

目 录

绪 论	1
§1 工程力学与数值方法	1
§2 近似数的表示	2
2.1 近似数	2
2.2 绝对误差和相对误差	3
2.3 有效数字	4
§3 近似数的运算	4
3.1 近似数的运算规则	4
3.2 近似数对算法的要求	5
§4 应用举例	8
第一章 代数插值法	9
§1 代数插值的根本理论	9
1.1 代数插值问题	9
1.2 插值多项式存在的唯一性	10
1.3 插值多项式的余项	11
§2 Lagrange 插值	13
2.1 线性插值与抛物插值	13
2.2 Lagrange 插值	16
2.3 分段低次插值	18
§3 逐点线性插值	18
§4 Hermite 插值	23
§5 三次样条插值	29
§6 多元函数的插值	40
6.1 多元函数插值问题	40
6.2 二元线性插值	41

6.3	二元二次插值	42
6.4	二元Lagrange插值	43
§ 7	应用举例	47
第二章	数据拟合与最小二乘法	55
§ 1	线性最小二乘拟合	56
§ 2	正交多项式与最小二乘拟合	61
§ 3	非线性最小二乘拟合	67
3.1	用变换方法化为线性拟合问题	67
3.2	Gauss-Newton法	69
3.3	改进的Gauss-Newton法	72
§ 4	多元最小二乘拟合	75
§ 5	线性矛盾方程组的最小二乘法	77
5.1	求解法方程	78
5.2	正交化方法	80
§ 6	应用举例	84
第三章	数值积分与数值微分	94
§ 1	数值求积的基本公式	94
§ 2	Newton-Cotes公式	96
2.1	Newton-Cotes公式的基本形式	96
2.2	复化求积法	98
2.3	求积公式的误差	101
2.4	变步长Simpson公式	102
§ 3	Romberg积分法	105
3.1	Richardson外推法	105
3.3	Romberg积分法	107
§ 4	Gauss型求积公式	111
4.1	求积公式的代数精度	111
4.2	Gauss型求积公式的构造	111
4.3	常用的Gauss型求积公式	118
§ 5	三次样条求积公式	128

§ 6	多重积分的数值计算	129
§ 7	数值微分	136
7.1	数值求导的基本公式	136
7.2	几个常用的数值微分公式	137
7.3	用二次样条插值函数求数值导数	141
§ 8	应用举例	142
第四章	非线性方程及方程组的解法	148
§ 1	根的隔离与二分法	148
1.1	根的隔离	148
1.2	二分法	149
§ 2	迭代法及其加速	151
2.1	一维迭代法	151
2.2	Aitken加速迭代法	154
§ 3	Newton法	157
§ 4	弦截法	160
§ 5	非线性方程组的解法	162
5.1	Newton法	162
5.2	最速下降法	166
§ 6	应用举例	170
第五章	线性代数方程组的解法	177
§ 1	Gauss消去法	177
1.1	Gauss消去法的计算过程	178
1.2	Gauss主元素消去法	181
1.3	标度化列主元消去法	183
§ 2	高斯三角分解法	188
2.1	Gauss消去法与矩阵的三角分解	188
2.2	列主元三角分解法	191
2.3	追赶法	195
2.4	平方根法及改进的平方根法	197
§ 3	大型稀疏方程组的解法	203

3.1	稀疏矩阵的存储	204
3.2	带状矩阵的三角分解	209
3.3	等带宽带状方程组的列主元消去法	210
3.4	非定变带宽带状方程组的改进平方根法	212
3.5	子结构法	215
3.6	对称半正定线性方程组的解法	221
3.7	含有部分已定变量值的方程组的解法	223
§ 4	行列式与逆矩阵的计算	224
4.1	行列式的计算	224
4.2	逆矩阵的计算	225
§ 5	向量范数与矩阵范数 矩阵的条件数	232
5.1	向量范数与矩阵范数	232
5.2	向量序列与矩阵序列的收敛性	234
5.3	矩阵的条件数	235
§ 6	解的精度估计与方程组的误差分析	237
6.1	关于方程组近似解的精度估计	237
6.2	方程组的误差分析	238
§ 7	病态方程组的解法	238
7.1	病态方程组与病态矩阵	240
7.2	病态方程组的解法	244
§ 8	迭代法	246
8.1	Jacobi 迭代法	247
8.2	Gauss-Seidel 迭代法	248
8.3	逐次超松弛迭代法	248
8.4	迭代法的矩阵形式	252
8.5	迭代法的收敛性	254
8.6	块迭代法	256
§ 9	共轭斜量法	264
§ 10	应用举例	266
第六章	矩阵特征值与特征向量的计算	273

