

研究生教材

# 数值计算方法

高望东 刘淑珍 编著



大连理工大学出版社

研究生教材

# 数值计算方法

高望东 刘素珍 编著

大连理工大学出版社

(辽)新登字 16 号

## 数值计算方法

Shuzhi Jisuan Fangfa

高望东 刘素珍 编著

---

大连理工大学出版社出版发行 (邮政编码: 116024)

大连理工大学印刷厂印刷

---

开本: 850×1168 1/32 印张: 10 字数: 250 千字

1992 年 9 月第 1 版 1992 年 9 月第 1 次印刷

印数: 0001—2000 册

---

责任编辑: 凌子 封面设计: 姜严军

责任校对: 寸土

---

ISBN 7-5611-0643-2/O·92 定价: 3.30 元

# 前 言

本书是为工科专业研究生和高年级本科大学生的计算方法(数值分析)课程的教材编写的,其内容是参照1986、1988、1990年三次全国工科院校研究生《数值分析》研讨会所拟定的大纲及1991年8月国家教委关于本课程的基本要求的通知精神而选择的。

本书不仅着重介绍了电子计算机上最常用的计算方法,阐明了构造算法的基本思想与原理,而且还对算法的收敛性、稳定性及误差估计等基本知识作了必要的介绍。使读者不仅能够掌握电子计算机上最常用的计算方法,了解每种方法的针对性和局限性。从而能够根据具体问题的特点,正确地选择和使用适当的算法,而且还能够对计算结果做出必要的分析与处理。

本书的第一章,集中介绍了内积、范数、正交、距离等重要概念和压缩映射原理,还介绍了有关的误差知识,为学好本门课程打下必要的基础。本书以矩阵分解与变换为脉络讲述了线性方程组的直接解法与矩阵特征值、特征向量的计算;以迭代法为脉络讲述了线性方程组与非线性方程(组)的迭代解法,以函数近似替代为脉络讲述了插值与逼近,数值积分与微分,常微分方程与偏微分方程的数值解法。

编者力求使本书做到:选材合适,繁简相宜,概念准确,条理分明,通俗易懂但不显繁琐,重视应用又兼顾理论,使本书成为宜教宜学的教材。

本书第二、六、七章由刘淑珍执笔，其余各章由高望东执笔。

感谢大连理工大学研究生院和应用数学系领导对本书出版的大力支持，感谢熊西文教授和施吉林教授的热情鼓励与指导。

由于水平所限，书中难免有漏误之处，恳切希望读者批评指正。

编者

1992年6月

# 目 录

第一章 预 篇 .....	1
§ 1.1 线性空间与内积空间 .....	1
1.1.1 线性空间 .....	1
1.1.2 内积空间 .....	2
1.1.3 正交元素列 .....	5
§ 1.2 正交多项式 .....	7
1.2.1 正交多项式的性质 .....	7
1.2.2 Legendre 多项式 .....	10
1.2.3 Chebyshev 多项式 .....	13
§ 1.3 范数 .....	16
1.3.1 范数概念 .....	16
1.3.2 矩阵的范数 .....	18
§ 1.4 距离空间及压缩映射原理 .....	21
1.4.1 距离空间概念 .....	21
1.4.2 距离空间的完备性 .....	23
1.4.3 压缩映射原理 .....	24
§ 1.5 误差的基本知识 .....	28
1.5.1 绝对误差、相对误差及有效数字 .....	28
1.5.2 数值运算的误差估计及算法稳定性 .....	31
1.5.3 数值运算中应注意的几个问题 .....	32
习题一 .....	33
第二章 线性方程组的直接解法 .....	35
§ 2.1 Gauss 消去法 .....	36
2.1.1 直接法的基本思想 .....	36
2.1.2 Gauss 消去法 .....	37
2.1.3 Gauss 主元素消去法 .....	40
2.1.4 标度化列主元素消去法 .....	43
§ 2.2 直接三角分解法 .....	44

