

SOUTHEAST
UNIVERSITY PRESS

东 南 大 学 出 版 社

数值分析

NUMERICAL ANALYSIS

袁慰平

张令敏

黄新芹

闻震初

Yuan Weiping

Huang Xingqin

Zhang Lingmin

Wen Zhenchu

数 值 分 析

袁慰平 张令敏 编
黄新芹 闻震初

东南大学出版社

内 容 提 要

本书着重介绍适合于电子计算机上采用的数值计算方法及其理论。其内容有：误差分析，非线性方程求根，线性方程组数值解法，函数插值与逼近，矩阵特征值与特征向量计算，数值微积分，常微分方程数值解法，偏微分方程数值解法等。内容覆盖了《国家教委工科研究生数学课程教学指导小组》所制订的工科硕士生数值分析课程教学基本要求，同时还增加了一些工科专业所需要的内容，如机器数系，有理函数插值，FFT变换，振荡函数积分，广义特征值计算等等，书中对各种计算方法的构造思想都作了较详细的阐述，对稳定性、收敛性、误差估计及算法的优缺点等也作了适当的讨论。本书还挑选了部分东南大学工科研究生结合各自专业自选课题的计算实习，以此作为本书各章的应用实例。

本书可作为工科研究生的教材，也可供从事数值计算的科技工作者阅读参考。

责任编辑 徐步政

数 值 分 析

袁慰平 张令敏 编
黄新芹 闻震初

东南大学出版社出版

地址：南京四牌楼 2 号 邮码：210018

江苏省新华书店发行 江苏省地质测绘院印刷厂印刷

开本 850×1168 毫米 1/32 印张 17.375 字数 430 千

1992 年 10 月第 1 版 1998 年 7 月第 2 次印刷

印数：3001—6000 册

ISBN 7-81023-657-1

出版说明

研究生教育是培养高层次专门人才的一条重要途径。通过研究生阶段的教学，应使研究生在本门学科上掌握坚实的基础理论和系统的专门知识，并具有从事科学研究工作或独立担负专门技术工作的能力。编辑出版能够体现学校研究生教育特色、有较高学术水平的研究生教材，是研究生教育的重要基础工作之一。

一本好的研究生教材，应当富有教育性、系统性、启迪性、学术性和新颖性。这即是说，研究生教材必须符合教学的基本规律，注意理论联系实际；必须系统阐明本门学科所必要的基础理论和专门知识，注意突出基本原理和基本内容；必须着眼于研究生能力的培养，注意启发他们的创造性思维；必须体现较高的学术水平，注意有足够的理论深度，必须充分反映国内外的最新研究动态，注意当代科学技术发展的前沿。所有这些，既是对研究生教材的要求，也是我们组织出版研究生教材所要遵循的原则。当然，使研究生教材能对本学科领域的科研和工程技术人员有较高的参考价值，也是我们追求的目标。

现在出版的教材虽然是作者多年研究生教学的实践与研究的结晶，从选题、审定到编辑出版，我们都经过了细致认真的工作，但要使一本研究生教材能满足大家之所求，决非易事。限于我们的水平和经验，难免有失当和错误之处。尚祈读者不吝指正。

东南大学研究生院
东南大学出版社

前　　言

随着计算机的广泛使用与科学技术的迅速发展，使用计算机进行科学计算已成为科学研究、工程设计中越来越不可缺少的一个环节，它有时甚至代替或超过了实验所起的作用。因此，科学计算应该成为高级科技人员的一个基本功。为此，作为科学计算的核心——“数值分析”已被较多的工科专业列为硕士研究生的一门学位课程。

我校自1981年开设此课程以来，进行了专业需要的调查以及教学内容和教学方法的改革与研究，并在教学实践的基础上形成了本书的初稿。初稿在本校使用过多遍，得到研究生及其指导教师们的良好反映与支持。在这次出版时，再一次总结教学实践中的经验，作了修改和加工。

