

现代应用数学手册

《现代应用数学手册》编委会

计算与数值分析卷

清华大学出版社

029-62

1

:4

现代应用数学手册

《现代应用数学手册》编委会

计算与数值分析卷

清华大学出版社

北京

内 容 简 介

本书是进行科学计算的常备工具书,内容新颖,查阅方便,实用性强。主要介绍生产、科研、管理、教学等实践中在计算机上使用的各种计算方法和技巧。全书分为14章,依次为数值计算概论、插值法、函数逼近与曲线拟合、数值积分与数值微分、方程求根、线性方程组的直接解法和迭代解法、矩阵特征值问题、非线性方程组数值解与最优化方法、常微分方程初值问题和边值问题的数值解法、偏微分方程的数值解法、多重网格法和积分方程数值解法。每种方法均配有例题,便于读者理解、掌握和使用。书末还附有中文-外文索引、外文-中文索引以及外国人名表。

本书可供广大科研人员、技术人员、管理干部、计算工作者及高等院校师生使用。

版权所有,翻印必究。举报电话: 010-62782989 13501256678 13801310933

图书在版编目(CIP)数据

现代应用数学手册·计算与数值分析卷/《现代应用数学手册》编委会编。
一北京:清华大学出版社,2005.1

ISBN 7-302-09831-X

I. 现… II. 现… III. ①应用数学—手册 ②计算方法—手册 ③数值计算—手册 IV. O29-62

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 111821 号

出 版 者: 清华大学出版社 **地 址:** 北京清华大学学研大厦

http://www.tup.com.cn **邮 编:** 100084

社 总 机: 010-62770175 **客户服 务:** 010-62776969

组稿编辑: 刘 颖

文稿编辑: 王海燕

印 刷 者: 清华大学印刷厂

装 订 者: 北京国马印刷厂

发 行 者: 新华书店总店北京发行所

开 本: 140×203 **印 张:** 27.125 **字 数:** 680 千字

版 次: 2005 年 1 月第 1 版 2005 年 10 月第 2 次印刷

书 号: ISBN 7-302-09831-X/O · 420

印 数: 3001 ~ 5000

定 价: 48.00 元

《现代应用数学手册》

编辑委员会

主编：马振华

编委：（依姓氏笔画序）

马振华 刘坤林

陆璇 陈景良

郑乐宁 顾丽珍

葛余博

计算与数值分析卷

责任编辑 顾丽珍

| 章次 | 编 者 | 校 者 |
|-------|---------|---------|
| 1~2 | 陈景良 李庆扬 | 陆金甫 |
| 3 | 李庆扬 | 陆金甫 |
| 4 | 陆金甫 | 李庆扬 |
| 5 | 李庆扬 | 陆金甫 |
| 6 | 陈景良 顾丽珍 | 李庆扬 |
| 7 | 顾丽珍 | 李庆扬 |
| 8 | 顾丽珍 | 陆金甫 |
| 9 | 李庆扬 | 关 治 |
| 10~11 | 关 治 | 顾丽珍 |
| 12 | 陆金甫 关 治 | 关 治 顾丽珍 |
| 13 | 顾丽珍 | 李庆扬 |
| 14 | 陆金甫 | 关 治 |

序

随着计算机科学技术的飞速发展，人类正进入信息时代。

信息时代是应用数学大发展的时代，人类长期积累起来的知识体系，正面临着第3次数学化。数学思想，数学方法与数学模型随着计算机的广泛应用，日益渗透到各种行业中去。

当代，除了古典的数学理论(初等数学，微积分学，微分方程，复变函数等)早已得到广泛的应用外，一些比较抽象的现代数学理论(集合论、数理逻辑、范畴论、抽象代数、泛代数、代数几何、拓扑学、泛函分析等)以及一些新兴的数学理论(随机过程、时间序列、运筹学、最优化理论、有限元方法、模糊数学、混沌与分形等)也逐渐地成为社会生产，科学实验，工程技术及经济管理中不可缺少的工具，应用数学的适用范围正在迅速地扩大。

为了满足日益增长的社会需求，清华大学应用数学系《现代应用数学手册》编委会，组织编写了这套多卷集的手册。

本书读者是理、工、医、农、经管等各个领域中的广大工程技术人员、科研人员，大、中专院校的教师、学生、研究生及其他使用数学工具的实际工作者。其中有些内容对于中学生也是适用的。

编者力求使本书成为一套高质量的工具书，它有下列特点：

(1) 内容“新颖” 本书力求做到内容现代化，除用现代观点介绍古典内容外，对已出现的新理论、新方法尽量优先选入。

(2) 突出“应用” 本书在选材上突出数学理论的应用，以通俗易懂的方式着重介绍在现代科学技术等实际领域中应用广泛的

数学理论和方法.

