

# 数值计算

(第二版)

*Numerical Computation*

*(Second Edition)*

周国标 谢建利



高等教育出版社  
HIGHER EDUCATION PRESS

014914558

0241-43  
41-2

# 数值计算

SHUZHJ JISUAN

(第二版)

## Numerical Computation

(Second Edition)

周国标 谢建利



0241-43  
41-2



高等教育出版社·北京  
HIGHER EDUCATION PRESS BEIJING



北航

C1701364

872410410 .

## 内容提要

本书的内容属于科学计算的基础部分,包括数值线性代数、数值逼近和方程数值求解三大板块,课程框架由计算方法的设计和算法的数值分析组成,前者研究和提出基于合理数学原理的计算方法,后者对提出的计算方法,从精度和效率两个方向进行分析评价。本书各章先后对线性代数方程组、矩阵特征值、非线性方程(组)、插值与拟合逼近、数值微积分、常微分方程初值等问题的数值计算进行详尽的讨论。

全书的叙述体系注重从各种数值现象和实际问题开始,引导读者观察与思考,培养“问题意识”,防止数学概念和定义莫名其妙地从天而降;在突出基本内容的同时,为具有较好数学功底的读者提供了提高的空间。全书采用启发式模式,叙述力求严谨,强调数学训练的难度和强度;每章附有较多的练习题和数值实验。

本书主要为理工医农类与经济管理类学科研究生的公共数学课程编写,也可供数学系本科生作为“数值分析”的教材或参考书。对需要较多科学与工程计算的科技人员,本书也是一本合适的参考书。

## 图书在版编目(CIP)数据

数值计算 / 周国标, 谢建利编著. —2 版. —北京: 高等教育出版社, 2013. 11  
ISBN 978-7-04-038549-6

I. ①数… II. ①周… ②谢… III. ①数值计算-研究生-教材 IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 233572 号

策划编辑 张长虹  
插图绘制 郝林

责任编辑 张长虹  
责任校对 杨凤玲

封面设计 李卫青  
责任印制 刘思涵

版式设计 马敬茹

出版发行 高等教育出版社  
社址 北京市西城区德外大街 4 号  
邮政编码 100120  
印刷 煤炭工业出版社印刷厂  
开本 787mm×960mm 1/16  
印张 35.5  
字数 660 千字  
购书热线 010-58581118  
咨询电话 400-810-0598

网 址 <http://www.hep.edu.cn>  
<http://www.hep.com.cn>  
网上订购 <http://www.landaco.com>  
<http://www.landaco.com.cn>

版 次 2008 年 9 月第 1 版  
2013 年 11 月第 2 版  
印 次 2013 年 11 月第 1 次印刷  
定 价 49.00 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换  
版权所有 侵权必究  
物 料 号 38549-00

## 致 读 者

科学计算能力是现代科学研究人员、工程技术人员和管理人员不可或缺的基本素养之一,数值计算是学习科学计算、提升计算能力的数学基础课程。这是一门数学课程,但又与本科阶段学习的微积分,线性代数等课程具有不同的特点,从基本的数学思想、思维方式到学习方法,都有很大的差异。在以往的印象中,数学是严格、严密的,滴水不漏,而当今具有一定规模的计算是用算法在计算机上实现的,此时必须考虑“误差”这个数学上似乎不允许存在的东西,因为计算过程中的误差随时都会“冒”出来;其次,计算较大规模问题时还必须考虑计算的速度与付出的代价。减少误差(或提高精度)和提高效率(或降低代价)是衡量算法成败与好坏的两个标准。在“纯粹”数学里许多漂亮的结论和方法,很可能在这两个标准面前失去光彩,我们时常面对“理论上正确,却难以计算”的困境。数值计算这门课程就是研究如何解决这个困境的,具体地说,是探索如何设计求解各类数学问题的计算方法,如何分析评价计算方法的性能与好坏,使计算实现高的精度和低的代价。

对于这样特点的课程学习,根据我们的教学体会,想给读者六点建议。

首先,学习本课程的直接目标,除了要用现有方法进行计算外,还要继承创新,能设计出更好的计算方法。对此,要重视对数学思想的理解与思考。有些人常把学数学错误理解为“背定义、代公式、套题型”,使得学习数学走上了歪路。数学思想是数学发展的灵魂与动力,许多数学方法是在数学思想的启示下产生的。在数值计算发展过程中所形成的几种数学思想及计算原理,其本源大多是较朴素的,但很深刻。接受并理解数学思想,对于学习本课程来说就等于抓住了“纲”,对应的计算公式的推导演绎等常可不记自明或容易理解,做习题也会顺利得多。

