新世纪高等学校教材

数学及应用数学基础课系列教材

JISUAN FANGFA DAOYIN

（第3版）

计算方法导引

北京师范大学数学科学学院 组编

陈公宁 沈嘉骥 编著

北京师范大学出版集团
BEIJING NORMAL UNIVERSITY PUBLISHING GROUP
北京师范大学出版社

新世纪高等学校教材

数学及应用数学基础课系列教材

（第3版）

计算方法导引

JISUAN FANGFA DAOYIN

陈公宁　沈嘉骥　编著

北京师范大学数学科学学院　组编

北京师范大学出版集团
BEIJING NORMAL UNIVERSITY PUBLISHING GROUP
北京师范大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

计算方法导引/陈公宁，沈嘉骥编著．－第3版－北京：北京师范大学出版社，2008.12
(新世纪高等学校教材)
ISBN 978-7-303-00277-1

Ⅰ.计…　Ⅱ.①陈…　②沈…　Ⅲ.数值计算－计算方法－高等学校－教材　Ⅳ.0241

中国版本图书馆CIP数据核字（2008）第00836号

营销中心电话　010－58802181　58808006
北师大出版社高等教育分社网　http://gaojiao.bnup.com.cn
电子信箱　beishida168@126.com

出版发行：北京师范大学出版社 www.bnup.com.cn
北京新街口外大街19号
邮政编码：100875
印　　刷：北京新丰印刷厂
经　　销：全国新华书店
开　　本：170 mm×230 mm
印　　张：20.5
字　　数：343 千字
印　　数：15 001～18 000册
版　　次：2009年1月第3版
印　　次：2009年1月第1次印刷
定　　价：31.00元

策划编辑：岳昌庆　　责任编辑：岳昌庆　潘淑琴
美术编辑：高　霞　　装帧设计：高　霞
责任校对：李　菡　　责任印制：李　丽

内容简介

本教程是根据大学数学系本科教学计划，并参照作者多年教学实践经验编写的．内容包括计算方法中最基本的知识：求解线性代数方程组的直接法与迭代法、非线性方程的数值解法、插值与逼近、数值积分与常微分方程的数值解法等．整个内容通俗易懂，深入浅出，很有可读性．除了主要作为数学与应用数学专业主干课程教材外，它还可以用作信息与计算科学专业、计算机科学专业数值分析以及业余、函授教育的教材或参考书．

北京师范大学数学科学学院简介

北京师范大学数学系成立于1922年，其前身为1915年创建的北京高等师范学校数理部，1983年成立数学与数学教育研究所，2004年成立数学科学学院．学院现有教师74人，其中教授30人，副教授24人；有博士学位的教师占91%．特别地，有中国科学院院士2人，教育部长江学者奖励计划特聘教授5人和讲座教授1人，国家杰出青年基金获得者4人，入选新世纪百千万人才工程国家级人选2人，入选教育部跨/新世纪人才培养计划7人．

学院1981年获基础数学、概率论与数理统计博士学位授予权，1986年获应用数学博士学位授予权．1988年基础数学、概率论与数理统计被评为国家级重点学科．1990年建立了我校第一个博士后流动站．1996年，数学学科成为国家211工程重点建设的学科．1997年成为国家基础科学人才培养基金基地．1998年获数学一级学科博士学位授予权．2001年概率论方向被评为数学界第1个国家自然科学基金创新群体．2005年进入"985工程"科技创新基础建设平台．2006年国家教育部数学与复杂系统重点实验室通过专家论证．2007年数学被认定为一级学科国家重点学科．学院还有基础数学、计算数学、概率论与数理统计学、应用数学、课程与教学论(数学)、科学技术史(数学)、计算机软件与理论、控制理论与控制工程8个硕士点．学院下设数学系、统计与金融数学系，有数学与应用数学、统计学2个本科专业，和《数学通报》杂志编辑部．(李仲来执笔)

2008年12月17日

第 3 版前言

1915 年北京高等师范学校成立数理部，1922 年成立数学系. 2004 年成立北京师范大学数学科学学院. 经过 90 多年的风风雨雨，数学科学学院在学科建设、人才培养和教学实践中积累了丰富的经验. 将这些经验落实并贯彻到教材编著中去是大有益处的.

