值解法 ………………………（372）
§6 稳定性概念* …………………………………………………（376）
6·1 稳定性定义 …………………………………………………（376）
6·2 绝对稳定性与条件稳定性 …………………………………（379）
小结 ……………………………………………………………（385）
习题九 …………………………………………………………（385）
第十章 常微分方程边值问题的数值解法 ……………………（389）
§1 打靶法 ………………………………………………………（389）
§2 有限差分法 …………………………………………………（392）
2·1 差分方程的建立 ……………………………………………（392）
2·2 其他边值条件的讨论 ………………………………………（394）
2·3 非线性方程边值问题的差分方法 …………………………（395）
§3 有限元方法 …………………………………………………（397）
3·1 变分原理 ……………………………………………………（397）
3·2 里兹过程 ……………………………………………………（399）
3·3 基函数的选取 ………………………………………………（401）
3·4 有限元方法的计算步骤 ……………………………………（404）
小结 ……………………………………………………………（407）
习题十 …………………………………………………………（407）
第十一章 偏微分方程的数值解法 ……………………………（409）
§1 基本概念及解抛物型方程的差分格式 ……………………（410）

1·1 古典显格式 …………………………………………………………… (410)
1·2 古典隐格式 …………………………………………………………… (416)
1·3 收敛性、稳定性的概念 ……………………………………………… (416)
1·4 李查逊格式及六点对称格式 ………………………………………… (420)
§ 2 稳定性与收敛性的讨论及判稳方法 ………………………………… (422)
2·1 稳定性定义 …………………………………………………………… (422)
2·2 判别稳定性的代数方法 ……………………………………………… (423)
2·3 判别稳定性的冯·诺依曼方法(分离变量法) ……………………… (426)
§ 3 双曲型方程的差分格式 ……………………………………………… (429)
3·1 双曲型方程解的一些特性 …………………………………………… (429)
3·2 一阶线性双曲型方程的差分格式 …………………………………… (431)
3·3 变系数一阶方程的差分格式 ………………………………………… (434)
3.4 二阶线性双曲型方程的差分格式 …………………………………… (437)
§ 4 解椭圆型方程边值问题的差分格式 ………………………………… (440)
4.1 差分格式的建立 ……………………………………………………… (440)
4.2 实例分析 ……………………………………………………………… (443)
§ 5 解椭圆型方程边值问题的有限元法 ………………………………… (445)
5·1 变分原理 ……………………………………………………………… (445)
5·2 单元剖分及基函数的选取 …………………………………………… (449)
5·3 有限元方程的形成 …………………………………………………… (453)
5·4 实例分析 ……………………………………………………………… (459)
小结 ……………………………………………………………………… (465)
习题十一 ………………………………………………………………… (465)
附录 ……………………………………………………………………… (468)

第一章 误　　差

§1 误差的来源

利用计算机解决科学计算问题的过程，大致可以分为两个环节：首先将实际问题归结为数学问题，建立起比较合适的、具体的数学模型，如微分、积分、方程、级数求和等；然后选择适当的解题方法，编制好程序，上机算出结果．在这两个环节中，每一步都可能产生误差．

例如，研究水平悬挂的电线在自身重量作用下所形成的曲线形状时，可以近似地把电线看成是柔软、均匀、无伸缩的，从而在图1—1所示的坐标系下，把这个问题归结为求微分方程

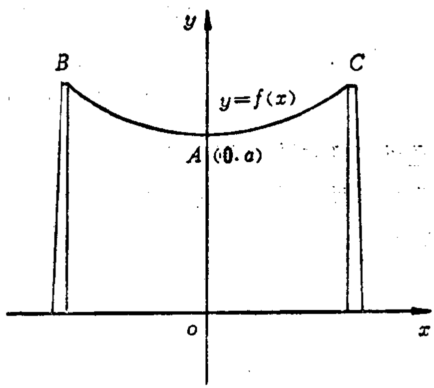

图　1—1

$$\begin{cases} y''=\dfrac{\mu}{H}\sqrt{1+(y')^2}, \\ y|_{x=0}=a, \quad y'|_{x=0}=0 \end{cases} \tag{1.1}$$

解的问题，其中 a 为电线最低处 A 到 x 轴的距离，μ 是单位长电线的重量，H 为电线在 A 处的水平拉力（该微分方程的建立过程在一般高等数学教科书中都能找到）．显然，这种通过对实际问题进

行抽象、简化得到的数学模型，与实际现象之间必然存在误差，这种误差称为**“模型误差”**．同时，由于模型中出现的参数(如微分方程(1.1)中的距离 a 、单位长重量 μ 、水平拉力 H 等)常常是通过观测和实验得到的，它们和实际的大小之间也有误差，这种误差称为**观测误差**或**参量误差**．因此，在建立数学模型的过程中，往往会产生模型误差和观测误差．

根据实际问题建立起来的数学模型，在很多情况下要想得到准确解是困难的，因而常用数值方法算出它的近似解．例如，可以利用级数

$$e^x=1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\cdots \qquad (|x|<\infty),$$

计算积分

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,dx=\int_0^1\left((1-x^2+\frac{x^4}{2!}-\frac{x^6}{3!}+\cdots\right)dx$$

$$=1-\frac{1}{3}+\frac{1}{2!}\,\frac{1}{5}-\frac{1}{3!}\,\frac{1}{7}+\cdots.$$

显然，解的准确值必须经过无穷步运算来完成．实际上这是办不到的，我们只能经过有限步运算来获得解的近似值．若取前六项之和(记作 S_6))作为积分的近似值，则

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,dx \approx S_6=1-\frac{1}{3}+\frac{1}{2!}\,\frac{1}{5}-\frac{1}{3!}\,\frac{1}{7}$$

$$+\frac{1}{4!}\,\frac{1}{9}-\frac{1}{5!}\,\frac{1}{11},$$

这里产生了一种误差(记作 R_6)

$$R_6=\frac{1}{6!}\,\frac{1}{13}-\frac{1}{7!}\,\frac{1}{15}+\frac{1}{8!}\,\frac{1}{17}-\frac{1}{9!}\,\frac{1}{19}+\cdots,$$