2.2.1	Gauss 消元过程与矩阵的三角分解 .....	44
2.2.2	不选主元的直接三角分解法 .....	49
2.2.3	选主元的直接三角分解法 .....	52
§ 2.3	追赶法与平方根法 .....	55
2.3.1	追赶法 .....	56
2.3.2	平方根法 .....	59
2.3.3	改进的平方根法 .....	61
§ 2.4	高阶带状方程组的解法 .....	64
2.4.1	带状矩阵 .....	64
2.4.2	带状矩阵的存贮 .....	65
2.4.3	对称正定带状方程组求解 .....	67
§ 2.5	矩阵求逆 .....	69
§ 2.6	方程组的性态、病态方程组的求解 .....	75
2.6.1	关于方程组解的精度 .....	75
2.6.2	矩阵的条件数 .....	75
2.6.3	方程组的性态 .....	76
2.6.4	病态方程组的求解 .....	80
小 结	.....	81
习题二	.....	82
第三章	解线性方程组的迭代法 .....	86
§ 3.1	Jacobi 迭代法及 Gauss-Seidel 迭代法 .....	86
3.1.1	Jacobi 迭代法 .....	86
3.1.2	Gauss-Seidel 迭代法 .....	88
§ 3.2	迭代法的收敛性 .....	89
3.2.1	迭代法收敛定理 .....	89
3.2.2	对角占优阵 .....	91
§ 3.3	SOR 法 .....	94
3.3.1	SOR 法 .....	94
3.3.2	SOR 法的收敛性 .....	95
§ 3.4	最速下降法及共轭斜量法 .....	97
3.4.1	线性方程组的等价问题 .....	97
3.4.2	最速下降法 .....	98

3.4.3	共轭斜量法 .....	90
§ 3.5	块迭代法 .....	102
3.5.1	方程的分组 .....	102
3.5.2	块迭代法 .....	103
小 结	.....	104
习题三	.....	104
第四章	非线性方程及非线性方程组的数值解法 .....	106
§ 4.1	区间搜索法、二分法及迭代法 .....	106
4.1.1	区间搜索法及二分法 .....	106
4.1.2	迭代法 .....	108
4.1.3	收敛阶 .....	110
4.1.4	Aitken 加速法 .....	111
§ 4.2	Newton 法、弦截法及抛物线法 .....	114
4.2.1	Newton 法 .....	114
4.2.2	Newton 下山法 .....	116
4.2.3	弦截法及抛物线法 .....	117
§ 4.3	解非线性方程组的 Newton 法 .....	119
4.3.1	Newton 法 .....	120
4.3.2	Newton 法的变形 .....	123
小 结	.....	125
习题四	.....	125
第五章	矩阵的特征值与特征向量的计算 .....	128
§ 5.1	幂法及反幂法 .....	128
5.1.1	幂法 .....	128
5.1.2	幂法的加速 .....	132
5.1.3	反幂法 .....	134
§ 5.2	Jacobi 法 .....	135
5.2.1	实对称阵的平面旋转变换 .....	136
5.2.2	古典 Jacobi 法及 Jacobi 过关法 .....	137
§ 5.3	QR 算法 .....	141
5.3.1	基本 QR 算法原理 .....	141
5.3.2	Householder 变换 .....	142



