

高等学校教材

数值计算方法

聂铁军 等编著

西北工业大学出版社

高等学校教材

数值计算方法

聂铁军 侯 谊 郑介庸 编著

江苏工业学院图书馆
藏书章

西北工业大学出版社

1990年6月 西安

内 容 提 要

全书共分十三章, 主要介绍电子计算机上常用的数值计算方法. 内容包括插值法、平方逼近与正交多项式、数值积分与微分、方程求根、线性与非线性方程组的解法、矩阵特征值和特征向量的计算、常微分方程初值问题的数值解法、偏微分方程的差分方法、有限元方法等. 书中着重说明构造各种算法的基本思想和原理, 对稳定性、收敛性和误差估计等基本概念和理论作了适当的讨论.

本书可作为高等工科院校应用数学专业本科生和工科专业研究生教材, 也可供有关科技工作者阅读和参考.

高 等 学 校 教 材

数 值 计 算 方 法

编 著 聂铁军等

责任编辑 刘彦信

责任校对 潘玉浩

西北工业大学出版社出版

(西安市友谊西路 127 号)

陕西省新华书店发行

西北工业大学出版社印刷厂印装

ISBN 7-5612-0246-6/O·27(课)

开本 850×1168 毫米 1/32 14.25 印张 359 千字

1990 年 6 月第 1 版 1990 年 6 月 第 1 次印刷

印数 1—2000 册 定价: 3.15 元

前 言

本书是作为工科院校应用数学专业本科生和工科专业研究生的教材而编写的。读者只需具有高等数学、线性代数及算法语言基础，就可阅读本书。作为教材，其教学目的是使读者掌握电子计算机上常用的数值方法和原理，能够针对实际问题的要求正确选择、使用适当的数值算法，对数值结果作必要的分析和处理，并为进一步学习科学与工程计算方法及有关理论打下良好的基础。

本书内容的选取，参照了1986年及1988年两次工科院校研究生“数值分析”课程教学研讨会拟订的“教学基本要求”，着重介绍电子计算机上常用的基本数值计算方法，阐明构造算法的基本思想和原理，并对收敛性、稳定性和误差估计等基本概念和理论做了必要的讨论。为适合工科院校高年级学生和研究生的教学需要，且能适应工程技术人员学习与掌握基本数值方法的要求，本书选材力求精炼和实用，编写力求思路清晰，语言通顺，便于教学和阅读。本书初稿曾印成讲义，在西北工业大学应用数学专业本科生与工科研究生的教学中试用多次，教学效果良好，在此基础上再经修改加工成书。

本书共分十三章，讲授全书大约需要110学时。其中讲授第一至九章约需70学时，第十至十三章约需40学时。部分章节的内容保持了相对的独立性，以利于根据不同的要求和教学时数取舍。

第一、二、四章由郑介庸执笔，第五至八章由侯 谊执笔，第三章及第九至十三章由聂铁军执笔。

承蒙张德荣教授对全书作了仔细的审阅，周天孝、崔俊芝研

究员审阅了部分书稿，西北工业大学计算数学教研室的同志们试用过本教材的原稿——《数值计算方法》讲义，他们都提出过不少宝贵的修改意见，在此，谨致以诚挚的谢意。

限于水平，书中一定还有不少缺点和错漏之处，恳望得到批评指正。

编 著 者

1989 年 4 月

目 录

第一章 绪论	1
§ 1.1 数值计算方法的任务	1
§ 1.2 误差基本知识	2
1.2-1 误差的来源	2
1.2-2 绝对误差、相对误差和有效数字	3
1.2-3 数值运算的误差估计	7
§ 1.3 选用数值算法的若干注意之点	9
习题一	13
第二章 插值法	16
§ 2.1 引言	16
2.1-1 插值问题	16
2.1-2 插值多项式的存在唯一性	17
2.1-3 几何意义与插值余项	18
§ 2.2 拉格朗日插值多项式	18
2.2-1 拉格朗日插值多项式的构造	18
2.2-2 插值余项表达式	21
§ 2.3 差商和牛顿插值公式	23
2.3-1 差商的定义及其性质	23
2.3-2 牛顿插值多项式及其余项	26
§ 2.4 差分与等距节点插值公式	29
2.4-1 差分的定义	29
2.4-2 差分的性质	30
2.4-3 等距节点插值公式与差分表	32

§ 2.5 埃尔米特插值	35
2.5-1 低次埃尔米特插值多项式	36
2.5-2 一般埃尔米特插值多项式	38
§ 2.6 分段插值法	40
2.6-1 分段线性插值函数	42
2.6-2 分段二次插值函数	43
§ 2.7 三次样条插值	44
2.7-1 三次样条插值的定义	44
2.7-2 三次样条插值函数的构造	45
习题二	52