(3) 紧密“结合”计算机应用 为了更有效地应用数学方法解决各种实际问题,广大科技人员迫切要求数学方法与计算机应用相结合,提高工作效率.为此,本书在结合计算机应用方面,给予特别的重视.

(4) 版面设计“合理”,便于迅速查阅 为方便读者使用,本书采用了一套较为完善的索引体系.除正文中章、节的编号沿用国际通行的十进制编号外,对于重要的定义、定理、例题、公式、图、表等均有编号.读者可以从(1) 目录,(2) 中文—外文索引,(3) 外文—中文索引等三种途径,迅速找到所需资料.此外,本书对载入的外国科学家人名,尽量采用“名从主人”的原则.

(5) 数学符号力求“统一”与国际化 鉴于目前国内各种文献、书籍中使用的数学符号不够统一与国际化,增加了读者阅读时的困难.本书除按国家标准 GB 3102—93 外,兼用国际数学界权威著作《数学大百科辞典》(Encyclopedic Dictionary of Mathematics, EDM)中的符号为标准.对于不在上述文献中的其他新符号,则选用较为流行者.

本手册各卷内容独立完整,便于个人读者与团体读者按需选购.当前应用数学急剧发展,编委会在条件成熟的时候,还将增出新卷.

本书的编撰是与清华大学应用数学系领导,特别是萧树铁教授的热心支持,编辑委员会各位编委的通力协作,校内外的许多教师、科研工作者的大力支持分不开的,编者深致谢意.

在编辑出版过程中,还得到清华大学出版社的热情支持.

本书从编撰到出版,历尽艰辛.饮水思源,编者还要感谢本书的发起人,清华大学应用数学系陆璇教授,北京出版社李利军编辑

及已故的北京出版社社长王政人先生。

最后，编者还要对夫人王华敏表示谢忱，没有她的深刻理解、热情支持与持久的帮助，本书也难以问世。

主编 马振华

1997 年于清华园

数学符号表

| | |
|----------------------------|---|
| $\stackrel{\text{def}}{=}$ | 定义 |
| $:=$ | 定义且赋值/赋值 |
| $\operatorname{sgn} a$ | 符号函数 $\operatorname{sgn} a = \begin{cases} 1, & a \geq 0, \\ -1, & a < 0 \end{cases}$ |
| $\binom{a}{n}$ | 即 $\frac{a(a-1)\cdots(a-n+1)}{n!}$ (a 为实数) |
| $\binom{n}{k}/C_n^k$ | 二项式系数, 即 $\frac{n(n-1)\cdots(n-k+1)}{k!}$ |
| $\sum_{i=1}^n$ | 对 i 从 1 到 n 项求和 |
| $\prod_{i=1}^n$ | 对 i 从 1 到 n 项求积 |
| i | 虚数单位, $i = \sqrt{-1}$ |
| $\operatorname{Re} z$ | 复数 z 的实部 |
| $\operatorname{Im} z$ | 复数 z 的虚部 |
| $ z $ | 复数 z 的模 |
| $\arg z$ | 复数 z 的复角 |
| \bar{z} | 复数 z 的共轭 |
| (a, b) | 开区间 |
| $[a, b]$ | 闭区间 |
| $(a, b], [a, b)$ | 半开区间 |
| ∞ | 无穷大 |
| \rightarrow | 收敛于/映射 |