作为国家重点大学的北京师范大学数学科学学院，培养人才和编写教材是两项非常重要的工作. 教材的编写是学院的基本建设之一. 学院要抓好教材建设；教师要研究教学方法. 在教材方面，学院推出一批自己的高水平教材，做到各科都有，约 50 多部.

写教材要慢一点，质量要好一点，教材修订连续化，教材出版系列化，是编写教材要注意的几项基本原则. 学院希望教材要不断地继续修改和完善，对已经出版两版的教材，我们准备继续再版. 经由北京师范大学数学科学学院李仲来教授和北京师范大学出版社高等教育分社理科编辑室梁志国主任进行协商，由北京师范大学数学科学学院主编（李仲来教授负责），准备对北京师范大学数学科学学院教师目前使用的第二版数学教材进行修订，出版第三版.

教材的建设是长期的、艰苦的任务，每一位教师在教学中要自主地开发教学资源，创造性地编写和使用教材. 学院建议：在安排教学时，应考虑同一教师在 3 年～5 年里能够稳定地上同一门课，并参与到教材的编写或修订工作中去. 在学院从事教学的大多数教师，应该在一生的教学生涯中至少以自己为主，编写或修订一种教材作为己任，并注意适时地修订或更新教材. 我们还希望使用这些教材的校内外专家学者和广大读者，提出宝贵的修改意见，使其不断改进和完善.

本套教材可供高等院校本科生、教育学院数学系、函授（数学专业）和在职中学教师等使用和参考.

北京师范大学数学科学学院

2008—08—28

第3版作者的话

在本书修订版这次再版时，除了做很多次要的修正与改进外，本版主要变更如下：在第1章中去掉§2，其大部分材料移放在附录B里. 在第2章中增添了§8关于线性方程组最小二乘解理论的简短介绍，从而压缩了第5章§6中关于曲线拟合问题的相关内容. 其所以这样做，是考虑到最小二乘问题在数值线性代数理论与应用中的重要地位与发展前景. 同时，我们将原书的第3章与第4章对调，并在求解线性方程组迭代法中增加逐次超松弛迭代法的内容分量，使得三种基本迭代法有一个较为均衡的阐述. 在每节末尾适当地增加了一些习题，其中多数是正文的或多或少的直接应用，余下的则是一些不宜列入正文的比较困难的定理或比较麻烦的算法表述. 对后者，教师讲授时可酌情取舍，但如有可能，可以简要地介绍有关的内容，并指导学生阅读其中的材料.

为方便读者，并按当前常用的办法，本书每章每节内的定义、定理、推论、例子、算法等均按出现的自然顺序排列. 如在第2章§2中有定义2.1，例2.2，定理2.3，推论2.4，算法2.5，算法2.6，例2.7，例2.8等.

作者感谢北京师范大学数学科学学院的领导，特别是李仲来教授对本次再版工作的鼓励与资金支持. 也感谢北京师范大学出版社在再版工作中精心编辑与帮助指导.

作者：陈公宁、沈嘉骥

2008年8月24日于北京师范大学数学科学学院

修订版作者的话

本书自初版问世至今已有11年整.作者了解,除了北京师范大学数学系以外,北京、河北、内蒙古、山东、湖北、福建、河南等地部分综合大学、师范院校以及部队院校曾采用过此教材,普遍反映其难易程度比较适合我国目前非计算数学专业的不同水平读者的需要.此外,整个内容通俗易懂,很有可读性.

此次修订适当地调整了各章节的结构和内容,补充了一些例题和习题,并修正了初版本错谬;力求保持原书的框架与特点.希望能被更多的兄弟院校认可与选用.