第三章 平方逼近与正交多项式.....55

§ 3.1 正交多项式	56
3.1-1 正交多项式的概念	56
3.1-2 正交多项式的性质	57
3.1-3 切比晓夫多项式	61
3.1-4 勒让德多项式	64
3.1-5 拉盖尔多项式与埃尔米特多项式	66
§ 3.2 最佳平方逼近	67
3.2-1 函数的最佳平方逼近	67
3.2-2 用正交函数系作最佳平方逼近	71
§ 3.3 数据的最小二乘曲线拟合	76
3.3-1 最小二乘曲线拟合的概念	76
3.3-2 用多项式进行最小二乘曲线拟合	78
3.3-3 正交多项式在曲线拟合中的应用	83
习题三	87

第四章 数值积分与数值微分.....89

§ 4.1 引言	89
----------------	----

4.1-1	数值求积的基本思想与求积公式	89
4.1-2	求积公式的代数精确度	90
§ 4.2	牛顿-柯特斯公式	91
4.2-1	插值型求积公式	91
4.2-2	牛顿-柯特斯公式	92
4.2-3	求积公式的截断误差	95
§ 4.3	复化求积公式	98
4.3-1	复化梯形公式	99
4.3-2	复化辛甫生公式和复化柯特斯公式	100
4.4-3	区间逐次分半求积法	103
§ 4.4	龙贝格求积算法	106
§ 4.5	高斯型求积公式	109
4.5-1	高斯-勒让德求积公式	111
4.5-2	高斯型求积公式的余项	113
4.5-3	高斯型求积公式的稳定性	114
4.5-4	带权的高斯型求积公式	115
§ 4.6	数值微分	118
习题四		119

第五章 方程求根122

§ 5.1	二分法	122
5.1-1	在有根区间内仅有一个实单根的情况	122
5.1-2	在有根区间内不止一个实根的情况	124
§ 5.2	迭代法	126
5.2-1	简单迭代法	126
5.2-2	迭代收敛的加速	130
§ 5.3	牛顿法	133
5.3-1	牛顿法	133
5.3-2	迭代收敛的阶	135

5.3-3 牛顿法的改进	137
§ 5.4 弦割法	139
§ 5.5 抛物线法	140
§ 5.6 非线性方程组的解法	143
习题五	145

第六章 解线性方程组的直接方法 148

§ 6.1 消去法	149
6.1-1 高斯消去法	149
6.1-2 高斯主元消去法	152
6.1-3 高斯-约当消去法	155
6.1-4 方阵求逆	157
§ 6.2 矩阵分解及其在解方程组中的应用	162
6.2-1 高斯消去法的矩阵形式	162
6.2-2 矩阵的三角分解	165
6.2-3 选主元的三角分解法解方程组	168
6.2-4 追赶法	170
6.2-5 平方根法	173
§ 6.3 向量和矩阵的范数及方程组的性态	177
6.3-1 向量的范数	177
6.3-2 矩阵的范数	179
6.3-3 方程组的性态	182
习题六	186

第七章 解线性方程组的迭代法 189

§ 7.1 雅可比迭代与高斯-赛德尔迭代	189
7.1-1 雅可比迭代	189
7.1-2 高斯-赛德尔迭代	191
§ 7.2 迭代的收敛性	192

§ 7.3 超松弛迭代法·····	196
习题七 ·····	200
第八章 矩阵特征值和特征向量的计算 ·····	202
§ 8.1 乘幂法与反幂法·····	202
8.1-1 乘幂法·····	202
8.1-2 原点平移法·····	207
8.1-3 雷利商加速法·····	208
8.1-4 反幂法·····	210
§ 8.2 雅可比法·····	212
8.2-1 古典雅可比法·····	213
8.2-2 雅可比过关法·····	217
§ 8.3 QR 方法 ·····	219
8.3-1 QR 分解 ·····	219
8.3-2 反射矩阵·····	220
8.3-3 用反射变换化 A 为上 Hessenberg 阵 ·····	220
8.3-4 带原点平移的 QR 方法·····	223
§ 8.4 二分法求矩阵特征值·····	224
8.4-1 矩阵 A 的特征多项式序列的性质·····	225
8.4-2 特征值的计算·····	230
习题八 ·····	233
第九章 常微分方程初值问题的数值解法 ·····	236
§ 9.1 欧拉方法与改进的欧拉方法·····	237
9.1-1 欧拉方法的构造·····	237
9.1-2 后退的欧拉公式·····	239
9.1-3 改进的欧拉方法·····	240
9.1-4 数值方法的收敛性、误差估计和稳定性·····	243
§ 9.2 龙格-库塔方法 ·····	247