5.3.3	化一般矩阵为上 Hessenberg 阵 .....	143
5.3.4	上 Hessenberg 阵的 QR 分解 .....	146
5.3.5	带原点位移的 QR 算法 .....	148
小 结 .....		151
习题五 .....		152
第六章 插值法 .....		154
§ 6.1	Lagrange 插值 .....	155
6.1.1	代数插值多项式的存在唯一性 .....	155
6.1.2	Lagrange 插值公式 .....	156
6.1.3	插值余项 .....	158
§ 6.2	Newton 插值 .....	160
6.2.1	均差及其性质 .....	160
6.2.2	Newton 插值多项式及其余项 .....	162
6.2.3	反插值 .....	165
§ 6.3	差分及等距节点插值公式 .....	166
6.3.1	差分及其性质 .....	167
6.3.2	Newton 向前、向后插值公式 .....	168
§ 6.4	Hermite 插值 .....	172
6.4.1	Hermite 插值多项式及其余项 .....	172
6.4.2	两点三次 Hermite 插值 .....	175
§ 6.5	分段插值 .....	177
6.5.1	高次插值多项式的问题 .....	178
6.5.2	分段低次插值 .....	178
6.5.3	分段两点三次 Hermite 插值 .....	181
§ 6.6	三次样条插值 .....	183
6.6.1	三次样条插值函数的概念 .....	184
6.6.2	三次样条插值多项式 .....	185
§ 6.7	二元插值 .....	196
6.7.1	矩形网格上的插值方法 .....	197
6.6.2	分片 Lagrange 插值法 .....	200
小 结 .....		201
习题六 .....		202

第七章 函数的平方逼近 .....	205
§ 7.1 最佳平方逼近 .....	205
7.1.1 最佳平方逼近函数与法方程组 .....	205
7.1.2 在正交基下的法方程组 .....	209
§ 7.2 数据拟合的最小二乘法 .....	211
7.2.1 基本概念 .....	211
7.2.2 用代数多项式作拟合函数 .....	213
7.2.3 利用正交函数族做曲线拟合 .....	217
小 结 .....	220
习题七 .....	221
第八章 数值积分与数值微分 .....	222
§ 8.1 数值积分 .....	222
8.1.1 Newton-Cotes 公式 .....	223
8.1.2 求积公式的代数精度 .....	225
8.1.3 低阶 Newton-Cotes 公式的余项 .....	225
8.1.4 Newton-Cotes 公式的稳定性和收敛性 .....	227
§ 8.2 复化求积公式 .....	228
8.2.1 复化求积公式 .....	228
8.2.2 复化求积公式的余项 .....	230
8.2.3 步长的自动选择 .....	231
§ 8.3 Romberg 算法 .....	233
8.3.1 梯形公式递推化 .....	233
8.3.2 Romberg 算法 .....	235
8.3.3 Richardson 外推法 .....	236
§ 8.4 Gauss 型求积公式 .....	238
8.4.1 Gauss 点 .....	238
8.4.2 Gauss-Legendre 公式 .....	240
8.4.3 Gauss-Legendre 公式的使用 .....	241
8.4.4 Gauss 型求积公式的余项及稳定性 .....	242
8.4.5 带权 Gauss 型公式 .....	244
§ 8.5 数值微分 .....	245
8.5.1 插值型导数 .....	245

8.5.2	样条导数	247
	小 结	248
	习题八	248
第九章	常微分方程的数值解法	250
§ 9.1	Euler 法	250
9.1.1	前进及后退 Euler 公式	251
9.1.2	梯形公式与改进的 Euler 公式	253
9.1.3	局部截断误差与方法的精度	254
§ 9.2	Runge-Kutta 法	254
9.2.1	Taylor 级数法	255
9.2.2	Runge-Kutta 法的基本思想及一般形式	256
9.2.3	二阶 Runge-Kutta 公式推导	256
9.2.4	四阶 Runge-Kutta 公式	259
9.2.5	变步长的 Runge-Kutta 法	260
§ 9.3	线性多步法	261
9.3.1	线性多步法公式的推导	262
9.3.2	常用的线性多步法公式	264
9.3.3	线性多步法公式的使用	266
9.3.4	Hamming 方法	267
§ 9.4	常微分方程数值解法的收敛性及稳定性	268
9.4.1	数值解法的收敛性	268
9.4.2	数值解法的稳定性	270
§ 9.5	一阶微分方程组及高阶微分方程的数值解法	272
9.5.1	一阶微分方程组的数值解法	272
9.5.2	高阶微分方程的数值解法	275
§ 9.6	常微分方程边值问题的有限差分解法	277
	小 结	280
	习题九	281
第十章	偏微分方程的有限差分解法	283
§ 10.1	抛物型方程的有限差分解法	283
10.1.1	古典显式格式	284
10.1.2	古典隐式格式	285