杨淳等同志先后讲授过这本教材,他们提出过十分宝贵的意见;北京师范大学计算数学教研室同仁也经常给予我们鼓励与支持.我们在此表示衷心的感谢.我们也感谢北京师范大学出版社王文湧、潘淑琴与吕建生同志在本书出版过程中给予的大力帮助.胡永建博士为本书编辑、排印工作付出巨大的劳动,使本书修订后增色不少.在此谨致谢忱.

编　者

1999年8月于北京师范大学数学系

第1版作者的话

随着电子计算机的广泛应用,计算数学近30年来有了很大的发展,它的理论与基本方法已经影响到许多学科,并在生产、管理、教学与科学研究部门得以广泛应用.本教材是根据大学本科计算方法教学大纲,并结合函授及业余进修的特点编写的.它的目的是:通过学习本课程内所介绍的一些常用的基本数值方法,读者能够了解计算数学的特点,并初步掌握数值计算的基本理论与算法,培养应用电子计算机解决实际问题的能力.

本教材考虑到各种层次的读者的需要,坚持少而精的原则,在整个内容安排上强调重点,略去一些较难的内容,如矩阵的特征值与特征向量的计算、数值微分、高斯求积公式、函数的一致逼近等.在处理每一个问题时,尽量讲明基本原理,并辅以相应的算法,必要的例题与练习题,力求在保证一定的理论严格性前提下,突出计算方法课程本身的应用价值.

本教材只要求数学分析与线性代数的初步知识作为背景材料(一些常用的结论罗列在正文后面的附录内),因而它可以用做非计算数学专业的大学本科生以及各类工程技术人员的计算方法参考书与自学或函授教材.

本教材要求讲授60学时,业余进修讲课76学时.自学者则约需140学时.

虽然本教材中的练习题基本上都可借助于小型计算器解题,但我们强调指出,凡有条件使用电子计算机者,应该尽量使用计算机算题,以便体会有关数值方法的实际应用价值,并初步掌握算题的技巧.

本教材编写过程中,袁兆鼎教授与刘贵贤副教授提出许多宝贵的意见和建议,在此谨致谢意.

编　者

1987年2月于北京师范大学数学系

目 录

第 1 章 概论/1

§1 计算方法的主要内容………………… 1

习题 1 ……………………………………… 5

§2 误差与算法稳定性问题 ………… 6

习题 2 ……………………………………… 16

第 2 章 求解线性代数方程组的直接方法/18

§1 高斯顺序消去法 …………………… 19

习题 1 ……………………………………… 28

§2 矩阵分解法………………………… 29

习题 2 ……………………………………… 38

§3 两类特殊矩阵的矩阵分解法……… 40

习题 3 ……………………………………… 49

§4 主元消去法………………………… 51

习题 4 ……………………………………… 59

§5 行列式与逆矩阵的计算 ………… 61

习题 5 ……………………………………… 65

§6 向量范数与矩阵范数 …………… 66

习题 6 ……………………………………… 75

§7 基本误差估计 ……………………… 77

习题 7 ……………………………………… 82

§8 线性方程组的最小二乘解 ………… 84

习题 8 ……………………………………… 92

第3章　求解线性代数方程组的迭代方法/95
§1　简单迭代法 …… 96
习题1 …… 104
§2　赛德尔迭代法与逐次超松弛迭代法 …… 105
习题2 …… 113
§3　一般迭代法及其收敛条件 …… 114
习题3 …… 124

第4章　非线性方程的数值解法/126
§1　不动点迭代法 …… 127
习题1 …… 138
§2　牛顿方法 …… 140
习题2 …… 150
§3　弦割法 …… 152
习题3 …… 159
§4　对分法 …… 161
习题4 …… 165

第5章　插值与逼近/166
§1　多项式插值 …… 166
习题1 …… 180
§2　埃尔米特插值与分段插值 …… 182
习题2 …… 191
§3　三次样条插值 …… 193
习题3 …… 202
§4　切比雪夫多项式及其性质 …… 204
习题4 …… 212
§5　均方逼近 …… 213
习题5 …… 219
§6　曲线拟合 …… 220
习题6 …… 227