其次,学习阶段最根本的是培养和锤炼理性思维和创新意识,为以后的长远发展打下基础,并不要求一大批学生马上作出真正创新的成果来。本课程学的是前人总结出的知识,这些知识已经不是新的,但对读者来说还是新的,通过学习,可以经历一次知识是如何归纳、提炼、创新的全过程,实际上是知识创新的锻炼和实践,这种历练对每一位想走向科学殿堂的学人必不可少。希望读者在学习过程中,能从前人创造知识的过程中领悟思想和方法,并逐步形成自己的学习观和方法论。每研究一类新问题前,尽量多想:如果我面对这个问题,会怎么处理;然后与前人的研究进行比较。作为研究生,许多演绎过程最好自行推导一

遍,这样的学习效率将提高很多。不要什么都看别人的,照抄书上的,死记硬背,囫囵吞枣。

第三,要有意识地注重数值现象的观察、归纳与提炼,以形成问题。任何创新不可能凭空产生,创新建立在“问题”基础之上,没有问题和疑问的人不可能开展真正的研究,当然也谈不上创新。培养问题意识是大学数学教育,尤其是研究生数学教育的第一步,保持对未知世界的好奇心和理性认识的强烈愿望,是任何创新的萌芽和基石。对于已经具有一定基础的研究生读者来说,一本好的教材不仅仅是单纯地传输知识,一字不漏地告诉读者教学大纲规定的内容是哪些,定理和公式是什么,而是引导读者去主动联系客观世界,认识课程研究的对象,并能联系自己的学科,观察表面的现象,搜集有关数据,归纳数据背后的规律,提炼各类问题,开拓科学视野,这是启发式、研究型教学的开端,它与传统的以知识传授为主体的教学模式最大的区别,在于引导读者从问题与现象出发,主动地学习与思考。

第四,研究生的数学训练应有相应的强度和难度。可能是对中学阶段题海式学习的厌倦或逆反,很多学生一上大学就放松了必要的基本训练。对数学学习而言,“意思”式的作业是最没有意思的,以完成“任务”为目的的训练不可能真正完成学习任务。与同类教材不同,本书提供和设计了较多习题和思考题,这些练习题是本教材和启发式教学模式不可缺少的有机部分,它们引导读者步步深入并理解数值计算的基本原理,引导读者循序渐进地理解数值分析的方法与步骤。这些练习题可分为四类。一是观察思考题,提供数值计算中出现的各种现象和问题,引导读者去观察思考;二是计算题,这里的计算包括手算和机算(数值实验题);三是理论探索和逻辑训练题,对读者进行必要的演绎、推导、归纳和分析证明方面的训练,并由此启发读者设计新算法的意识;第四是预习题,课后的练习除了当堂课程内容的消化外,还对即将学习的新内容,用习题形式让读者提前体会和自我认识。根据我们的教学实践,这样做的效果不仅节省了课时,还加深了读者对有关内容的理解。自己动脑动手,比单纯听课更重要,它是数学学习的主体。读者可根据自己的实际情况,掌握训练的尺度,没有做完的习题,可以留在以后有时间和兴趣时再做,也许你的数学水平上升一个台阶后对这些习题会有新的认识,解题的思路会更宽。我们希望对自己有较高要求的同学,尽量少看目前流行的若干题解书,因为多看这样的“解题秘诀”,对一部分读者来说常意味着不思考或少思考,无形中养成套公式套题型的坏习惯,对自己的进步没有多少帮助。提倡不会做习题时与同学和老师讨论,不要闭门造车。我们相信很多同学不难掌握本书介绍的各个算法,但我们更希望读者能用自己的语言去领悟这些算法背后的思想和数学原理,这是你今后继续学习和研究的基础。当你养成思考和探索习惯的时候,你实际上已经不知不觉地走上了科学研究的

大道。

第五,以往学数学似乎主要是听课和做习题,但在本课程里,还必须强调动手上机计算,这不仅是为了得到计算结果,更是一种深入的学习和探索,许多数值现象单从公式和定理上是体会和认识不清的,至少认识是肤浅的。当今计算机硬件和软件,为我们提供了与前辈有天壤之别的便利,使我们洞察数值规律有了锐利的武器,放弃这个武器等于倒退三四十年的。通过计算,你会有新认识和新体验,有了新的认识和体验,又会加深理论学习的理解和兴趣。

最后,本书定位于科学计算的基础教材,涉及计算问题类型有限,许多问题的讨论仅在单变量层面展开。限于学时和篇幅,科学和工程中常遇到的多变量高维计算问题基本没有涉及和展开,只能把它们安排在后续的课程中研究学习。“麻雀虽小,五脏俱全”,本书中讨论的问题在算法设计和数值分析各层面上是全方位的,因此,理解了这些问题的分析方法,能为今后的学习进一步打下坚实的基础。我们也看到,部分读者在学习本课程时会遇到一些困难,这些困难本质上源于本科阶段数学基础的薄弱。数学是一个整体,基础不牢,地动山摇;不要就事论事,解决之路恐怕不能仅读这本教材,这些读者需要复习或学习微积分、线性代数等课程,甚至学一点理科的其他数学课程,以解决后劲不足的缺陷。俗话说,“磨刀不误砍柴工”。