9.2-1	泰勒方法	247
9.2-2	龙格-库塔方法的基本思想与二阶公式的推导	249
9.2-3	四阶龙格-库塔方法	252
9.2-4	步长的自动选择	255
§ 9.3	线性多步法	256
9.3-1	阿达姆斯显式公式	257
9.3-2	阿达姆斯隐式公式	260
9.3-3	阿达姆斯预测-校正方法	262
9.3-4	基于泰勒展开的方法	263
9.3-5	哈明方法	267
§ 9.4	一阶方程组与高阶方程	268
9.4-1	一阶方程组	268
9.4-2	高阶方程	270
	习题九	272

第十章 椭圆型方程边值问题的差分解法 275

§ 10.1	常微分方程边值问题的差分解法	275
10.1-1	差分格式的构造	275
10.1-2	差分方程的可解性及误差估计	276
10.1-3	解差分方程组的追赶法	280
10.1-4	一般二阶常微分方程的第三边值问题	281
§ 10.2	椭圆型差分格式的构造	283
10.2-1	微分方程的差分近似	284
10.2-2	边值条件的处理	292
§ 10.3	差分方程解的存在唯一性、收敛性及误差估计	295
§ 10.4	差分方程的解法	300
10.4-1	椭圆型差分方程的一些特征	300
10.4-2	差分方程的迭代解法	302
	习题十	307

第十一章 抛物型方程的差分解法311

§ 11.1 古典差分格式的构造312

11.1-1 最简显式格式312

11.1-2 最简隐式格式314

11.1-3 李查逊格式316

11.1-4 六点对称格式317

§ 11.2 差分格式的收敛性与稳定性318

11.2-1 分析稳定性的 ε —图方法319

11.2-2 古典差分格式的稳定性321

11.2-3 关于差分格式的收敛性325

§ 11.3 二维热传导方程的交替方向格式326

11.3-1 P-R 格式327

11.3-2 D-R 格式328

习题十一329

第十二章 双曲型方程的差分解法332

§ 12.1 双曲型方程混合问题的差分解法332

12.1-1 差分格式的建立332

12.1-2 差分格式的稳定性335

12.1-3 差分格式的收敛性338

§ 12.2 一阶方程的差分方法341

12.2-1 偏心差分格式341

12.2-2 Lax 格式344

12.2-3 Lax-Wendroff 格式345

§ 12.3 特征线法与特征—差分方法347

12.3-1 特征线法349

12.3-2 特征—差分方法350

12.3-3 一阶双曲型方程组354

习题十二	358
第十三章 微分方程的有限元方法	361
§ 13.1 变分原理与古典变分方法	361
13.1-1 初等变分原理的实例	361
13.1-2 常微分方程边值问题的变分原理	366
13.1-3 二阶椭圆型方程边值问题的变分原理	371
13.1-4 古典变分方法	380
§ 13.2 常微分方程边值问题的有限元方法	388
13.2-1 剖分与插值	389
13.2-2 有限元方程的形成	391
13.2-3 举例	398
§ 13.3 二阶椭圆型方程的有限元解法	399
13.3-1 元单剖分与分片插值	400
13.3-2 有限元方程的形成	411
13.3-3 有限元方程的求解	417
13.3-4 收敛性与误差估计	418
习题十三	423
习题答案	427
参考书目	443

第一章 绪 论

§ 1.1 数值计算方法的任务

电子计算机的高速发展，为解决各种工程实际中的科学计算问题开辟了广阔的前景。随着计算机广泛地用来进行大型科学计算，数值计算方法作为一门新兴的学科迅速地发展起来，当前已经成为应用数学的一个重要分支。

解决工程实际中的科学计算问题，需要经过建立数学模型、选用计算方法、程序设计和上机计算得出数值结果等主要步骤。其中选用计算方法是整个科学计算全过程的一个重要环节，它是程序设计和对数值结果进行分析的依据和基础。数值计算方法的任务，是研究各种适用于科学计算的方法及有关的数学理论，或者说是针对特定的数学模型，提供各种能通过计算机有效地计算出数值结果的方法，并且对这些方法做出理论分析和论证。

众所周知，电子计算机具有极高的运算速度，但它只能根据人们给定的指令，完成加、减、乘、除等算术运算和一些逻辑运算。因此，要使用计算机来求解各种数学问题，诸如方程求根、微分和积分的计算、微分方程的求解等等，必须把求解过程归结为按一定的规则进行一系列四则算术运算。计算机只能机械地执行人们所给定的指令，交给计算机执行的解题方法的每一个步骤，都必须加以准确的规定。对数学问题的解法归结为由加、减、乘、除等基本运算，并规定明确的运算顺序的完整计算方案，称为数值算法或简称算法。数值计算方法可以说是以数学问题为对象，研究各种数值算法及其有关理论的一门数学学科。