第 6 章　数值积分/228

§1　引言 …… 228
习题 1 …… 234
§2　梯形公式、抛物线公式及其复合求积公式 …… 235
习题 2 …… 244
§3　龙贝格求积法 …… 246
习题 3 …… 253

第 7 章　常微分方程的数值解法/254

§1　引言 …… 254
习题 1 …… 261
§2　欧拉方法与改进的欧拉方法 …… 262
习题 2 …… 273
§3　龙格-库塔方法 …… 275
习题 3 …… 283
§4　线性多步法 …… 285
习题 4 …… 294
§5　数值稳定性问题简介 …… 295
习题 5 …… 301

附录 A/302

附录 B/305

常用记号表/309

参考文献/311

索引/312

第1章 概 论

本章简单地介绍计算方法课程的主要内容、误差基本概念与算法稳定性问题，为学好本课程的后面内容打下必要的基础.

§1 计算方法的主要内容

在工程技术与自然科学里，许多现象的定量分析往往可以抽象地归纳为求解特定的数学问题. 一般说来，这些数学问题不容易甚至无法求出它们的准确解，需要求助于近似方法得到问题的数值解. 让我们考虑下面的三个实例.

例 1.1 求解定积分

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x. \tag{1.1}$$

这是一个十分基本的计算问题. 但是，众所周知，除了很有限的几种类型外，对于一般的被积函数 $f(x)$，往往无法求得定积分(1.1)的精确结果. 为此，我们可以求助于所谓**数值积分**(详见第 6 章)的技巧，求得定积分的近似值. 这种办法的基本思想是用合适的有限和近似代替(1.1)式中的定积分，即

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{m} a_k f(x_k),$$

这里，$x_0, x_1, \cdots, x_m$ 是区间$[a,b]$上的某些点，$a_0, a_1, \cdots, a_m$ 是与 $f(x)$无关的常数系数.

特别地，如果选取 $x_0, x_1, \cdots, x_m$ 是区间$[a,b]$的等分点：$x_k = a + kh (k=0,1,\cdots,m)$，$h=(b-a)/m$，并且，在每一小区间$[x_k, x_{k+1}]$上(当 $f(x)\geqslant 0$ 时)用梯形面积$\frac{1}{2}h\left[f(x_k)+f(x_{k+1})\right]$ 近似表示相应区间上的定积分(见图 1.1)，

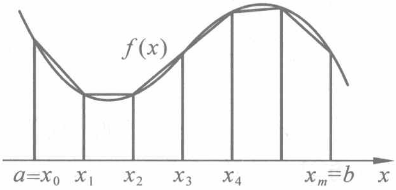

图 1.1

那么，我们便得到一种简单的数值积分方法——**复合梯形法则(梯形公式)**

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{m-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{m-1} \frac{1}{2}h[f(x_k)+f(x_{k+1})]$$
$$=\frac{1}{2}h[f(x_0)+2f(x_1)+\cdots+2f(x_{m-1})+f(x_m)]. \tag{1.2}$$

并且,可以证明(见第6章2.3小节),假如 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上二阶连续可微,则定积分(1.1)与由(1.2)式得到的近似结果之差等于

$$-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi),\quad 这里\ \xi\in(a,b), \tag{1.3}$$

因而它的绝对值不超过 $\frac{b-a}{12}h^2 \max\limits_{x\in[a,b]}|f''(x)|$. 这个结果说明,只要选取 h 足够小,便能保证(1.3)式的数值足够小,从而我们可以得出十分满意的近似答案.