这种误差称为**截断误差**或**方法误差**．由于这里的截断误差是一个收敛的交错级数，故

$$|R_6|\leqslant\frac{1}{6!}\times\frac{1}{13}<0.0002,$$

如果在计算S_6时，每一项都按四舍五入法则取到小数点后第四位，则

$$S_6 \approx 1.0000-0.3333+0.1000$$
$$-0.0238+0.0046-0.0008=0.7467.$$

在计算过程中由于对数进行舍入而引起的误差，称为**舍入误差**. 容易知道，在上面计算过程中，舍入误差不超过$0.00005 \times 4=0.0002$. 因此，用上述方法计算积分$\int_0^1 e^{-x^2}dx$时,所得近似值0.7467的截断误差与舍入误差的总和不超过0.0004.

除了建立数学模型中产生的模型误差与观测误差，以及解题过程中产生的截断误差与舍入误差外，初始数据有时也有误差，这种误差称为**初值误差**.

上述种种误差，都会影响计算结果的准确性，因此，需要了解与研究这些误差. 本书将着重研究截断误差，并对舍入误差作一些分析.

§2　绝对误差、相对误差与有效数字

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. 但是，由于它们在科学计算中的重要性，因此下面再简单提一下.

2.1　绝对误差与绝对误差限

设x^*为准确值x的一个近似值，称x^*-x为x^*的**绝对误差**，简称误差，并用e^*表示，即

$$e^*=x^*-x. \tag{2.1}$$

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^*的真值，只能根据具体测量或计算的情况，估计e^*的绝对值的某个上界ε^*，即

$$|e^*|=|x^*-x|\leqslant\varepsilon^*,\qquad(2.2)$$

并称 ε^* 为近似值 x^* 的**绝对误差限**，简称**误差限**．例如，由§1知

$$\left|\int_0^1 e^{-x^2}dx-0.7467\right|\leqslant 0.0004.$$

因此，0.0004是积分 $\int_0^1 e^{-x^2}dx$ 的近似值 0.7467 的一个绝对误差限.

在工程技术上，常将不等式(2.2)表示为

$$x=x^*\pm\varepsilon^*.$$

如 $l=100\pm0.5$（毫米）表示 $l^*=100$ 毫米是准确值 l 的一个近似值，0.5毫米是该近似值的一个绝对误差限，即

$$|l-l^*|\leqslant 0.5\text{毫米}.$$

2.2 相对误差与相对误差限

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．如有两个数：

$$x=10\pm1;\qquad y=1000\pm5,$$

即

$$x^*=10,\ \varepsilon^*(x)=1;\quad y^*=1000,\ \varepsilon^*(y)=5.$$

这里 $\varepsilon^*(y)$ 是 $\varepsilon^*(x)$ 的五倍，但是不能就此断定近似值 x^* 一定比 y^* 准确程度高．若考虑到数本身的大小，在 1000 内差 5 显然比在10内差 1 更准确些．这说明一个近似值的准确程度，除了与其绝对误差有关，还与准确值本身有关．为此，需要引入相对误差的概念.

设 x^* 为准确值 x 的一个近似值，e^* 为它的绝对误差．我们称比值 $\frac{e^*}{x}$ 为近似值 x^* 的**相对误差**，并用记号 e_r^* 表示，即

$$e_r^*=\frac{e^*}{x}=\frac{x^*-x}{x}.\qquad(2.3)$$

由于当 $\left|\frac{e^*}{x^*}\right|$ 较小时，差

$$\frac{e^*}{x}-\frac{e^*}{x^*}=\frac{e^*(x^*-x)}{x\,x^*}=\frac{(e^*)^2}{(x^*-e^*)x^*}$$

$$=\frac{\left(\frac{e^*}{x^*}\right)^2}{1-\frac{e^*}{x^*}}$$

是$\frac{e^*}{x^*}$的平方级，可以忽略不计，因此在实际计算中常取

$$e_r^*=\frac{e^*}{x^*}=\frac{x^*-x}{x^*}. \tag{2.4}$$

和绝对误差类似，只能估计相对误差绝对值的某个上界 ε_r^*，即

$$|e_r^*|\leqslant\varepsilon_r^*,$$

并称 ε_r^* 为近似值 x^* 的**相对误差限**.

相对误差与相对误差限都是无名数，通常用百分数表示.

容易看出，同一个近似值 x^* 的绝对误差限 ε^* 与相对误差限 ε_r^*有关系

$$\varepsilon_r^*=\frac{\varepsilon^*}{|x^*|}.$$

因此，$x=10\pm1$ 的近似值 $x^*=10$ 的相对误差限为

$$\varepsilon_r^*(x)=\frac{1}{10}=10\%,$$

而 $y=1000\pm5$ 的近似值 $y^*=1000$ 的相对误差限为

$$\varepsilon_r^*(y)=\frac{5}{1000}=0.5\%.$$

可见，从相对误差来看，y 的近似值 y^* 远比 x 的近似值 x^* 准确程度高.

2.3 有效数字

若近似值 x^* 的误差不超过某位数字的半个单位，而从该位数字到 x^* 最左边的那个非零数字(即自左向右看，第一个出现的