10.1.3	六点对称格式 .....	286
§ 10.2	差分方程的稳定性与收敛性 .....	287
10.2.1	差分方程的稳定性 .....	288
10.2.2	差分方程的收敛性 .....	291
§ 10.3	双曲型方程的有限差分解法 .....	291
10.3.1	二阶双曲型方程的差分格式 .....	291
10.3.2	差分格式的稳定性及收敛性 .....	294
10.3.3	一阶双曲型方程的特征线法 .....	296
§ 10.4	椭圆型方程的有限差分解法 .....	299
10.4.1	Poisson 方程的差分格式 .....	299
10.4.2	边界条件的处理 .....	301
10.4.3	差分方程的收敛性及求解 .....	303
习题十	.....	304
参考书目	.....	307

# 第一章 预 篇

本章将扼要的介绍内积，正交，范数、距离等重要概念及压缩映射原理，为本学科打好必要的基础，并在最末一节介绍有关误差的知识。

## § 1.1 线性空间与内积空间

为了统一处理向量、矩阵及函数集合中的一些本质上一致的问题，需要把线性代数中的  $n$  维向量空间，内积及正交等概念加以推广。

### 1.1.1 线性空间

**定义 1** 设  $V$  是一个非空集合， $F$  是实（或复）数域，如果满足下列条件：

1° 在  $V$  中定义了一种叫做加法的运算（记为“+”），且  $V$  对这种运算满足封闭性，即对  $V$  中任意两个元素  $x, y$ ，按照一定的规则在  $V$  中有确定的元素  $z$  与之对应（记  $z=x+y$ ，叫做元素  $x$  与  $y$  的和）。这种加法运算还要满足下列条件，即对  $\forall x, y, z \in V$ ，有

$$(1) \quad x+y=y+x \quad (\text{交换律})$$

$$(2) \quad (x+y)+z=x+(y+z) \quad (\text{结合律})$$

(3) 存在元素  $\theta \in V$ ，使对  $\forall x \in V$ ，都有  $x+\theta=\theta+x=x$ ，（ $\theta$  叫做  $V$  的零元素）

(4) 对每个  $x \in V$ ，存在元素  $-x \in V$ ，使  $x+(-x)=\theta$ ，（ $-x$  叫做  $x$  的负元素）。

2° 在数域  $F$  与集合  $V$  之间定义了一种叫做数乘的运算，且

$V$  对这种运算满足封闭性, 即对任一个数  $\lambda \in F$  及任一个元素  $x \in V$ , 按照一定的规则, 在  $V$  中必有确定的元素  $u$  与之对应 (记  $u = \lambda x$ , 叫做  $\lambda$  与  $x$  的积)。这种数乘运算还要满足下列性质, 即对  $\forall x, y, z \in V$  及  $\forall \lambda, \mu \in F$  有

- (1)  $1 \cdot x = x$
- (2)  $(\lambda\mu)x = \lambda(\mu x)$  (关于数的结合律)
- (3)  $\lambda(x+y) = \lambda x + \lambda y$  (分配律)
- (4)  $(\lambda + \mu)x = \lambda x + \mu x$  (分配律)

则称集合  $V$  是数域  $F$  上的线性空间, 记作  $V(F)$ 。若  $F$  是实(复)数域, 则称  $V$  是实(复)线性空间。

**例 1** (1) 按照通常的  $n$  维向量之间的加法及数与向量的乘法运算,  $n$  维实(复)向量全体, 是实(复)线性空间, 记作  $R^n (C^n)$ 。

(2) 按照通常的矩阵加法及矩阵与数的乘法运算, 实(复)  $m \times n$  阶矩阵全体, 构成实(复)线性空间  $R^{m \times n} (C^{m \times n})$ 。