例 1.2 求解非线性方程

$$f(x)=\mathrm{e}^{-x}-x=0. \tag{1.4}$$

这虽是一个简单的超越方程(因为它含有指数函数 e^{-x}),但是却无法通过有限步算术运算求其准确解. 为此,我们可以借助**迭代**计算的技巧. 给出初值 x_0 后,应用下面的计算过程(或格式):

$$x_{k+1}=\mathrm{e}^{-x_k}, \tag{1.5}$$

令 $k=0,1,2,\cdots$ 求得一串近似解 $\{x_k\}$,并希望这个数列 $\{x_k\}$ 收敛于方程(1.4)的准确解. 具体步骤如下. 先分析一下方程(1.4)准确解的大致情况. 由于 $f'(x)=-\mathrm{e}^{-x}-1<0$ 对所有实数 x 成立,故连续函数 $f(x)$ 在实轴上严格下降. 又由于 $f(0.4)>0$ 与 $f(0.7)<0$,故按介值定理(见附录A)方程(1.4)只有唯一的实根,并且,此根介于0.4与0.7之间. 然后取区间(0.4,0.7)中某个数,譬如 $x_0=0.5$ 作为初始近似解,由(1.5)式(令 $k=0$)求得 $x_1=0.606\ 531$(约定取六位小数,下同),接着,由(1.5)式(令 $k=1$)求得 $x_2=0.545\ 239$,照此"迭代"下去,我们可求得 $x_{22}=x_{23}=x_{24}=\cdots=0.567\ 143$. 因此,有理由认为 $x=0.567\ 143$ 是方程(1.4)的一个相当不错的近似解(有关讨论请见第4章§1例1.8).

例 1.3 求解一阶常微分方程初值问题:

$$\begin{cases} y'(x)=2xy(x)-2x^2+1, & 0\leqslant x\leqslant 1,\\ y(0)=1. \end{cases} \tag{1.6}$$

它的准确解为 $y(x)=\mathrm{e}^{x^2}+x$(但对一般情形,我们往往无法求得问题的准确解). 我们用所谓的**欧拉方法**(见第7章§2)求其近似解. 具体地说,求出 $y(x_0),y(x_1),\cdots,y(x_n)$ 的近似值 $y_0,y_1,\cdots,y_n$,这里,$x_0,x_1,\cdots,x_n$ 是区间 $[0,1]$ 上的某些特定的点,通常可取为等距的. 用差商近似代替微商:

$$y'(x_k)\approx(y_{k+1}-y_k)/(x_{k+1}-x_k),\quad k=0,1,\cdots,n-1,$$

于是，初值问题(1.6)就被“离散化”为如下易于求解的近似问题：

$$\frac{y_{k+1}-y_k}{x_{k+1}-x_k}=2x_ky_k-2x_k^2+1,$$
$$y_0=1,$$

它可以改写为

$$\begin{aligned}&y_{k+1}=y_k(1+2x_k(x_{k+1}-x_k))+(1-2x_k^2)(x_{k+1}-x_k),\\&y_0=1,\end{aligned}\tag{1.7}$$

这里，$k=0,1,\cdots,n-1$. 由(1.7)式取 $k=0$，可得 y_1，再取 $k=1$，应用刚求出的 y_1 可得 y_2……最后取 $k=n-1$，可得 y_n. 这些 $y_0,y_1,\cdots,y_n$ 便组成准确解 $y(x)$ 的近似解.

举个例子来说，如果 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 为区间$[0,1]$上的五等分点($n=5$)：$x_k=0.2k$，$k=0,1,\cdots,5$，那么，(1.7)式变为

$$y_{k+1}=y_k(1+0.08k)+0.2(1-0.08k^2),\quad k=0,1,\cdots,4,$$
$$y_0=1.$$

容易得出，$y_0=1.000\ 000\ 00$，$y_1=1.200\ 000\ 00$，$y_2=1.480\ 000\ 00$，$y_3=1.852\ 800\ 00$，$y_4=2.353\ 472\ 00$，$y_5=3.050\ 583\ 04$. 而在相应点处准确解 $y(x)$ 的值分别为 $y(0)=1.000\ 000\ 00$，$y(0.2)=1.240\ 810\ 77$，$y(0.4)=1.573\ 510\ 87$，$y(0.6)=2.033\ 329\ 42$，$y(0.8)=2.696\ 480\ 88$，$y(1.0)=3.718\ 181\ 83$(取小数点后八位).