数值算法有优劣之分，这涉及到计算工作量，存贮量的大小和逻辑结构的繁简程度，也包括收敛性、稳定性和误差分析等理论问题。本书是以应用数学专业本科生和工科有关专业研究生为主要对象而编写的，其目的是使读者获得数值计算方法的基本概念，掌握适用于电子计算机的常用算法。具有基本的理论分析能力。

§ 1.2 误差基本知识

1.2-1 误差的来源

科学计算中处理的数据和计算的结果，通常都是近似数值，它们与实际的精确值之间存在着误差。误差的来源主要有以下几种：

1. 数学描述与实际问题之间的误差

描述实际问题的数学模型，总是在一定条件下忽略了次要因素而抓住主要矛盾加以抽象得出的结果，是一种理想化了的数学描述，它与实际问题之间总存在误差，这种误差称为“描述误差”或“模型误差”。

2. 观测误差

在各种公式或计算过程中常引用一些已知的数量（称为原始数据），这些数量往往是由观测和实验得到的，它们与实际的大小之间有误差，这种误差称为“观测误差”。

3. 截断误差

在计算中常遇到超越运算或极限运算，需要通过无穷过程才能求得精确的结果。但在实际上人们只能进行有限的算术运算，用有限的步骤来求得近似的结果。例如用收敛的无穷级数的部分和来替代无穷级数本身以求得其近似值。这样，由于截断一个无穷过程而引起的误差，称为“截断误差”。

4. 舍入误差

对于参与计算过程的数据以及最后的数值结果，常用有限小数代替无穷小数，或用位数较少的有限小数代替位数较多的有限小数。例如用 3.1416 代替 π ，用 1.414 代替 $\sqrt{2}$ 等等，这样所产生的误差称为“舍入误差”。

前两种误差一般不是计算工作者所能独立处理的，因此在数值计算方法中通常只讨论截断误差和舍入误差。

1.2-2 绝对误差，相对误差和有效数字

为了表示似近数的精确程度，常需运用绝对误差、相对误差和有效数字的概念。

定义1.1 设 x^* 为准确值 x 的一个近似值，称

$$e^* = x^* - x \quad (1.1)$$

为似近值 x^* 的绝对误差，或简称误差。

在实用中，精确值 x 常无法准确得到或不能用有限位数表示出来，因此也无法准确地计算出绝对误差的真值，常常只能根据具体测量或计算的情况估计其大小的界限，即估计出 $|e^*|$ 的上界。设存在一个正数 ε^* ，使

$$|e^*| = |x^* - x| \leq \varepsilon^* \quad (1.2)$$

则称 ε^* 是近似值 x^* 的绝对误差限，简称为误差限。由 (1.2) 式可知

$$x^* - \varepsilon^* \leq x \leq x^* + \varepsilon^*$$

由此可知准确值必落在区间 $[x^* - \varepsilon^*, x^* + \varepsilon^*]$ 之内。在工程实际应用中，还常用

$$x = x^* \pm \varepsilon^* \quad (1.3)$$

来表示近似值 x^* 的精确度或准确值所在的范围。

绝对误差 e^* 是有量纲单位的量，并且可能取正值负值。如果 e^* 为正值，则 x^* 是 x 的过剩近似值，而 e^* 为负时， x^* 是 x 的不足近似值。

绝对误差的大小，不能完全刻画近似值的准确程度。例如，如果测量 1 公里的长度时有 5 米的误差；测量 100 米的长度时有 1 米的误差。就绝对误差而言，前者为后者的五倍，但这并不意味着后一种测量更精确，因为如果考虑到被测量的数量本身的大小，前者在 1 公里即 1000 米中有 5 米的误差，误差所占的比例为 0.5%，而后者的误差所占的比例为 1%。显然应该说前一种测量要精确些。因此，刻画近似值的精确程度，不仅要看绝对误差的大小，也要考虑近似数本身的大小。为此我们引入相对误差的概念。

定义 1.2 设 x^* 是 x 的近似值， e^* 为 x^* 的绝对误差，则称比值 $\frac{e^*}{x}$ 是近似值 x^* 的相对误差，记作 e_r^* ，即

$$e_r^* = \frac{e^*}{x} = \frac{x^* - x}{x} \quad (1.4)$$

在实际应用时，常将相对误差取作

$$e_r^* = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*} \quad (1.5)$$

因为当 $\left| \frac{e^*}{x^*} \right|$ 较小时，两者之差

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

是与 $e_r^* = \frac{e^*}{x^*}$ 的平方同级的小量，可以忽略不计。相对误差说明了 x^* 的绝对误差与 x^* 本身比较所占的比重，它可以反映一个近似数的精确程度。相对误差可正可负，是一个无量纲量，通常用百分数表示。

类似地，常常无法定出 e_r^* 的准确值，只能估计它的大小的范围。如果有正数 ε_r^* ，使