研究生教材

计算方法

邓建中　葛仁杰　程正兴

西安交通大学出版社

研究生教材

计算方法

邓建中　葛仁杰　程正兴

西安交通大学出版社

内 容 简 介

本书内容包括电子计算机上常用的各种数值计算方法，如插值法；最小二乘法、最佳一致逼近、数值微积分、方程求根法、线性与非线性代数方程组解法、矩阵特征值与特征向量求法、常微分方程初值问题的解法、求解数理方程定解问题的差分法、有限元法等。还包含同类书中未见的一些内容，如广义皮亚诺定理、B一样条函数、外推法及其多方面应用。书中重点讨论了各种计算方法的构造原理和使用，对稳定性、收敛性、误差估计和优缺点等也作了适应的介绍。

本书内容丰富，取材精炼；重点突出，推导详细，数值计算例子较多；内容安排由浅入深，每章都有概述、小结、复习题等，便于教学。本书可作高等工科院校非计算数学专业研究生或高年级学生教材，也可供从事数值计算的科技工作者阅读参考。

（陕）新登字 007 号

计 算 方 法

邓建中 葛仁杰 程正兴

*

西安交通大学出版社出版发行

（西安市咸宁西路 28 号 邮政编码：710049 电话：(029)2668316）

西北工业大学印刷厂印装

各地新华书店经销

*

开本：850mm×1 168mm 1/32 印张：12.375 字数：309 千字

1985 年 5 月第 1 版 2000 年 11 月第 10 次印刷

印数：47 001～49 000

ISBN 7-5605-0134-6/O·41 定价：12.00 元

研究生教材总序

研究生教育是为国家培养高层次人才的，它是我国高等教育的最高层次。研究生必须在本门学科中掌握坚实的基础理论和系统的专门知识，具有从事科学研究或担负专门技术工作的能力。这些要求具体体现在研究生的学位课程和学位论文中。

认真建设好研究生学位课程是搞好研究生教学的重要环节。为此，我们组织出版这套以公共课和一批新型学位课程为主的研究生教材，以满足当前研究生教学的需要。这套教材的作者都是多年从事教学、科研、具有丰富经验的教师。

这套教材首先着眼于研究生未来工作和高技术发展的需要，充分反映国内外最新学术动态，使研究生学习之后能迅速接近当前科技发展的前沿，以适应“四化”建设的要求；其次，也注意到应有的基本理论和基本内容，以保持学位课程内容的相对稳定性和系统性，并具有足够的深广度。

这套研究生教材虽然从提出选题、拟定大纲、组织编写到编辑出版，都经过了认真的调查论证和细致的工作，但毕竟是第一次出版这样高层次的系列教材，水平和经验都感不足，缺点和错误在所难免。希望通过反复的教学实践，广泛听取校内外专家学者和使用者的意见，使其不断改进和完善。

西安交通大学研究生院
西安交通大学出版社

序　言

在现代科学研究与工程设计中，电子计算机已成为不可缺少的有力工具。学习计算机常用数值计算方法的知识，已构成现代科学教育的一部分。出版一批相应的教材，是十分必要的。

数值计算的领域极其广泛，求解各类问题的计算方法又多种多样。纷繁的内容一度使“计算方法”成为本校和兄弟院校的头痛课程。本书旨在解决这一问题，并获得了初步成效。目前，“计算方法”已成为本校工科研究生和高年级学生中颇受欢迎的一门课程。

本书的作者们都具有二十多年的教学经验，还是一些科研论文、科学专著和教材的作者。本书内容广泛，取材适当；重点突出，强调算法的构造和应用；推导详细，数值计算例题较多；注意教学法，讲述由浅入深，每章有概述和小结。书中还包含了作者们的科研成果，这些成果的引入，有助于简化推导，提高计算效果。

我们向现在和未来的广大科技工作者，推荐这本书。

游兆永

1985，2，15

前　言

在科学研究与工程设计中，电子计算机的应用日益广泛。面对一个数值计算课题，怎样选择与使用适当的计算方法，怎样估计计算结果的误差，怎样解释计算过程中的异常现象，自然成为广大科技工作者迫切需要解决的问题。由于这一原因，现在各大专院校非计算数学专业的研究生和高年级学生，已普遍学习“计算方法”课程。本书就是在本校工科研究生和应用数学、力学、计算机、软件等专业学生中讲授此课程的基础上形成的。本书初稿已在本校和兄弟院校中使用过多遍，教学效果良好。