(3) 按照通常的函数加法及函数与数的乘法运算, 即

$$(f+g)(t) = f(t) + g(t) \quad (\forall t \in [a, b])$$

$$(\lambda f)(t) = \lambda f(t)$$

则定义在  $[a, b]$  上的实值连续函数全体  $C[a, b]$  是实线性空间。同理, 次数不超过  $n$  的实系数多项式全体  $P[x]$ , 也是实线性空间。

由于线性空间是  $n$  维向量空间的推广, 因而在一般线性空间中的许多重要概念及结论, 如线性相关及无关, 空间的维数, 基与坐标, 生成空间等等, 都与  $n$  维向量空间中相同, 而且论证方式也基本相同, 这里就不一一叙述了。

### 1.1.2 内积空间

在线性空间中, 仅规定了加法与数乘两种运算。为了应用, 有时还需引入第三种运算——内积。

**定义 2** 设  $V(F)$  是复(实)线性空间, 如果对  $V(F)$  中的

任两个元素  $x, y$ , 按照一定的规则, 有确定的数  $(x, y) \in F$  与之对应, 这种对应还要满足下列条件, 即对  $\forall x, y, z \in V(F)$  及  $\lambda \in F$ , 有

$$(1) \quad (x, x) \geq 0, \text{ 且 } (x, x) = 0 \Leftrightarrow x = \theta \text{ (零元素)}$$

$$(2) \quad (y, x) = \overline{(x, y)}$$

$$(3) \quad (\lambda x, y) = \lambda (x, y)$$

$$(4) \quad (x+y, z) = (x, z) + (y, z)$$

则称数  $(x, y)$  是元素  $x$  与  $y$  的内积。定义了内积的线性空间, 叫做内积空间, 记作  $V(F, U)$ 。

**例 2** (1) 设  $A = (a_{ij})$  是  $n$  阶实对称正定阵, 对  $\forall x, y \in C^n$ ,  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ ,  $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ , 则可规定

$$(x, y) = x^T A \bar{y} = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_i \bar{y}_j$$

若取  $A = I$ , 则有

$$(x, y) = \sum_{i=1}^n x_i \bar{y}_i$$

(2) 设  $W(x) \geq 0$  ( $\forall x \in (a, b)$ ), 而且满足条件:

$$(i) \quad \int_a^b W(x) dx > 0,$$

$$(ii) \quad \int_a^b x^n W(x) dx \text{ 存在 } (n=0, 1, \dots)$$

则称  $W(x)$  是  $[a, b]$  上的权函数。

对  $\forall f(x), g(x) \in C[a, b]$ , 可规定

$$(f, g) = \int_a^b W(x) f(x) g(x) dx$$

若取  $W(x) \equiv 1$ , 则有

$$(f, g) = \int_a^b f(x) g(x) dx$$

容易验证, 例 2 中规定的  $(x, y)$  及  $(f, g)$  都符合内积定义。由于权函数  $W(x)$  及对称正定阵  $A$  可有无穷多种取法, 因

此在同一个线性空间中，可以引入不同的内积。内积定义不同的空间，是不同的内积空间。

内积有下列主要性质：

1° 对  $\forall x_i, y_j \in V (F, U)$  及  $\forall \lambda_i, \mu_j \in C (i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, n)$  有

$$\left( \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i, \sum_{j=1}^n \mu_j y_j \right) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \lambda_i \bar{\mu}_j (x_i, y_j) \quad (1.1.1)$$