本书的读者对象是工科研究生及从事数值计算的科技工作者，着重介绍了适合于电子计算机上采用的计算方法的构造及使用，对误差估计、方法的收敛性、稳定性、适用范围及优缺点等作了适当分析，对一些解法作了比较详细的推导和列举了较多的数值计算实例。其内容覆盖了〈国家教委工科研究生数学课程教学指导小组〉所制订的工科硕士研究生数值分析课程教学基本要求，同时还增加了一些工科专业所需要的内容，如误差分析中的机器数系；非线性方程求根的Sturm定理；插值与逼近中的重节点插值、有理函数插值及最佳一致逼近；数值积分中的振荡函数的积分、重积分的近似计算；常微分方程中的自适应算法及稳定性较好的单步隐格式；特征值计算中的广义特征值计算等等。增加的这些内容，若教学时数较少则可以删去，不会影响教学的连

续性；但若增加了这些内容，则在内容的深广度上更能适应工科专业发展的需要。因此，本书兼顾了多学时与少学时的要求。

本书每章末（除第一、七两章外）都有应用实例一节，取材于历届学生结合各自专业的自选课题。我们认为研究生学习“数值分析”课，一方面是提高数学素质，另一方面是为应用所学知识进行科学的研究。于是我们要求学生在学完本课程后，必须结合所学内容及各自的专业自选研究课题做一个大型计算实习。这次，在讲义修改出版过程中，我们将历届学生做的大型计算实习，挑选了部分作为实例进入教材，有的实例尽管被我们作了简化和加工，但仍然可以从这些实例中初步看到本课程在各专业应用中的深广度。

南京大学苏煜城教授仔细地审阅了全书，并提出了宝贵的意见，在苏先生的指点下，我们作了修改。在本书的形成、使用、修改和出版过程中，得到东南大学研究生院和东南大学出版社及有关工科研究生指导教师和本教研室同志的关心、支持和帮助，在此一并表示衷心感谢。

本书编写分工如下、第一、三、五章为袁慰平，第二、六章为黄新芹，第四章为闻震初，第七、八章为张令敏。由于作者水平有限，缺点与错误在所难免，恳请读者批评指正。

编 者
于东南大学

目 录

第一章 绪论	1
§1 数值分析的对象与特点	1
§2 误差的基本概念	1
2-1 误差的来源	1
2-2 误差限	3
§3 有效数与机器数系	4
3-1 有效数	4
3-2 机器数系	6
3-3 机器数系的运算及误差估计	8
§4 数值稳定问题	12
4-1 数据误差的影响与条件数	12
4-2 算法的数值稳定性	18
习题一	23
第二章 非线性方程的解法	27
§1 概述	27
1-1 根的搜索	27
1-2 二分法	28
1-3 迭代法概述	30
§2 简单迭代法	32
2-1 方法介绍	32
2-2 迭代法的收敛性	33
2-3 高阶迭代	38
2-4 埃特金加速法	39
§3 牛顿切线法	41
3-1 求单根的牛顿法	41

^~2	4. 顿法的变形.....	45
3-3	重根的处理.....	47
§4	多项式方程的求根.....	51
4-1	实系数多项式零点的分布.....	52
4-2	劈因子法.....	56
§5	应用实例（薄壳结构的静力计算）.....	61
5-1	问题的背景.....	61
5-2	薄壳的基本方程式.....	62
5-3	计算方法.....	64
5-4	计算过程和结果.....	65
习题二	66
第三章 线性代数方程组数值解法	69
§1	引言.....	69
§2	消去法.....	71
2-1	三角方程组的解法.....	71
2-2	Gauss 消去法	72
2-3	选主元的Gauss 消去法.....	83
§3	矩阵的直接分解及其在解方程组中的应用.....	88
3-1	矩阵的直接分解.....	88
3-2	Cholesky 分解法.....	97
3-3	追赶法.....	102
§4	方程组的性态与误差分析	105
4-1	向量范数和矩阵范数.....	106
4-2	方程组的性态、条件数.....	114
4-3	误差分析.....	119
§5	迭代法	121
5-1	Jacobi 迭代法.....	125
5-2	Gauss-Seidel 迭代法.....	128
5-3	迭代法的收敛性.....	130
5-4	逐次超松弛迭代法.....	143