期望读者在本课程和其他数学课程的学习中,养成乐于观察、勤于思考、善于分析、长于归纳的好习惯,这将有损于你的一生。同时,也期望读者能在学习过程中真正欣赏到众多算法闪耀着的智慧的光芒,回味数学解决困难问题时表现出的魅力与神奇,并充分开启自己的智慧,为走上科学研究的生涯,打下坚实的基础。

限于作者的水平,本书肯定存在着缺陷和不足,希望读者一一指出,使我们在再版时改进,不胜感谢。

作者

于上海交通大学 思源湖畔

2013年2月

作者电子邮箱地址:

周国标 gbzhou@sjtu.edu.cn

## 致 教 师

首先感谢您选用本书作为教材。本书主要用作理工医农类和经济管理类学科研究生和数学专业本科生学习科学计算的导论性教材。

科学计算能力是现代科学研究人员、工程技术人员和管理人员不可或缺的基本素养之一。这种素养不能片面理解为代公式、套题型或调程序式的计算,而是科学研究人员的科学文化和研究习惯,在理论分析、实验研究和科学计算这三种基本科学技术活动方式中有机自然的反映。应试教育的最大弊端是把教育降为灌输式的教学,以孤立的知识、形式的考试和僵死的学分作为教学活动的最终指标。不可否认,有部分师生存在认识上的误区,陷于应试地教和学而无法自拔,加上大学教学中学化,研究生教学本科化的倾向,满足于知识的单纯传授和死板的记忆,使得大学数学教育走向低层次困局的可能性增大。

我们心目中的大学数学教育,能在较高的层面上引导学生通过数学文化的熏陶、沉淀和积累,领悟求学之道,养成理性思维的习惯,同时提高定量分析的能力。这里涉及学数学的理性和工具性之争。受应试教育和功利主义的影响,数学的工具性被放在突出的位置,对于理工科研究生,学数学的工具性更容易被提到不适当的位置。我们并不否认数学的工具性,但也看到许多研究生走上工作岗位后的发展,常被数学能力欠缺所拖累。仔细分析后发现,问题出在他们求学时期的培养模式上,自然也与教材有关。传统的大学数学教科书,大多以“定义—定理—证明—例题”为结构框架,很少讲来龙去脉,于是“代公式、套题型、对答案”成了数学教学过程的主旋律,教材等同于课堂教学知识点的集成,那些以知识灌输为主的多媒体技术在这里也有推波助澜的倾向。

具体到学习计算数学,伴随着对一类现象的归纳提炼,建立数学模型,寻找求解思路,构造计算方法,对方法进行多种角度的分析,乃至对一类问题研究的曲折历史的追寻等,这里可以为学生打开一片科学的天空!这远比获取书本知识本身更重要、意义更深远。人的智力素质中,包括好奇心、注意力、观察力、理解力、思考力、联想与想象力、记忆力等,教育与教学要为培养和发展这些智力提供良好的环境。知识可以传授,但智慧只能启迪,智力只能培养,才能只能锤炼。大学数学教学的根本不是传授,而是启迪、培养、引导和锤炼,学生的素质是在一个良好的环境里培养出来的。创新意识从根本上说是一种综合的人格素质和人生取向,是科学精神的自然外延和表现。这样的意识不可能凭空产生,它建立在“问题意识”和“思考习惯”的基础之上。培养问题意识是大学数学教育,尤其是

研究生数学教育的第一步,保持对未知世界的好奇心和理性认识的强烈愿望,是任何创新的萌芽和基石,任何层次的研究都是从“有”问题起步的。

因此,对于已经具有一定基础的研究生读者来说,教师和教材的首要角色不仅仅是单纯地传输知识,一字不漏地告诉读者教学大纲规定的内容是哪些,定理和公式是什么,而是引导读者去主动联系客观世界,认识课程研究的对象,观察其表现的现象,搜集有关数据,归纳数据背后的规律,提炼各类问题,开拓科学视野,这是启发式、研究型教学的开端,它与传统的以知识传授为主体的教学模式最大的区别在于,引导读者从问题与现象出发,主动地学习与思考。知识只有以思想为指导,各知识点相互组成整体并能解决问题时,才是有力量的,死记硬背的知识只是累赘与负担。