本书的读者对象是高等学校非计算数学专业高年级学生、研究生和相当程度的科技人员。读者学习“计算方法”的目的，主要是为了掌握科学研究与工程设计的一种有力工具。他们不可能花费过多的学习时间，然而计算方法的内容却又十分丰富：它所研究的数值计算问题种类繁多；一类问题的解法多种多样；对一种解法，为保证其可靠性，又需进行一系列的理论性讨论。因此，本书力求全面系统地介绍各类数值计算问题的解法，同时又不得不有所取舍，只介绍那些常见问题的最常用而且最基本的计算方法。我们认为，只要牢固掌握了计算方法的基础，便不难阅读专门著作，学习更新、更广、更深的内容。

本书重点介绍电子计算机常用的基本计算方法的构造和使用；同时对计算方法的工作量、稳定性、收敛性、误差估计、适用范围及优缺点等也作适当的分析。前者是基础，懂得了它，才能分析，才会创新。分析的目的，是为了使用，是为了使读者面临具体问题时，能选择或创造最适宜的解法；并在使用一种解法时，能对计算结果的可靠程度以及计算过程中可能产生的现象，

预先有清醒的估计。为了保证重点，本书对各种解法作了比较详细的推导，列举了较多的数值计算实例，并在第一章及各章的开头和末尾，作了简要的概述和小结。本书没有涉及计算机程序或框图。我们认为，只要真正理解一种计算方法的实质，便不难自己编写计算机程序。我们的目标，是使读者对计算方法的构造和用法，有较深切的体会。本书的叙述，采取了由简到繁、由个别到一般的方法，避免复杂化；例题与习题的选择，力求典型，数值计算简单，便于验证。

本书还包含了同类书中未见的一些内容，如广义皮亚诺定理、B-样条函数、外推法及其在某些问题中的应用。这些内容取自作者的科研论文或专著，有助于简化推导，提高计算效果。

根据我们的教学实践，除B-样条函数、QR算法、波动方程差分格式稳定性的理论外，本书内容可在72学时内学完。根据不同专业的需要，删去部分内容，也可适用于40～60学时的教学需要。

本书第一、八、九、十章由邓建中编写，第二、六、七章由葛仁杰编写，第三、四、五章由程正兴编写。由于水平有限，缺点与错误在所难免，恳请读者批评指正。

本书由游兆永教授主审。在本书的编写、使用、修改过程中，游兆永教授和本校计算数学教研室的同志们提供了许多宝贵的意见，陕西科学技术出版社曾给予热情鼓励，本校研究生院和西安交通大学出版社给予了巨大的帮助和支持，在此谨表示衷心感谢。

编　者

1985年2月

于西安交通大学

作者之一邓建中

作者简介

邓建中　1962年毕业于西安交通大学．现任西安交通大学计算数学教研室主任、副教授．著有《外推法及其应用》(上海科技出版社计算数学丛书之一)，目前主要研究外推法，微分方程数值解．

葛仁杰　1963年毕业于西安交通大学．现任西安交通大学数学系教授．是高等教育出版社出版、西安交通大学编的《高等数学》编者之一．目前主要研究数值代数．

程正兴　1964年毕业于西北大学，1981年获西安交通大学理学硕士．现任西安交通大学数学系副教授，著有《数据拟合》，合译著作《样条理论及其应用》及《线性代数与解析几何基础》，并在学术刊物上发表过15篇论文．目前主要研究样条函数、计算机辅助几何设计、计算机图学．

目　　录

第一章　计算方法的一般概念

§1　计算方法的意义、内容与方法

数学是研究数与形的科学。其中研究怎样利用手指、算盘、算尺、计算器、计算机等工具，来求出数学问题数值解答的学问，就是计算方法，或称计算数学、数值数学。它是数学中最古老的部分。但在电子计算机出现前，由于计算工具的笨拙和数值计算的繁难，人们往往回避复杂的计算，致使计算方法发展很缓慢，在高等学校的课程表上看不到它的名字。