§ 1	引 言	278
§ 2	矩阵特征值问题的基本知识	276
2.1	矩阵特征值的有关定义	280
2.2	矩阵特征值与特征向量的性质	281
2.3	矩阵特征值界的估计	281
§ 3	幂法及其加速	283
3.1	幂 法	283
3.2	幂法的加速	289
§ 4	对称矩阵的净化法	293
§ 5	压缩方法	294
§ 6	反幂法	301
6.1	计算矩阵按模最小特征值	301
6.2	计算给定近似特征值对应的特征向量	302
§ 7	对称矩阵的子空间迭代法	303
7.1	子空间迭代法的基本原理	306
7.2	算法及其说明	307
§ 8	Jacobi方法	310
8.1	Jacobi方法的原理	310
8.2	Jacobi过关法	313
§ 9	Householder方法	318
9.1	Householder变换	319
9.2	对称矩阵的三对角化过程	320
9.3	非对称矩阵的拟三角化过程	326
§ 10	QL方法	331
10.1	基本QL算法	331
10.2	对称矩阵带位移的QL算法	332
10.3	非对称矩阵带位移的QL算法	344
§ 11	广义特征值问题	348
11.1	化为标准特征值问题	348
11.2	子空间迭代法	354

11.3	f 与 Jacobi 方法	360
§ 12	应用举例	366
第七章	常微分方程数值解法	377
§ 1	Euler 法及其改进	378
1.1	Euler 法	378
1.2	改进的 Euler 法	379
1.3	Euler 法及改进的 Euler 法的误差	380
§ 2	Runge-Kutta 法	383
§ 3	Adams 法	387
§ 4	一阶方程组与高阶方程的数值解法	391
§ 5	收敛性与稳定性	395
§ 6	步长的选择	396
§ 7	边值问题的试射法	398
§ 8	边值问题的差分法	402
8.1	线性方程边值问题的差分法	403
8.2	非线性方程边值问题的差分法	406
§ 9	应用举例	408

绪 论

§1 工程力学与数值方法

在工程力学的研究和应用领域中,有许多问题最终都归结为求解各种数学问题,如方程求根、计算积分、构造逼近函数和求解矩阵特征值等。这些数学问题,仅仅依靠传统的解析方法多半是不可能解决的,唯有借助于计算机方能求其数值解。

数值方法,即研究利用计算机求解各种数学问题的理论和方法。它把求解一般数学问题的过程,转化为编制和运行只作四则运算和逻辑运算的计算机程序的过程。例如求解方程

$$e^x + 10x - 2 = 0$$

计算积分

$$\int_0^{\infty} e^{-x} \frac{\sqrt{x}}{x+1} dx$$

等问题,都可由计算机程序来完成。因此,对于力学工作者,学习数值方法是十分必要的。

为研究大型工程结构的静态和动态特性,以及为选取最优设计参数,需要进行大量的力学分析。目前国内外已经有很多这类专用程序供采用,但这些程序的核心内容是力学概念与进行力学分析所常用的数值方法的结合。作为力学工作者,不应满足于能找到解决问题的程序,而应了解程序所体现的数值方法及其实施手段,以便针对实际问题对现有程序进行维护和开发,从而扩大程序处理问题的范围和提高程序解决问题的能力。如有必要,还需研制新程序。因此,只有专业理论是不够的,还应当具有数值方法的知识和设计程序的能力。