有了问题就有了思考的载体,但是不等于有问题的人一定想思考、能思考、会思考。思考与探索是具有科学精神的人的专利。因此,教师和教材的第二个角色是科学精神的激励。科学素养包括科学精神、科学思想、科学方法和科学知识等多个层次,其中科学精神是第一位的,科学精神的核心是“凡事应问个为什么”,不满足于接受既成的结论,不盲目迷信所谓“权威”,它包含好奇心、探索性、想象力和冒险性等层面。数学中充满着未知和挑战,是接受科学精神激励的最好课堂和教材之一,学数学的方式不是盲目接受,而是问清为什么,为什么有这门学科,为什么定理要这样证,为什么不可以那样做?对于想思考的人来说,如此的熏陶、沉淀和积累将是刻骨铭心的。

在这基础上,教师和教材的第三个角色应是方法论上的启示,授人以鱼,不如授之以渔。说到底,数学的“抓鱼本领”只能靠学生自己在实践中领悟,靠教师耳提面命是没有用的,靠学生死记硬背也不能持久。学习数学没有万灵的方法,各门数学课程有不同的内容和特点,就数值计算而言,重要的不是告诉读者算法是什么,这个算法的特点和性质是什么,而是在根本上要启发学生用自己的语言去领悟算法是怎么“想”出来的?算法怎样才是“好”的,也就是让读者拥有自己的算法设计能力,提升对算法的“欣赏”水平。只有达到这样的程度和境界,才能说接近了数值计算的真谛。

教师和教材的第四个角色是对学生智力的开发,这就需要因材施教,需要师生交流和讨论,用各种手段和从不同角度,调动学生学习的能动性和培养学生思考的习惯和方法。这些都是我国教育中薄弱的环节。有各种原因造成这种状况,就教材而言,没有生动活泼的研究思路的引导,缺乏大量精彩的问题和事例,少有富启发性和实际背景的练习,常难以激发起学生的学习热情和积极性,这恐怕是一个重要原因。因此,研究生教材的建设,是一项重要的工程。课后师生接触不多,也是一个客观原因。另一方面,充分利用网络,构建师生互动交流平台,能在开发学生智力方面发挥重要作用,能部分克服客观不利因素的影响,因此,

网络建设是与教学模式现代化、教材现代化相平行的教学体系建设的一部分。

本书是作者在长期的教学实践中逐步积累和形成的,从讲稿、校内影印讲义到2008年正式出版,直至这次吐故纳新,第二版成书,反复修改和提炼,历经近20年。在此过程中,王健、李大明、宋宝瑞、贺力平、曾进等老师在教改探索中一起摸索启发式研究型的教学方法,付出了辛勤的努力,并提供不少有质量的习题,在此深表感谢。教材是教出来的,一本好的研究生教材应是引导初学者进入这门课程的向导,由问题与现象,启发学生领悟贯穿于课程始终的基本数学思想,领会和提高学生分析和解决问题的能力,因此,我们不想把教材写成“上课的材料”,或数学公式的集成,我们尽自己最大的努力,将前人成功处理各类数值问题的基本思想及其实现的方法,娓娓道来,让学生在欣赏数学美的过程中学会分析与思考,激发起“想学习、想探索”的动力。因而本书比一般同类教材的篇幅要大些。教师不必什么都讲,最重要的是引导而非灌输,要让学生在理解数学思想和方法后自行阅读和推导算法细节,自己做练习,这样学到的才是属于自己的东西。希望本书的教师们与我们一起探索和研究符合研究生教学规律的教学模式。

今天中国研究生教育的对象是一个庞大的群体,在学术定位、目标追求、数学基础、科学视野、学习动力、专业背景等方面的差距,远比本科学生大;加上各学科要求的差异,在教学上难以用一刀切的方式来要求这个群体,这对实施前述四个角色带来了困难。为了克服教学中的顾此失彼,我们在教学实践中的做法是强调基础训练,提供上升空间,引领研究探索,各取所需,各得其所,即希望一般的读者能掌握基础部分,对有兴趣有潜力有需要的读者,则鼓励尽可能多看、多想、多做,获得更大的收获。这本教材各章的基础部分编写得较为充实,另又安排了一定篇幅介绍了相对深入部分的内容,基础部分属于教学的重点。任课教师可根据学生的实际基础和要求灵活掌握。这样的试探能否成功,有待时间的检验。

谢建利编写了第九章,其余各章由周国标编写。在写作过程中,参考了众多国内外的相关著作和教材,得到很大的帮助和启发,也选择了其中一部分习题并作了修改,这类修改主要是改变了问题提出的角度,以利于启发学生的思考。由于文献较多,难以一一列出注明,在此深表谢意。

限于作者水平,书中疏忽之处在所难免,敬请各位教师不吝指教,作者不胜感谢。研究生数学教学改革是一场没有终点的长跑,希望同行们一起探索,取长补短,为我国研究生教育的进步贡献微薄力量。

作 者

于上海交通大学 思源湖畔

2013年2月

- [48] Daniel J. Applied Numerical Linear Algebra, Philadelphia: SIAM, 1997.
- [49] Gautschi W. Numerical Analysis: An Introduction, Birkhäuser, 1997.
- [50] C. Numerical Linear Algebra, Kluwer.
- [51] D. Numerical Linear Algebra, Kluwer.
- [52] S. Numerical Linear Algebra, Kluwer.
- [53] F. Numerical Linear Algebra, Kluwer.
- [54] Schumaker, L. Spline Functions: Basic Theory, New York: John Wiley & Sons, 1981.