| | |
|--|---|
| \Leftrightarrow | 等价 |
| \Rightarrow | 推理 |
| $\lim a_n$ | 序列 $\{a_n\}$ 的极限 |
| $f(x)$ | 函数 f 在点 x 的值 |
| $f/f(\cdot)$ | 函数 |
| $f[\cdot]$ | 函数 f 的均差 |
| $\frac{df}{dx}/f'$ | 函数 f 对 x 的导数 |
| $\frac{d^n f}{dx^n}/f^{(n)}$ | 函数 f 对 x 的 n 阶导数 |
| $\frac{\partial f}{\partial x}/f_x$ | 函数 f 对 x 的偏导数 |
| $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}/f_{xy}$ | 函数 f 对 x, y 的混合偏导数 |
| $\frac{\partial^{n+m} f}{\partial x^m \partial y^n}/f_{x^m y^n}$ | 函数 f 先对 x 求 m 次偏导数, 再对 y 求 n 次偏导数 |
| $\tilde{f}(x)$ | $f(x)$ 的近似值 |
| $\frac{\partial \varphi}{\partial n}$ | φ 沿方向 n 的方向导数 |
| $\nabla \varphi / \text{grad } \varphi$ | φ 的梯度 |
| $\Delta \varphi / \nabla^2 \varphi$ | 拉普拉斯算子 |
| $\Delta_n \varphi_{ij}$ | 离散拉普拉斯算子 |
| $\mathbf{A} = (a_{ij})_n$ | n 阶矩阵其元素为 a_{ij} |
| $(\mathbf{A} \mathbf{b})$ | \mathbf{A} 的增广矩阵 |
| $\mathbf{I}_n / \mathbf{I}$ | n 阶单位矩阵 |
| $\mathbf{A}^H \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\mathbf{A}^T}$ | 矩阵 \mathbf{A} 的共轭转置矩阵 |
| \mathbf{A}^T | 矩阵 \mathbf{A} 的转置矩阵 |
| \mathbf{A}^{-1} | 矩阵 \mathbf{A} 的逆矩阵 |

| | |
|--------------------------------------|---|
| $\text{adj} \mathbf{A}/\mathbf{A}^*$ | 方阵 \mathbf{A} 的伴随矩阵 |
| $\{\mathbf{A}_k\}$ | 矩阵序列 $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \dots, \mathbf{A}_k, \dots$ |
| $\{\mathbf{x}_k\}$ | 向量序列 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k, \dots$ |
| $\text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$ | 对角线元素为 d_1, d_2, \dots, d_n 的对角阵 |
| $\det \mathbf{A}/ \mathbf{A} $ | 方阵 \mathbf{A} 的行列式 |
| D_k | 矩阵 \mathbf{A} 的顺序主子式 |
| $\sigma(\mathbf{A})$ | 矩阵 \mathbf{A} 的谱 |
| $\text{tr}(\mathbf{A})$ | 矩阵 \mathbf{A} 的迹 |
| $\rho(\mathbf{A})$ | 矩阵 \mathbf{A} 的谱半径 |
| \forall | 全称量词 |
| \exists | 存在量词 |
| \in | 属于 |
| \notin | 不属于 |
| \supset | 包含 |
| \subset | 包含于 |
| \cap | 交运算 |
| \cup | 并运算 |
| \setminus | 差运算 |
| \mathbb{C} | 复数集 |
| \mathbb{R} | 实数集 |
| \mathbb{N} | 自然数集(包括零在内) |
| \mathbb{N}^+ | 正自然数集 |
| \mathbb{Z} | 整数集 |
| \mathbb{Q} | 有理数集 |
| \mathbb{R}^n | n 维实空间 |
| $\mathbb{R}^{n \times m}$ | $n \times m$ 维实空间 |
| \mathbb{C}^n | n 维复空间 |
| $\mathbb{C}^{n \times m}$ | $n \times m$ 维复空间 |