数值方法自始至终与数字打交道,本书就从数字谈起。

§ 2 近似数的表示

2.1 近似数

在工程问题和科技计算中出现的数往往是近似数。所谓近似数，是与准确值相接近且在计算中以代替准确值的数。

产生近似数的情况有：

(1) 实验或观测得到的数。由于受到实验条件和测试手段的限制，必然是近似数。它与准确值的差异称为观测误差。

如表示一个构件几何尺寸的数：长1.5m、宽0.2m；表示一个物理量大小的数：速度30m/s、质量60kg等，都是观测得到的近似数。

(2) 作数值计算时产生的数。若算式中出现无理数或循环小数，运算前要先化为有限小数，即近似数。此数与原数的差异称为舍入误差。

例如算式中的 π 用3.1416来取代，其中就有舍入误差。

(3) 由极限过程定义の数值化为有限过程来计算，也只能得到它的近似数。它与原数值的差异称为截断误差。

例如，利用级数

$$e = 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \cdots + \frac{1}{n!} + \cdots$$

求 e 的近似数，如取 $n=3$ ，则有

$$e \approx 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} \approx 2.667$$

第一个近似等式产生截断误差，第二个近似等式产生舍入误差。因此近似数2.667中包含了截断误差和舍入误差。

实际上，不论是计算机运算或是人工计算，其数字总是有限位的，运算次数也总是有限次的，计算的结果亦必然受到上述误差的影响，而得到近似数。为了表示近似数的准确程度，现引进绝对误差、相对误差和有效数字的概念。

2.2 绝对误差和相对误差

设准确值 x^* 的近似数为 x , 其差

$$e_x = x^* - x$$

称为近似数 x 的绝对误差。

一般地说, 准确值 x^* 是未知的, 因而误差 e_x 的准确值也不得而知。但可根据具体情况估计 $|e_x|$ 的上界 ε_x , 即

$$|e_x| = |x^* - x| \leq \varepsilon_x$$

ε_x 称为近似数 x 的绝对误差限。在实际应用时, 常将上式表示成

$$x^* = x \pm \varepsilon_x$$

例如用毫米刻度的米尺测量长度为 x^* 的杆件, 读数是834mm, 显然它的误差限是0.5mm, 其长度可以记作

$$x^* = 834 \pm 0.5(\text{mm})$$

由此可见绝对误差是具有量纲单位的。

在许多情况下, 绝对误差的大小还不足以刻画近似数的准确程度。例如近似数500和近似数100的绝对误差都是1, 就不能简单地认为它们的准确程度相同, 应该认为500比100更准确。因此描述一个近似数的准确程度, 除了绝对误差之外, 还需考虑量本身的大小。

近似数 x 的绝对误差 e_x 与其自身 x 之比

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

称为近似数 x 的相对误差。由于 e_x 以及 x 不能准确地求得, 需要估计 $|e_x|$ 的上界 ε_x , 即

$$|e_r| = \left| \frac{x^* - x}{x} \right| \leq r_x$$

r_x 称为近似数 x 的相对误差限, 通常以百分数表示。

例如, 上面提到的近似数500和近似数100的绝对误差都是1, 它们的相对误差分别是1/500 (即0.2%) 和1/100 (即1%), 这表明近似数500比近似数100更准确。显然, 相对误差是无量纲

单位的。

2.3 有效数字

在实践中，人们要求近似数本身能反映它的误差大小，用有效数字表示近似数使得这一要求得以实现。

若近似数 x 的绝对误差限不超过某位的半个单位，且该位到 x 的第一位非零数字共有 n 位，则说近似数 x 有 n 位有效数字，或说 x 精确到该位。

例如，将数 12.03456 写成具有 3 位、4 位和 5 位有效数字的近似数，只需按四舍五入规则分别舍入成 12.0、12.03 和 12.035 即可。因为按四舍五入规则截取的近似数，其误差不超过末位的半个单位，因而各位数字都是有效数字。容易证明，同一数的近似数，有效数字位数越多，它的绝对误差和相对误差就越小。