## 郑重声明

高等教育出版社依法对本书享有专有出版权。任何未经许可的复制、销售行为均违反《中华人民共和国著作权法》，其为人将承担相应的民事责任和行政责任；构成犯罪的，将被依法追究刑事责任。为了维护市场秩序，保护读者的合法权益，避免读者误用盗版书造成不良后果，我社将配合行政执法部门和司法机关对违法犯罪的单位和个人进行严厉打击。社会各界人士如发现上述侵权行为，希望及时举报，本社将奖励举报有功人员。

反盗版举报电话 (010) 58581897 58582371 58581879

反盗版举报传真 (010) 82086060

反盗版举报邮箱 dd@hep.com.cn

通信地址 北京市西城区德外大街4号 高等教育出版社法务部

邮政编码 100120



北航

C1701364

# 目 录

|                                |    |
|--------------------------------|----|
| 第一章 绪论 .....                   | 1  |
| § 1 数学问题与数值计算问题 .....          | 1  |
| § 2 数值计算的基本数学思想与方法 .....       | 8  |
| 2.1 数值计算的基本思想 .....            | 8  |
| 2.2 数值计算的基本方法 .....            | 15 |
| § 3 计算误差的基本概念和误差分析 .....       | 18 |
| 3.1 误差来源的分类 .....              | 18 |
| 3.2 绝对误差、相对误差与有效数字 .....       | 21 |
| 3.3 算术运算的误差 .....              | 27 |
| 3.4 适定性与稳定性 .....              | 31 |
| 3.5 避免和减少误差的若干计算原则 .....       | 35 |
| § 4 计算复杂性概述 .....              | 37 |
| 4.1 计算复杂度——计算的代价 .....         | 37 |
| 4.2 收敛率——计算的速度 .....           | 41 |
| § 5 问题与探索:数值问题的病态性 .....       | 44 |
| 综合习题一 .....                    | 45 |
| 数值实验一 .....                    | 49 |
| 数值实验 1.1 迭代法的设计与运行(1) .....    | 50 |
| 数值实验 1.2 迭代法的设计与运行(2) .....    | 50 |
| 数值实验 1.3 函数逼近 .....            | 50 |
| 数值实验 1.4 初值误差对计算的影响 .....      | 51 |
| 第二章 求解线性代数方程组的直接方法 .....       | 53 |
| § 1 引言 .....                   | 53 |
| § 2 初等下三角形矩阵——Gauss 变换矩阵 ..... | 56 |
| § 3 Gauss 消元法 .....            | 60 |
| 3.1 顺序 Gauss 消元法 .....         | 60 |
| 3.2 消元过程的可行性 .....             | 65 |
| 3.3 Gauss 消元法的矩阵分析 .....       | 67 |
| 3.4 Gauss 主元消元法 .....          | 70 |
| § 4 三角分解法 .....                | 76 |
| 4.1 直接三角分解法 .....              | 76 |
| 4.2 列主元三角分解法 .....             | 79 |
| 4.3 带状对角形线性方程组的三角分解法 .....     | 80 |