2°  $\forall x, y \in V (F, U)$ ，有

$$|(x, y)| \leq (x, x)^{\frac{1}{2}} (y, y)^{\frac{1}{2}} \quad (1.1.2)$$

证明 2° 当  $y = \theta$  时，式 (1.1.2) 显然成立；当  $y \neq \theta$  时，有  $(y, y) > 0$ 。由于对任何数  $\lambda$ ，均有

$$(x - \lambda y, x - \lambda y) \geq 0$$

取  $\lambda = \frac{(x, y)}{(y, y)}$ ，则有

$$\begin{aligned} & \left( x - \frac{(x, y)}{(y, y)} y, x - \frac{(x, y)}{(y, y)} y \right) \\ &= (x, x) - \frac{(x, y)}{(y, y)} (y, x) - \frac{\overline{(x, y)}}{(y, y)} (x, y) \\ & \quad + \frac{|(x, y)|^2}{(y, y)^2} (y, y) \\ &= (x, x) - \frac{|(x, y)|^2}{(y, y)} \geq 0 \end{aligned}$$

故得

$$|(x, y)|^2 \leq (x, x)(y, y)$$

开方得

$$\text{如记 } (x, x)^{\frac{1}{2}} = \|x\|_2, \text{ 则 (1.1.2) 式可写成} \quad |(x, y)| \leq \|x\|_2 \|y\|_2 \quad (1.1.3)$$

式 (1.1.2) 或 (1.1.3) 叫做 Cauchy 不等式，有人又叫做 Schwarz 不等式。它是一个很重要的不等式，有许多种形式，例如：

(1) 对任何的有序数组  $x_1, x_2, \dots, x_n$ ，及  $y_1, y_2, \dots, y_n$ 。若取  $x = (x_1, \dots, x_n)^T$ ， $y = (y_1, \dots, y_n)^T$ ，则有

$$\left| \sum_{i=1}^n x_i \bar{y}_i \right| \leq \left( \sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left( \sum_{i=1}^n |y_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$



如果取  $\mathbf{x} = (|x_1|, |x_2|, \dots, |x_n|)^T$ ,  $\mathbf{y} = (|y_1|, |y_2|, \dots, |y_n|)^T$ , 则可得不等式

$$\sum_{i=1}^n |x_i y_i| \leq \left( \sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left( \sum_{i=1}^n |y_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

(2) 若  $f(x), g(x) \in C[a, b]$ ,  $W(x)$  是权函数, 则有

$$\left| \int_a^b W(x) f(x) g(x) dx \right| \leq \left( \int_a^b W(x) f^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_a^b W(x) g^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

如果取  $W(x) \equiv 1$ , 则有

$$\left| \int_a^b f(x) g(x) dx \right| \leq \left( \int_a^b f^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_a^b g^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

这些不等式, 都是常用的重要不等式。

### 1.1.3 正交元素列

**定义 3** 设  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  是内积空间  $V(F, U)$  中的两个元素, 如果  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ , 则称元素  $\mathbf{x}$  与  $\mathbf{y}$  成正交。如果内积空间中的元素列  $\{\mathbf{x}_i\}$  满足

$$(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \begin{cases} 0 & (j \neq i) \\ A_i > 0 & (j = i) \end{cases}$$

则称元素列  $\{\mathbf{x}_i\}$  是正交元素列。

如果在内积空间中, 不存在与正交元素列  $\{\mathbf{x}_i\}$  中所有元素都正交的非零元素, 则称  $\{\mathbf{x}_i\}$  是完全正交元素列, 或称此正交元素列是封闭的 (或完全的)。否则, 是不完全的正交元素列。易知, 正交元素列是线性无关的。

**例 3** (1) 函数列  $1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \dots$  是  $C[-\pi, \pi]$  中的完全正交元素列, 而  $1, \cos x, \cos 2x, \dots$  也是  $C[-\pi, \pi]$  中的正交元素列, 但不是完全的。

(2)  $R^n$  中的单位坐标向量  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n$ , 是  $R^n$  中的完全正交元素列。

显然在完全正交元素列中, 去掉其中的任一个或任几个元素