应当指出，有效数字是对近似数而言。如 0.1 和 0.10 表示不同的近似数，原因是有效数字位数不同。另外， $1/2$ 的准确值 0.5 应视为具有无穷多位有效数字的近似数。在此约定，本书算例中出现的数，未作特别声明时，它的各位数字均为有效数字。

§ 3 近似数的运算

3.1 近似数的运算规则

在数值计算中，经常有一些位数不等的近似数在一起运算，若能遵循一定的规则进行，可使计算结果达到尽可能高的精度并避免一些无谓的运算。这里提出几项运算规则供参考。

(1) 近似数相加减，先将小数部分位数较多的近似数四舍五入，使之比小数部分位数最少的近似数多一位小数，然后再运算。计算结果保留的小数位数与原近似数中最少的小数位数相同。

例如，计算近似数 12.34， 0.0052^+ 与 6.783 之和。先舍入再计算，得

$$12.34 \pm 0.005 + 6.785 = 19.128$$

其和取为19.13。

(2) 近似数相乘除，先将有效数字位数较多的近似数四舍五入，使之比有效数字位数最少的近似数多一位数字，然后再运算。计算结果保留的有效数字位数与原近似数中最少的有效数字位数相同。

例如，计算近似数0.0123、34.56与7.0996之积。应舍入再计算，得

$$0.0123 \times 34.56 \times 7.099 \approx 3.014$$

其积取为3.01。

(3) 近似数乘方、开方或取对数，其结果保留的有效数字位数与原近似数的有效数字位数相同。

例如，近似数12.34之值取为158.3， $\sqrt{12.34}$ 之值取为3.513， $\lg 12.34$ 之值取为1.091。

(4) 近似数作混合运算，中间结果保留的位数一般要比按照上述取位规则多一位。

例如，计算 $3.28 \times 2.15 + 4.8409 \times 2.7$ 。作

$$3.28 \times 2.15 + 4.8409 \times 2.7$$

$$\approx 3.28 \times 2.15 + 1.84 \times 2.7$$

$$\approx 7.052 + 4.972 \approx 12.024 \approx 12.0$$

3.2 近似数对算法的要求

一个工程问题或科学问题，往往要有多次次的近似数运算，每一次运算都可能产生误差。为了抑制误差的累积，保证结果的精度，设计数值稳定性好的算法是非常重要的。关于算法设计，提出如下注意事项：

(1) 算法中尽量避免两相近数相减。

相近数相减会严重损失有效数字，使其误差急剧增加，精度显著降低。

例如，计算相近数 $\sqrt{8765}$ 与 $\sqrt{8764}$ 之差。以它们5位有效数字的近似数相减，得

$$\sqrt{8765} - \sqrt{8764} \approx 93.622 - 93.616 = 0.006$$

可见两个具有5位有效数字的近似数，相减的结果至多具有1位有效数字（事实上，近似数0.006没有1位有效数字，因为 $\sqrt{8765} - \sqrt{8764} = 0.00631\dots$ ）。

避免两个相近数相减的常用方法是变换算式，例如，

$$\sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}} \quad (\text{当 } x \text{ 很大时})$$

$$1 - \cos x = 2 \sin^2 \frac{x}{2} \quad (\text{当 } |x| \text{ 很小时})$$

$$\lg x - \lg y = \lg \frac{x}{y} \quad (\text{当 } x, y \text{ 是相近的正数时})$$

一般地，两个相近的函数值 $f(x_1)$ 与 $f(x_2)$ 相减，可用Taylor（泰勒）展开式来计算，即

$$f(x_1) - f(x_2) = f'(x_2)(x_1 - x_2) + \frac{f''(x_2)}{2!}(x_1 - x_2)^2 + \dots$$

如果难以变换相减的算式，就要增加相减数的有效数字位数。

（2）算法中尽量避免绝对值小的数作分母。

例如， $x^* = 1$ ， $y^* = 0.001$ ，有 $x^*/y^* = 1000$ 。若取 y^* 的近似数 $y = 0.0011$ ，则 $x^*/y \approx 909.09$ 。虽然分母的绝对误差很小，可是商的绝对误差却很大，原因在于小数作分母放大了近似数的误差。