|                                   |     |
|-----------------------------------|-----|
| 4.4 正定矩阵的三角分解法 .....              | 86  |
| §5 向量与矩阵的范数 .....                 | 91  |
| 5.1 线性空间中的范数 .....                | 91  |
| 5.2 几个常用的向量范数 .....               | 94  |
| 5.3 向量范数的等价性 .....                | 96  |
| 5.4 矩阵范数 .....                    | 98  |
| 5.5 几个常用的诱导矩阵范数 .....             | 101 |
| 5.6 范数的若干应用 .....                 | 103 |
| §6 线性方程组的误差分析及其性态 .....           | 106 |
| 6.1 直接法的误差分析 .....                | 106 |
| 6.2 线性方程组的条件数 .....               | 110 |
| §7 问题与探索: 矩阵条件数的近似估计 .....        | 112 |
| 本章评述 .....                        | 114 |
| 综合习题二 .....                       | 115 |
| 数值实验二 .....                       | 118 |
| 数值实验 2.1 电阻网络问题的求解 .....          | 118 |
| 数值实验 2.2 时间序列模型的求解 .....          | 119 |
| 数值实验 2.3 病态问题的求解 .....            | 119 |
| 数值实验 2.4 主元的选取与算法稳定性 .....        | 120 |
| 第三章 求解线性代数方程组的迭代法 .....           | 121 |
| §1 引言 .....                       | 121 |
| §2 基本迭代法及其构造 .....                | 126 |
| §3 基本迭代法的收敛理论 .....               | 137 |
| 3.1 迭代法的收敛性分析 .....               | 137 |
| 3.2 收敛定理 .....                    | 137 |
| 3.3 误差估计 .....                    | 141 |
| §4 几类特殊方程的基本迭代法的收敛性 .....         | 145 |
| 4.1 对角占优矩阵方程的基本迭代法的收敛性 .....      | 145 |
| 4.2 对称正定矩阵方程的基本迭代法的收敛性 .....      | 148 |
| 4.3 SOR 迭代格式的收敛性 .....            | 150 |
| 4.4 Richardson 迭代格式的收敛性 .....     | 152 |
| §5 迭代加速方法 .....                   | 154 |
| 5.1 多项式加速方法 .....                 | 155 |
| 5.2 SOR 迭代的最优松弛因子简述 .....         | 157 |
| §6 求解 $Ax = b$ 的变分原理与共轭梯度法 .....  | 159 |
| 6.1 求解 $Ax = b$ 的变分原理与最速下降法 ..... | 159 |
| 6.2 共轭方向法 .....                   | 164 |
| 6.3 共轭梯度法 .....                   | 167 |

|                                     |            |
|-------------------------------------|------------|
| 6.4 求解非奇异方程组的共轭梯度法 .....            | 171        |
| §7 问题与探索:预处理共轭梯度法 .....             | 173        |
| 本章评述 .....                          | 176        |
| 综合习题三 .....                         | 177        |
| 数值实验三 .....                         | 181        |
| 数值实验 3.1 基本迭代法的运行(1) .....          | 181        |
| 数值实验 3.2 基本迭代法的运行(2) .....          | 181        |
| 数值实验 3.3 基本迭代法的运行(3) .....          | 182        |
| 数值实验 3.4 最优松弛因子的选择方法 .....          | 182        |
| 数值实验 3.5 逆矩阵的迭代计算 .....             | 182        |
| <b>第四章 非线性方程组的数值求解</b> .....        | <b>184</b> |
| §1 概述 .....                         | 184        |
| §2 非线性方程的根的定位和二分法 .....             | 185        |
| 2.1 根的定位 .....                      | 185        |
| 2.2 二分法 .....                       | 188        |
| §3 基于不动点原理的迭代法 .....                | 191        |
| 3.1 不动点方程与不动点迭代法 .....              | 191        |
| 3.2 不动点的存在性与迭代法的全局收敛性 .....         | 193        |
| 3.3 迭代法的局部收敛性与收敛阶 .....             | 195        |
| 3.4 迭代法收敛的加速方法 .....                | 197        |
| §4 Newton 法(切线法) .....              | 203        |
| 4.1 Newton 法及其迭代格式 .....            | 203        |
| 4.2 Newton 法的收敛性 .....              | 204        |
| 4.3 求重根的修正 Newton 法 .....           | 207        |
| 4.4 Newton 法的进一步研究 .....            | 209        |
| §5 非线性方程组的数值求解的基本方法 .....           | 217        |
| 5.1 不动点迭代与压缩映射 .....                | 217        |
| 5.2 不动点迭代法的局部收敛性 .....              | 221        |
| 5.3 Newton 迭代法 .....                | 223        |
| §6 问题与探索:非线性方程组数值方法的进一步研究 .....     | 227        |
| 6.1 同伦算法 .....                      | 227        |
| 6.2 拟 Newton 法 .....                | 230        |
| 附录 向量值函数的可微性 .....                  | 232        |
| 本章评述 .....                          | 236        |
| 综合习题四 .....                         | 237        |
| 数值实验四 .....                         | 243        |
| 数值实验 4.1 算法的设计和性能比较研究 .....         | 243        |
| 数值实验 4.2 Newton 法收敛域的结构和局部收敛性 ..... | 243        |