上述三个例子中提到的数值积分，迭代求解非线性方程与求常微分方程初值问题的近似数值解都属于计算方法的研究内容. 一般地说，**计算方法的主要内容是研究在电子数字计算机上用于求得数学问题的数值近似解的方法与过程.**

即使从这个粗略的观点出发，我们也可以体会到计算方法确实涉及相当广泛的研究范围. 首先，与科学计算有关的数学问题是多种多样的，其最基本的类型有：求解线性代数方程组(见第 2 章与第 3 章)，求解非线性方程(见第 4 章)，代数特征值问题的计算，插值与逼近(见第 5 章)，数值微分，数值积分(见第 6 章)，常微分方程的数值解法(见第 7 章)，以及偏微分方程的数值解法等. 各种类型的问题需要有特定的且往往是一组(而不是一个)数值方法. 例如，例 1.1 中对数值积分方法只介绍了梯形法则，其实尚有抛物线法则与龙贝格求积算法等. 对各种方法除了讲明它的基本原理与基本公式以外，还要研究具体的算法以及近似解与准确解之间的“近似程度”，即所谓**误差分析问题**. 在这里传统数学，如微积分、代数与几何等的许多基本定理起着重要的作用，它们保证计算方法中许多定理在一定假设条件下是完全严格的. 例如，例 1.1 中关于复合梯形法则的误差

估计,在被积函数 $f(x)$ 二阶连续可微假设之下,如果计算都是精确进行的,那么,我们便严格地得到估计式(1.3).

其次,为了在计算机上具体实现各种算法,我们必须将计算方法与计算机软件实现以及计算实践密切联系在一起.在这点上,计算方法带有一些实验科学的特点,强调实践,强调各种技巧.例如,我们在求解问题之前总要尽力选择有效的算法,希望既节省计算机算题的费用,计算结果又能达到我们预期的精确度.但是,一般来说,在同一类型的各种算法之中,很难简单地断定哪一个是最好的,因为它们无一不受各种前提条件的制约,而这些条件往往难于简单地验明.此外,一个精确度较高的算法往往伴随着程序工作量与计算工作量较大,因而计算费用较多等问题.在这里,经验与直觉等因素经常起着重要的作用.

在本书中,我们除了介绍几类典型数学问题的数值解法的原理、公式推导以及误差估计等较为理论性的内容以外,还尽可能地将同类型的几种算法加以比较,并辅以一些实例来增强读者应用计算方法的实际能力.

最后我们还要强调指出,随着计算机的迅速发展与科学技术对本课程的推进,计算方法的具体内容在近二三十年以来有了许多变化,这主要表现在科学计算的领域进一步地扩大,特别涉及许多大系统或特大系统问题的科学计算,许多算法得到改进,新的有效的方法也不断地推出,并且有了多种关于数值算法的软件包可供用户方便使用.面对这种情况,读者应该在本书介绍的最基本的内容基础之上,不断地扩大知识面,并努力增加应用计算方法求解问题的实际训练,以适应变化发展的形势.

习 题 1

1. 试按本节*例1.1中的复合梯形法则，取$n=10$，计算定积分

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,dx$$

的近似值，并按(1.3)式估计近似值的“近似程度”.

2. 仿照例1.2的迭代方法求解非线性方程

$$\tan x = 2x \quad \left(0<x<\frac{\pi}{2}\right).$$

可取$x_0=\frac{\pi}{4}$，并迭代计算五次.

3. 仿照例1.3的欧拉方法求解下列一阶常微分方程初值问题的近似解：

$$\begin{aligned} &y'(x) = y(x) - 2\sin x, \quad 0 \leqslant x \leqslant 1, \\ &y(0) = 1. \end{aligned}$$

可取$n=5$，$h=x_{k+1}-x_k=0.2$，$k=0,1,\cdots,4$. 试将计算结果与初值问题的准确解$y(x)=\sin x+\cos x$相比较.

---

* “本节”以后省略不写. 全书同.