（3）算法中尽量避免数量级相差很大的数直接进行加减运算。

由于计算机字长有限，在进行对除运算时可能将数量级小的数视为机器零，造成结果失真。

例如，求 A ， B ， C —数之和。其中

$$A = 10^{14}, B = 300, C = -A$$

若依 $(A - B) + C$ 的次序计算, 机器计算结果可能是零; 若依 $(A + C) + B$ 的次序计算, 机器计算结果接近于 300, 成为正确的答案。因此, 设计算法时, 合理安排运算次序是个不容忽视的问题。

(4) 算法中尽量避免使用数值不稳定的计算公式。

所谓数值不稳定的公式, 是指计算过程中舍入误差不断增长的公式。否则, 则谓数值稳定的公式。例如, 计算积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx$$

在 $n = 0, 1, 2, \dots, 20$ 时的近似值。

$$\text{由 } I_n - 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^{n-1}(x+5)}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n}$$

$$\text{和 } I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln 6 - \ln 5 \approx 0.182322$$

可得递推公式

$$\begin{cases} I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1} & n=1, 2, \dots, 20 \\ I_0 \approx 0.182322 \end{cases}$$

利用 [1] 式计算各积分时, 每递推一次误差增大 5 倍, 递推 n 次的误差达到 I_0 误差的 5^n 倍。随着 n 的增大, 结果误差是不可控制的, 这是数值不稳定的计算公式。

如改用它的逆递推公式

$$\begin{cases} I_{n-1} = \frac{1}{5n} - \frac{1}{5} I_n & n=20, 19, \dots, 1 \\ I_{20} \approx 0.008730 \end{cases}$$

每递推一次误差缩小 5 倍, 随着递推次数的增加, 结果愈加精确, 这是数值稳定的计算公式。式中 I_{20} 可如此定位:

由 $I_n > I_{n+1} > 0$, 得

$$0 I_n > I_{n+1} + 5 I_n > 5 I_n$$

即

$$6I_n > \frac{1}{n-1} > 5I_n.$$

故

$$\frac{1}{5(n+1)} > I_n > \frac{1}{6(n+1)}$$

取 $n=20$, 有

$$I_{21} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{1}{6 \times 21} + \frac{1}{5 \times 21} \right) \approx 0.008730.$$

§4 应用举例

问题 1 已知正方形边长约为 100cm , 欲使计算得到的面积误差不超过 10cm^2 , 那么测量正方形边长时允许有多大误差?

解 设边长 $x^* \approx 100(\text{cm})$, 面积 $y^* = x^{*2}$, 由题宽得

$$|y^* - y| = |x^{*2} - x^2| = |(x^* - x)(x^* + x)| \leq 10$$

于是

$$|x^* - x| \leq \frac{10}{x^* + x} \approx \frac{10}{100 + 100} = 0.05(\text{cm})$$

因此, 测量正方形边长时允许误差是 0.05cm .

问题 2 作自由落体运动的某物体下落时间 $t=2.00\text{s}$, 取 $g=9.81\text{m/s}^2$, 试求由公式 $h=\frac{1}{2}gt^2$ 计算位移 h 的误差.

解 利用 Taylor 展开式估计误差. 设

$$h=f(g, t)=\frac{1}{2}gt^2$$

$$\text{由 } |h^* - h| = |f(g^*, t^*) - f(g, t)|$$

$$\approx f'_g(g, t) \cdot (g^* - g) + f'_t(g, t) \cdot (t^* - t)$$

$$\left| \frac{1}{2} t^2 (g^* - g) + g t (t^* - t) \right|$$

$$\approx \left| \frac{1}{2} \times 2.00^2 \times 0.005 + 9.81 \times 2.00 \times 0.005 \right|$$

$$\approx 0.11(\text{m})$$

因此, 位移 h 的误差约为 0.11m .