|                                            |            |
|--------------------------------------------|------------|
| 数值实验 4.3 一般迭代格式的复杂行为 .....                 | 244        |
| 数值实验 4.4 非线性方程组的数值求解 .....                 | 244        |
| <b>第五章 矩阵特征值问题的数值方法 .....</b>              | <b>245</b> |
| §1 矩阵特征值问题的有关基础 .....                      | 245        |
| §2 乘幂法与反乘幂法 .....                          | 252        |
| 2.1 乘幂法的基本原理 .....                         | 252        |
| 2.2 乘幂法的计算格式 .....                         | 256        |
| 2.3 加速收敛技术 .....                           | 259        |
| 2.4 反乘幂法与 Rayleigh 商迭代法 (RQI) .....        | 261        |
| 2.5 基于乘幂法的降阶收缩方法 .....                     | 264        |
| §3 常用的线性变换工具 .....                         | 266        |
| 3.1 正交上三角化变换 .....                         | 266        |
| 3.2 Householder 反射变换 .....                 | 267        |
| 3.3 Givens 旋转变换和 Schmidt 正交化变换 .....       | 275        |
| §4 求解一般矩阵特征值问题的 QR 方法 .....                | 281        |
| 4.1 基本 QR 迭代格式 .....                       | 281        |
| 4.2 QR 方法的收敛性 .....                        | 282        |
| 4.3 QR 方法的预处理 .....                        | 284        |
| 4.4 带平移 QR 迭代方法 .....                      | 289        |
| §5 对称矩阵特征值问题 .....                         | 294        |
| 5.1 乘幂法 .....                              | 294        |
| 5.2 对称 QR 方法 .....                         | 296        |
| 5.3 Jacobi 方法 .....                        | 296        |
| §6 问题与探索: Krylov 子空间方法的基本思想 .....          | 301        |
| 6.1 求解思想的由来 .....                          | 301        |
| 6.2 Arnoldi 过程 .....                       | 303        |
| 6.3 Lanczos 过程 .....                       | 305        |
| 本章评述 .....                                 | 307        |
| 综合习题五 .....                                | 308        |
| 数值实验五 .....                                | 312        |
| 数值实验 5.1 矩阵特征值问题条件数的估计 .....               | 312        |
| 数值实验 5.2 QR 方法的实施 .....                    | 312        |
| 数值实验 5.3 对称矩阵特征值问题的不同方法的比较 .....           | 313        |
| 数值实验 5.4 Rayleigh - Quotient (RQ) 算法 ..... | 313        |
| <b>第六章 插值及其数值计算 .....</b>                  | <b>314</b> |
| §1 函数逼近与插值问题 .....                         | 314        |
| §2 Lagrange 插值 .....                       | 318        |
| 2.1 Lagrange 插值多项式 .....                   | 318        |

|                                         |            |
|-----------------------------------------|------------|
| 2.2 Lagrange 插值的误差分析 .....              | 321        |
| 2.3 Lagrange 反插值 .....                  | 324        |
| 2.4 逐次线性插值——Aitken 方法 .....             | 325        |
| §3 Newton 插值 .....                      | 329        |
| 3.1 Newton 插值多项式 .....                  | 329        |
| 3.2 差商的性质 .....                         | 331        |
| 3.3 Newton 插值公式 .....                   | 332        |
| 3.4 差分与等距节点插值 .....                     | 334        |
| §4 Hermite 插值 .....                     | 338        |
| §5 分段低阶插值 .....                         | 342        |
| §6 样条插值 .....                           | 345        |
| 6.1 分段三次 Hermite 插值与样条函数 .....          | 345        |
| 6.2 样条函数的概念 .....                       | 346        |
| 6.3 三弯矩方程 .....                         | 348        |
| 6.4 三转角方程 .....                         | 352        |
| 6.5 三次样条函数的误差与收敛性 .....                 | 354        |
| §7 问题与探索 .....                          | 356        |
| 7.1 关于 Runge 现象的数学分析 .....              | 356        |
| 7.2 B-样条基函数 .....                       | 359        |
| 本章评述 .....                              | 365        |
| 综合习题六 .....                             | 365        |
| 数值实验六 .....                             | 369        |
| 数值实验 6.1 观察 Lagrange 插值的 Runge 现象 ..... | 369        |
| 数值实验 6.2 不同插值方法的误差 .....                | 370        |
| 数值实验 6.3 样条函数插值 .....                   | 370        |
| <b>第七章 函数逼近及其数值计算 .....</b>             | <b>372</b> |
| §1 引言 .....                             | 372        |
| §2 最优平方逼近 .....                         | 375        |
| 2.1 内积空间 .....                          | 375        |
| 2.2 最优平方逼近问题及其正则方程 .....                | 376        |
| 2.3 度量矩阵的性质 .....                       | 378        |
| 2.4 最优平方逼近的充分性 .....                    | 381        |
| 2.5 最优平方逼近的误差 .....                     | 382        |
| §3 基于正交多项式的最优平方逼近 .....                 | 384        |
| 3.1 多项式空间 $P_n(x)$ 中的最优平方逼近 .....       | 384        |
| 3.2 正交多项式理论基础 .....                     | 384        |
| 3.3 两个重要的正交多项式 .....                    | 388        |
| §4 最小二乘逼近——基于数据的函数拟合 .....              | 400        |