§6 应用实例（纯电阻型立体电路分析）	147
6-1 问题的背景	147
6-2 数学模型	148
6-3 计算方法与结果分析	149
习题三	152
第四章 插值与逼近	162
§1 多项式插值	164
1-1 Lagrange 插值	165
1-2 Newton 差商型插值	167
§2 等距节点多项式插值	174
§3 重节点多项式插值	177
3-1 Newton 型 Hermite 插值	178
3-2 Lagrange 型 Hermite 插值	183
§4 分段插值与样条插值	188
4-1 分段低次插值	188
4-2 样条插值	190
§5 有理函数插值	199
§6 最佳一致逼近	207
§7 最佳平方逼近	217
§8 正交多项式	226
8-1 正交多项式的定义与性质	227
8-2 近似最佳一致逼近	236
§9 周期函数的逼近与快速 Fourier 变换	242
9-1 周期函数的最佳平方逼近	242
9-2 复值周期函数的最佳平方逼近	245
9-3 快速 Fourier 变换(FFT)	250
§10 应用实例（用样条函数设计公路平面曲线）	256
10-1 问题的背景	256
10-2 数学模型	256
10-3 计算方法与结果分析	257

习题四	262
第五章 数值积分与数值微分	267
§1 数值积分的基本概念	267
1-1 构造数值求积公式的基本思想.....	268
1-2 插值型求积公式.....	268
1-3 插值型求积公式的截断误差.....	271
1-4 代数精度.....	272
§2 等距节点求积公式	275
2-1 Newton-Cotes 公式	275
2-2 复化求积法及其收敛性.....	282
2-3 步长的自适应.....	287
§3 Romberg求积法	289
3-1 Romberg 求积公式.....	290
3-2 Romberg 求积法的一般公式.....	294
§4 Gauss 型求积公式	296
4-1 Gauss点与正交多项式的关系.....	297
4-2 Gauss-Legendre公式.....	300
4-3 Gauss公式的余项.....	303
4-4 Gauss公式的稳定性与收敛性.....	304
4-5 其它的Gauss型求积公式.....	307
§5 振荡函数的积分	309
§6 重积分的近似计算	314
§7 数值微分	321
7-1 数值微分问题的提出.....	321
7-2 插值型求导公式.....	322
7-3 样条求导.....	326
§8 应用实例（混频器中变频损耗的数值计算）	328
8-1 问题的背景.....	328
8-2 数学模型.....	330
8-3 计算方法与结果分析.....	331
习题五.....	333

第六章 常微分方程数值解法	337
§1 微分方程数值解法概述	337
1-1 问题及基本假定	337
1-2 离散化方法	338
1-3 构造求解公式的途径	339
§2 Euler 方法	346
2-1 公式的推导	346
2-2 公式的使用	349
§3 Runge-Kutta方法	353
3-1 公式的推导	353
3-2 高阶 Runge-Kutta 方法	355
3-3 公式的使用	359
3-4 隐式 R-K 方法	366
§4 单步法的收敛性与稳定性	367
4-1 单步法的收敛性	368
4-2 单步法的稳定性	372
§5 线性多步方法	375
5-1 基于数值积分的构造方法	375
5-2 Adams 公式的使用	382
5-3 基于 Taylor 展开的构造方法	390
5-4 Milne、Simpson 和 Hamming 公式的使用	393
§6 微分方程组与高阶微分方程	394
6-1 一阶微分方程组	394
6-2 刚性问题	397
6-3 高阶微分方程	399
§7 边值问题的数值解法	402
7-1 试射法	402
7-2 差分法	405
§8 应用实例（磁流体发电通道的数值计算）	407
8-1 问题的背景	407

8-2 数学模型	408
8-3 计算方法与结果分析	410
习题六	412
第七章 矩阵特征值的计算	416
§1 引言	416
§2 幂法及反幂法	419
2-1 求主特征值的乘幂法	419
2-2 幂法的加速技巧	427
2-3 反幂法	431
§3 实对称矩阵的Jacobi法	433
3-1 Jacobi法	435
3-2 Jacobi法的变形	442
§4 Givens 法和 Householder 法	443
4-1 把实对称矩阵约化为三对角阵	444
4-2 Sturm序列与二分法	449
§5 QR 算法	452
5-1 基本算法	452
5-2 具有位移的QR 算法	454
§6 矩阵广义特征值的计算	456
6-1 直接约化法	456
6-2 行列式查找法	458
习题七	459
第八章 偏微分方程的数值解法	463
§1 抛物型方程的差分解法	463
1-1 古典显格式与古典隐格式	465
1-2 Richardson 格式	468
1-3 加权六点格式	470
§2 差分格式的稳定性与收敛性	476
2-1 差分格式的相容性与收敛性	476
2-2 差分格式的稳定性概念	477