第一章 代数插值法

在科技问题中出现的函数，有许多是以数表形式提供的。例如，某合金的抗拉强度 y 与合金中含碳量 x 之间的关系有如下试验数据（表 1—1）：

表 1—1

$x(\%)$	0.10	0.12	0.14	0.16	0.18	0.20
抗拉强度	420	450	468	490	510	550

这是变量 x 与 y 的函数表，但不知道具体的函数关系式 $y = f(x)$ 。为了刻划这种数表函数所反映的变量关系或者确定未列入表中的某函数值（如 x 为 0.15 时的 y 值），就要寻求它的近似表达式。另外，对于表达式比较复杂的函数，为了便于分析它的性质或者进行运算，也常常要求它的近似表达式。这类问题可以通过插值法或数据拟合法（第二章将讨论）解决。

所谓插值法，就是构造完全适合给定函数表的简单易算的近似函数的方法。本章只限于讨论最常用的代数插值法，即以代数多项式作为近似函数的方法，这不仅因为多项式计算简单，而且它具有很好的分析性质。

§ 1 代数插值的基本理论

1.1 代数插值问题

给定函数（表 1—2）若有代数多项式 $P(x)$ ，满足

$$P(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \dots, n \quad (1-1)$$

则称 $P(\tau)$ 为函数 $f(x)$ 的插值多项式, x_i 为插值节点, 两节点所界定的区间 $(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}, \frac{x_i+x_{i+1}}{2})$ 为插值区间, 式 (1-1) 为插值条件。

表 1-2

x	x_0	x_1	...	x_n
$y = f(x)$	y_0	y_1	...	y_n

代数插值的几何意义, 就是通过函数表 1-2 给出的 $n+1$ 个点 $(x_i, y_i) (i=0, 1, \dots, n)$, 作一条代数曲线 $y=P(\tau)$, 以此代替曲线 $y=f(x)$, 如图 1-1 所示。

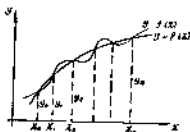


图 1-1

现在的问题是: 适合函数表 1-2 的插值多项式是否存在? 如果存在, 它的次数是多少? 是否唯一? 如何构造它以及它与给定函数的误差有多大? 下面逐一回答。

1.2 插值多项式存在的唯一性

设 n 次多项式

$$P_n(\tau) = a_0 + a_1\tau + \dots + a_n\tau^n$$

满足 $n+1$ 个插值条件 (1-1), 这等价于它的 $n+1$ 个系数 $a_0, a_1, \dots, a_n$ 适合下列线性方程组

$$\bullet \quad (1)$$

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + \dots + a_n x_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + \dots + a_n x_1^n = y_1 \\ \dots \\ a_0 + a_1 x_{n-1} + \dots + a_n x_{n-1}^n = y_{n-1} \end{cases}$$

该方程组的系数行列式是Vandermonde (范德蒙) 行列式

$$\begin{aligned} V(x_0, x_1, \dots, x_n) &= \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{vmatrix} \\ &= \prod_{0 \leq i < j \leq n} (x_j - x_i) \end{aligned}$$

由于 x_i 互异, 系数行列式不为零, 故方程组有唯一解 $(a_0^*, a_1^*, \dots, a_n^*)$, 这证明了满足 $n+1$ 个插值条件的多项式存在, 且次数不超过 n 的插值多项式是唯一的。

1.3 插值多项式的余项

用插值多项式 $P_n(x)$ 近似函数 $f(x)$, 在节点处与 $f(x)$ 的值相等, 但在非节点处两者值一般是不等的, 且可能相差很大。就是说, 用 $P_n(x)$ 近似 $f(x)$ 要产生截断误差, 有必要估计它的大小。称截断误差

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x)$$

为插值多项式 $P_n(x)$ 的余项。

虽然次数不超过 n 的插值多项式 $P_n(x)$ 是唯一的, 但适合函数表1~2的函数 $f(x)$ 却有极大的任意性。所以要对余项作出估计, 需要有更多关于 $f(x)$ 的信息。

定理 设 $f^{(n+1)}(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续, $f^{(n+1)}(x)$ 在 (a, b) 内存在, 且 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 是 $[a, b]$ 上互异的节点, $P_n(x)$ 是满足插值条件(1-1)的 n 次多项式, 则对任何 $x \in [a, b]$, 插值余项