| | |
|---|---|
| $\text{span}\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N\}$ | 由 $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N$ 生成的线性空间 |
| Ω | 解域 |
| $\partial\Omega$ | 解域边界 |
| Ω_k | 离散解域 |
| $\partial\Omega_k$ | 离散解域的边界 |
| $C(\Omega)$ | Ω 上全部连续函数的集合 |
| $C^n(\Omega)$ | Ω 上 n 阶连续可微函数的集合 |
| \sup | 上确界 |
| \inf | 下确界 |
| $\delta(x)$ | δ 函数 |
| Δf | f 的向前差分 |
| $\Delta^n f$ | f 的 n 阶向前差分 |
| ∇f | f 的向后差分 |
| $\nabla^n f$ | f 的 n 阶向后差分 |
| δf | f 的中心差分 |
| I | 不变算子: $If_k = f_k$ |
| E | 移位算子: $Ef_k = f_{k+1}$ |
| $\ \cdot\ $ | 向量或矩阵的范数 |
| $\text{cond}(A)$ | 矩阵 A 的条件数 |
| (\cdot, \cdot) | 函数内积或向量内积 |
| $a \leftrightarrow b$ | 单元 a 和单元 b 交换 |
| $r_i \leftrightarrow r_j$ | 矩阵的第 i 行与第 j 行交换 |
| $a[1:p]$ | p 个元素的一维数组 |
| $C[1:n, 1:m]$ | n 行 m 列矩形数组 |
| $A[* , i:j]$ | 矩阵 A 的第 i 列到第 j 列的所有元素 |
| $A[i:j, *]$ | 矩阵 A 的第 i 行到第 j 行的所有元素 |
| O | $f(x) = O(g(x))$ 表示当 $x \rightarrow a$ 时, $f(x)/g(x)$ 有界 |

| | |
|----------------|--|
| o | $f(x)=o(g(x))$ 表示当 $x \rightarrow a$ 时, $f(x)/g(x) \rightarrow 0$ |
| mod | 同余, $i=k(\text{mod } n)$ 即 k 除以 n 余 i |
| $\dim M$ | 空间 M 的维数 |
| H_n | n 阶多项式的集合 |
| $\{x P(x)\}$ | 使性质 $P(x)$ 成立的全体 x 组成的集合 |

目 录

| | |
|---------------------------|----|
| 数学符号表 | 7 |
| 1 数值计算概论 | 1 |
| 1.1 数值分析的对象与特点 | 1 |
| 1.1.1 研究对象 | 1 |
| 1.1.2 主要特点 | 2 |
| 1.1.3 数值问题与数值方法 | 2 |
| 1.2 误差与有效数字 | 4 |
| 1.2.1 误差的来源与分类 | 4 |
| 1.2.2 误差概念 | 5 |
| 1.2.3 有效数字 | 6 |
| 1.3 误差估计与误差分析 | 7 |
| 1.3.1 算术运算的误差界 | 7 |
| 1.3.2 函数求值的误差估计 | 8 |
| 1.3.3 误差分析方法 | 9 |
| 1.4 误差的定性分析与运算原则 | 11 |
| 1.4.1 算法的数值稳定性 | 11 |
| 1.4.2 病态问题与条件数 | 13 |
| 1.4.3 数值运算的简单原则 | 14 |
| 1.5 并行算法及其基本概念 | 17 |
| 1.5.1 并行算法及其分类 | 17 |
| 1.5.2 并行算法基本概念及设计原则 | 21 |
| 2 插值法 | 24 |
| 2.1 引言 | 24 |
| 2.1.1 插值的意义 | 24 |
| 2.1.2 插值问题的提法 | 24 |

| | |
|----------------------------|----|
| 2.1.3 插值多项式的存在惟一性 | 26 |
| 2.2 拉格朗日插值 | 26 |
| 2.2.1 基函数 | 26 |
| 2.2.2 拉格朗日插值多项式 | 28 |
| 2.2.3 余项 | 29 |
| 2.3 艾特肯法 | 30 |
| 2.3.1 问题的提出 | 30 |
| 2.3.2 艾特肯法的描述 | 31 |
| 2.3.3 计算工作量 | 32 |
| 2.4 均差与牛顿插值 | 34 |
| 2.4.1 均差 | 34 |
| 2.4.2 牛顿插值公式 | 36 |
| 2.4.3 计算工作量 | 37 |
| 2.5 差分与等距节点插值 | 38 |
| 2.5.1 差分 | 38 |
| 2.5.2 牛顿差分插值公式 | 41 |
| 2.5.3 高斯公式 | 42 |
| 2.5.4 斯特林公式 | 44 |
| 2.5.5 贝塞尔公式 | 44 |
| 2.5.6 等距节点插值公式的使用 | 45 |
| 2.6 埃尔米特插值 | 48 |
| 2.6.1 一般提法 | 48 |
| 2.6.2 插值多项式的建立与余项 | 49 |
| 2.6.3 重节点均差与均差形式的埃尔米特插值多项式 | 51 |
| 2.7 插值多项式的收敛性与稳定性 | 54 |
| 2.7.1 插值多项式的收敛性与病态性质 | 54 |
| 2.7.2 插值函数的稳定性 | 57 |
| 2.8 分段低次插值 | 59 |
| 2.8.1 分段线性插值 | 59 |
| 2.8.2 分段三次埃尔米特插值 | 61 |
| 2.9 样条插值 | 62 |