2-5 判别稳定性的Von-Neuman方法	480
§3 双曲型方程的差分解法	486
3-1 双曲型方程解的特性.....	486
3-2 一阶线性双曲型方程的差分格式.....	488
3-3 二阶双曲型方程的差分格式.....	495
§4 变分原理	499
4-1 初等变分思想.....	499
4-2 常微分方程边值问题的变分原理.....	503
4-3 椭圆型方程边值问题的变分原理.....	507
§5 常微分方程边值问题的有限元法	511
5-1 区间剖分及基函数的选取.....	511
5-2 有限元方程的形成.....	513
5-3 有限元解法的步骤及例子.....	518
§6 Poisson 方程的有限元法	520
6-1 三角形剖分及基函数的构造.....	520
6-2 有限元方程的形成.....	524
6-3 有限元解法的步骤与例子.....	527
§7 应用实例（水污染方程的有限差分解法）	531
7-1 问题的背景.....	531
7-2 数学模型.....	531
7-3 计算方法与结果分析.....	532
习题八	533
参考文献	539

第一章 絮 论

§1 数值分析的对象与特点

数值分析是寻求数学问题近似解的方法、过程及其理论的一个数学分支。当今世界计算机已被广泛使用，因此数值分析所研究的应该是适合于计算机上使用的计算方法及其误差分析和收敛性、稳定性问题。

使用计算机通过计算方法或数值模拟的手段去解决科学或工程中的关键问题，我们简称为科学计算。它已成为科学研究、工程设计等越来越不可缺少的一个环节，有时甚至代替或超过了实验所起的作用。

最近半个世纪科学的研究的实践使人们越来越清楚地认识到当代科学研究方法论应该由实验、科学计算及理论三大环节所组成。也就是说科学计算已成为一种新的科学研究方法。因此，作为科学计算的主体——数值分析也就越来越被人们所重视。

§2 误差的基本概念

2-1 误差的来源

一个物理量的真实值和我们算出的值往往不相等，它们之差称为误差，引起误差的原因是多方面的。

1. **模型误差** 从实际问题转化为数学问题，就是所谓的建立数学模型时，对被描述的实际问题进行了抽象和简化，因此数学模型只是客观现象的一种近似、一种粗糙的描述。这种数学模型与实际问题之间出现的误差称为模型误差。

2. **观测误差** 在给出的数学模型中往往涉及一些根据观测

得到的物理量，如电压、电流、温度、长度等，而观测难免不带误差，这种误差称为观测误差。

3. 截断误差 在计算中常常遇到只有通过无限过程才能得到的结果，但实际计算时，只能采用有限过程，如无穷级数求和，只能取前面有限项之和来近似代替，于是产生了有限过程代替无限过程的误差，称为截断误差，这是计算方法本身所出现的误差，所以也称方法误差。

4. 舍入误差 在计算中遇到的数据可能位数很多，也可能是无穷小数，如 $\sqrt{2}=1.41421356\cdots$ ， $\frac{1}{3}=0.3333\cdots$ ，但计算时只能对有限位进行运算，一般采用四舍五入的办法。电子计算机计算时也有采用截尾的办法，如 $\sqrt{2}$ 在八位字长的截断机里取成1.4142135，这样产生的误差称为舍入误差，也称计算误差。

少量的舍入误差是微不足道的，但在电子计算机上作了成千上万次运算后，舍入误差的积累有时可能是十分惊人的。

例1.1 设 $y_0=2$ ，按递推公式 $y_n=y_{n-1}+\frac{\sqrt{2}}{10}$ ，若取 $\sqrt{2}=1.41$ ，求计算到 y_{100} 将有多大误差？