|                               |     |
|-------------------------------|-----|
| 4.1 最小二乘问题及其基本概念              | 400 |
| 4.2 存在唯一性                     | 404 |
| 4.3 线性最小二乘问题的数值性态及计算方法        | 410 |
| §5 最优一致逼近                     | 418 |
| 5.1 一致逼近多项式的存在性               | 418 |
| 5.2 最优一致逼近多项式                 | 419 |
| 5.3 最优逼近多项式的求法                | 422 |
| §6 问题与探索:非线性最小二乘问题            | 428 |
| 本章评述                          | 431 |
| 综合习题七                         | 431 |
| 数值实验七                         | 435 |
| 数值实验 7.1 对 Runge 函数的最优平方逼近的比较 | 435 |
| 数值实验 7.2 探索最小二乘问题的数值不稳定现象(1)  | 435 |
| 数值实验 7.3 探索最小二乘问题的数值不稳定现象(2)  | 436 |
| 数值实验 7.4 最优平方逼近多项式的收敛         | 436 |
| 第八章 数值积分与数值微分                 | 437 |
| §1 数值积分的基本思想                  | 437 |
| §2 插值型求积法                     | 441 |
| 2.1 插值型求积公式                   | 441 |
| 2.2 Newton-Cotes 公式           | 443 |
| 2.3 求积公式的收敛性和数值稳定性            | 448 |
| §3 复化求积法                      | 450 |
| 3.1 复化梯形公式                    | 450 |
| 3.2 复化 Simpson 公式             | 452 |
| 3.3 复化 Cotes 公式               | 453 |
| §4 外推积分法和 Romberg 求积公式        | 456 |
| 4.1 外推法的基本原理                  | 456 |
| 4.2 Euler - Maclaurin 求和公式    | 460 |
| 4.3 数值积分 Romberg 公式           | 463 |
| §5 Gauss 求积法                  | 467 |
| 5.1 引言                        | 467 |
| 5.2 Gauss 数值求积原理及其性质          | 469 |
| 5.3 几种常用的 Gauss 求积公式          | 474 |
| §6 重积分的数值计算                   | 480 |
| 6.1 矩形区域上的二重梯形公式              | 480 |
| 6.2 矩形区域上的二重 Simpson 公式       | 481 |
| §7 数值微分                       | 482 |
| 7.1 基于插值法的数值微分法               | 482 |

|                                 |     |
|---------------------------------|-----|
| 7.2 样条插值函数数值微分法                 | 485 |
| 7.3 化微分问题为积分问题的数值微分法            | 486 |
| § 8 问题与探索:非标准权函数的 Gauss 求积公式的构造 | 487 |
| 本章评述                            | 488 |
| 综合习题八                           | 489 |
| 数值实验八                           | 493 |
| 数值实验 8.1 复化积分法和 Gauss 积分法的比较    | 493 |
| 数值实验 8.2 数值积分法用于积分方程求解          | 493 |
| 数值实验 8.3 变步长复化求积公式的比较           | 494 |
| 数值实验 8.4 样条插值函数求积法              | 494 |
| 第九章 常微分方程初值问题数值解法               | 496 |
| § 1 引言                          | 496 |
| 1.1 解析解的理论结果                    | 496 |
| 1.2 数值求解的基本思想                   | 497 |
| § 2 简单的数值方法及其分析                 | 498 |
| 2.1 Euler 法及其几何解释               | 498 |
| 2.2 Euler 法误差分析                 | 500 |
| 2.3 其他简单单步法                     | 503 |
| 2.4 单步法的局部截断误差与阶                | 505 |
| § 3 Runge-Kutta 方法              | 508 |
| 3.1 Taylor 级数法                  | 508 |
| 3.2 RK 方法的构造                    | 510 |
| 3.3 二阶显式 RK 方法                  | 511 |
| 3.4 三阶与四阶显式 RK 方法               | 512 |
| § 4 单步法的收敛性与稳定性                 | 516 |
| 4.1 收敛性与相容性                     | 516 |
| 4.2 整体截断误差估计及其应用                | 519 |
| 4.3 绝对稳定性与绝对稳定区域                | 521 |
| § 5 线性多步法                       | 525 |
| 5.1 线性多步法的构造——数值积分法             | 525 |
| 5.2 线性多步法的构造——待定系数法             | 527 |
| 5.3 线性多步法的应用                    | 529 |
| § 6 方程组和高阶方程                    | 531 |
| 6.1 一阶方程组                       | 531 |
| 6.2 化高阶方程为一阶方程组                 | 534 |
| § 7 问题与探索                       | 535 |
| 7.1 微分方程的边值问题                   | 535 |
| 7.2 边值问题的打靶法                    | 536 |