| | |
|----------------------------|-----------|
| 2.9.1 样条函数 | 62 |
| 2.9.2 B样条 | 63 |
| 2.9.3 三次样条插值问题的提法 | 65 |
| 2.9.4 均匀分划的三次样条插值函数 | 67 |
| 2.9.5 任意分划的三次样条插值函数 | 71 |
| 2.9.6 三次样条插值的收敛性 | 73 |
| 2.10 反插值 | 75 |
| 2.10.1 插值与反插值 | 75 |
| 2.10.2 利用函数的插值多项式反插 | 76 |
| 2.10.3 构造反函数的插值多项式 | 78 |
| 2.11 有理函数插值 | 79 |
| 2.11.1 有理插值的存在惟一性 | 79 |
| 2.11.2 蒂埃勒倒差商算法 | 82 |
| 3 函数逼近与曲线拟合 | 86 |
| 3.1 函数空间的范数与最佳逼近问题 | 86 |
| 3.1.1 函数逼近与函数空间的范数 | 86 |
| 3.1.2 最佳逼近问题 | 87 |
| 3.2 最佳一致逼近 | 88 |
| 3.2.1 连续函数的一致逼近 | 88 |
| 3.2.2 最佳一致逼近多项式 | 90 |
| 3.3 最佳一致逼近多项式的数值方法 | 93 |
| 3.3.1 最佳一致线性逼近 | 93 |
| 3.3.2 列梅兹算法 | 94 |
| 3.4 正交多项式 | 96 |
| 3.4.1 内积与正交多项式 | 96 |
| 3.4.2 勒让德多项式 | 100 |
| 3.4.3 切比雪夫多项式 | 101 |
| 3.4.4 其他常用的正交多项式 | 104 |
| 3.5 最佳平方逼近 | 105 |
| 3.6 用正交函数族作最佳平方逼近 | 110 |
| 3.6.1 最佳平方逼近与广义傅里叶级数 | 110 |

| | | |
|-------|---------------------|-----|
| 3.6.2 | 用勒让德多项式作平方逼近 | 111 |
| 3.6.3 | 截断切比雪夫级数 | 113 |
| 3.7 | 近似最佳一致逼近 | 115 |
| 3.7.1 | 泰勒级数项数的节约 | 115 |
| 3.7.2 | 切比雪夫多项式零点插值 | 117 |
| 3.8 | 曲线拟合的最小二乘法 | 119 |
| 3.8.1 | 基本原理 | 119 |
| 3.8.2 | 线性最小二乘逼近 | 121 |
| 3.8.3 | 用正交多项式作最小二乘拟合 | 126 |
| 3.8.4 | 多元最小二乘拟合 | 128 |
| 3.9 | 傅里叶逼近 | 128 |
| 3.9.1 | 最佳平方逼近与三角插值 | 128 |
| 3.9.2 | 快速傅里叶变换 | 132 |
| 3.10 | 有理逼近与连分式 | 136 |
| 3.11 | 最佳有理逼近 | 141 |
| 3.12 | 帕德逼近 | 146 |
| 3.13 | 梅利逼近 | 151 |
| 3.14 | 函数的连分式展开 | 156 |
| 4 | 数值积分与数值微分 | 163 |
| 4.1 | 引言 | 163 |
| 4.2 | 牛顿-科茨求积公式 | 164 |
| 4.2.1 | 公式的一般形式 | 164 |
| 4.2.2 | 梯形公式 | 166 |
| 4.2.3 | 辛普森公式 | 167 |
| 4.2.4 | 高阶牛顿-科茨公式 | 168 |
| 4.2.5 | 开型牛顿-科茨公式 | 170 |
| 4.3 | 复合求积公式 | 172 |
| 4.3.1 | 复合梯形公式 | 173 |
| 4.3.2 | 复合辛普森公式 | 174 |
| 4.3.3 | 复合求积公式的收敛性 | 175 |
| 4.3.4 | 区间逐次分半法 | 176 |