解 y_{100} 误差是由 $\sqrt{2}$ 取近似值1.41所产生的舍入误差积累而成。

$$\text{精确值 } y_1 = y_0 + \frac{\sqrt{2}}{10}.$$

$$\text{近似值 } \tilde{y}_1 = y_0 + \frac{1.41}{10}, \text{ 则}$$

$$y_2 = y_1 + \frac{\sqrt{2}}{10}, \quad \tilde{y}_2 = \tilde{y}_1 + \frac{1.41}{10}$$

$$\text{误差 } e_1 = y_1 - \tilde{y}_1 = \frac{1}{10}(\sqrt{2} - 1.41),$$

并设 $\sqrt{2}$ 的舍入误差为 $\delta = \sqrt{2} - 1.41$ ，则 $e_1 = \frac{1}{10}\delta$

$$e_2 = y_2 - \tilde{y}_2 = y_1 - \tilde{y}_1 + \frac{1}{10}(\sqrt{2} - 1.41) = \frac{2}{10}\delta$$

因此 $e_{100} = y_{100} - \tilde{y}_{100} = \frac{100}{10} \delta = 10\delta$

此例说明按所给递推公式作 100 次运算后，舍入误差扩大了 10 倍，因此这种误差积累的速度是很快的。

由上述误差来源的分析可以得到如下结论，误差是不可避免的，要求绝对准确、绝对严格实际上是办不到的。对于实际问题，在建立数学模型时，本身已存在着模型误差和观测误差，因此既然描述问题的方法是近似的，那么要求解的绝对准确也就没有意义了。于是我们在计算方法里所讨论的解都只需是近似解，那种认为近似解不可靠、不准确的看法是错误的，应该认为求近似解是正常的，需要研究的问题是尽量设法减少误差，提高精度。从以上四种误差来源的分析，可以知道前两种误差是客观存在的，后两种是由计算方法所引起的，从主观上讲有的误差可以由改进计算方法而得到一些改善，本课程是研究数学问题的数值解法，因此只涉及后两种误差。

2-2 误差限

设 x^* 为准确值， x 是 x^* 的一个近似值，称 $e = x^* - x$ 为近似值 x 的绝对误差，简称误差。

注意这样定义的误差 e 可正可负，所以绝对误差不是误差绝对值。通常我们不能算出准确值 x^* ，也不可能算出误差的准确值，因此这个值虽然客观存在，但实际计算中是得不到的，得到的只能是误差的某个范围，即根据测量工具或计算情况估计出误差的绝对值不超过某正数 ϵ ，即

$$|e| = |x^* - x| \leq \epsilon$$

ϵ 称为近似值 x 的绝对误差限，简称误差限，有时也可以表示成 $x^* = x \pm \epsilon$ 。

例如用毫米刻度的直尺测量一长度为 x^* 的物体，测得其长度的近似值为 $x = 2$ 毫米，由于直尺以毫米为刻度，所以其误差不超过 0.5 毫米，即

$$|x^* - 2| \leq 0.5$$

从这个不等式我们不能得出准确值 x^* 之值，但却知道 x^* 的范围为

$$1.5 \leq x^* \leq 2.5$$

对于给定的正数 ϵ ，若近似值 x 满足

$$|x^* - x| \leq \epsilon$$

则在 ϵ 范围内认为 x 就是 x^* ，也即近似值 x 和真值 x^* 关于允许误差 ϵ 可以看成是“重合”的，或者说值 x 关于允许误差 ϵ 是准确的。

对于不同的物理量绝对误差限的大小不能完全表示出近似值的好坏，为了较好地反映近似值的精确程度，必须考虑绝对误差与真值之比，即相对误差，我们称 $\frac{x^* - x}{x^*} = \frac{\epsilon}{x^*}$ 为近似值 x 的相对误差，记作 e_r 。

在实际计算中，真值 x^* 不能得到，因此当 e_r 很小时，可取 $e_r = \frac{\epsilon}{x}$ 作为 x 的相对误差。

计算相对误差与计算绝对误差具有相同的困难，因此通常也只能考虑相对误差限，即如果有正数 e_r ，使

$$|e_r| = \left| \frac{\epsilon}{x} \right| \leq e_r$$

则称 e_r 为 x 的相对误差限。

绝对误差只能用来比较对同一个量所测得的不同近似值的准确程度，而相对误差却能用来刻画或比较任何近似值准确程度。

§3 有效数与机器数系

3-1 有效数

工程技术中对于测量得到的数据经常表示成 $x \pm \epsilon$ ，它虽然表示了近似值 x 的准确程度，但用这个量进行数值计算就太麻烦了，