1946年电子数字计算机的诞生，是计算数学史以至人类文明史的一个里程碑。它使人类获得了高速度、自动化的计算工具，它为众多浩繁的数值计算问题的解决，展现了光明的前景。从此，科学研究与工程设计的手段，发生了由模型试验向数值计算的巨大转变。自动化、最优化设计应运而生。计算物理、计算力学、计算化学、计算生物学、计算经济学等边缘学科相继出现。这样的形势，自然要促进计算数学的迅速发展和更新，促使计算数学课程在高等学校里普遍开设。本书的编写，就是为了适应工科研究生、非计算数学专业高年级学生和科技工作者学习、掌握现代电子数字计算机上常用数值计算方法的需要。

计算数学研究什么？

1.　构造计算机能用的算法

电子计算机实质上只会做加减乘除等基本运算。研究怎样通过计算机所能执行的基本运算，求得各类问题的数值解或近似数值解，就是计算数学的根本课题。由基本运算及运算顺序的规定

所构成的完整的解题步骤，称为**算法**。计算数学的根本任务，也可说是研究算法。

有许多数学问题的解，不可能经过有限次算术运算计算出来。例如要计算任意角的三角函数值，求一般方程的根，计算任意函数的积分，求一般微分方程的解。对于这类问题，计算数学常常采用近似替代的办法。

例如已知角的弧度 x 在 0 与 $\pi/4$ 之间，要计算 $\sin x$ 的值。根据微分学的泰勒（Taylor）公式

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + R_{2n+1}(x).$$

由于计算多项式的值只用到算术运算，而且当 n 充分大时，余项 $R_{2n+1}(x)$ 的数值很小，我们便可用上式右边前面的 $2n+1$ 次多项式来近似替代 $\sin x$，把这多项式的值当作 $\sin x$ 的值，得到计算 $\sin x$ 的近似公式

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}.$$

当然，这不是最好的近似计算公式。这公式在 $x=0$ 的邻域近似程度较高，但在其它地方公式两边相差较大。近似值与真正值之差称为该近似值的误差。理想的公式，应使误差在整个区间 $[0,\pi/4]$ 上都很小。计算机常用标准函数，就是按这种“理想”公式计算的。

又如求非线性方程 $f(x)=0$ 的根。一般说方程很难求解。但如已知根的粗略近似值为 x_0，据泰勒级数

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \cdots,$$

取等式右边前二项近似替代 $f(x)$，就会得到很容易求解的线性方程

$$f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) = 0.$$

把解出的 x 记为 x_1，有

$$x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0).$$

x_1虽然不一定是根，但往往比x_0更接近于根。用x_1代替上面的x_0，进行类似计算，即可得x_2。如此继续下去，往往可得一系列越来越接近根的近似值x_1，x_2，x_3，…，其中

$$x_{n+1}=x_n-f(x_n)/f'(x_n)。\tag{1-1}$$

这种求根法称为**牛顿迭代法**。以具体方程$x^2-2=0$为例，公式(1-1)成为

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n^2-2}{2x_n}=\frac{1}{2}\left(x_n+\frac{2}{x_n}\right)。$$

取$x_0=1.4$，按上式计算得$x_1=1.414285714$，$x_2=1.414213564$，可见越来越接近根$\sqrt{2}$（$=1.41421356237\cdots$）。

再如求解常微分方程的初值问题

$$\begin{cases} y'=f(x,y), & a\leqslant x\leqslant b, \\ y(a)=y_0 . \end{cases}\tag{1-2}$$

通常无法求出区间$[a, b]$上解$y(x)$的解析表示式。但实际问题往往只需算出它在某些点的近似值，如$x_n=a+nh$($n=0,1,\cdots,N$，$h=(b-a)/N$)处的近似值$y_n\approx y(x_n)$。据式(1-2)，在这些点

$$y'(x_n)=f(x_n, y(x_n)),\ n=0,1,\cdots, N。\tag{1-3}$$

由于

$$y'(x_n)=\lim_{h\to 0}\frac{y(x_{n+1})-y(x_n)}{h},$$

我们用差商$[y(x_{n+1})-y(x_n)]/h$近似替代式(1-3)中的微商（导数）$y'(x_n)$，用y_n近似替代$y(x_n)$，得到

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{h}=f(x_n, y_n),\quad n=0,1,\cdots N-1。\tag{1-4}$$

从而有

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n, y_n),\quad n=0,1,\cdots,N-1。\tag{1-5}$$

这样，由已知值y_0出发，便可逐步算出y_1，y_2，…，y_N。这种求问题(1-2)解近似值的方法，称为**欧拉(Euler)折线法**。以具