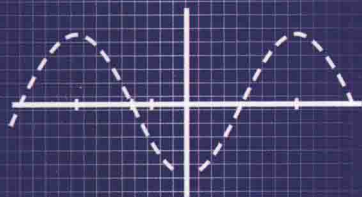




高等教育“十二五”规划教材

计算方法及程序实现

主编 刘华莹



科学出版社

高等教育“十二五”规划教材

计算方法及程序实现

主编 刘华荃

副主编 吴雅娟 杨 永

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书重点介绍现代工程技术中计算机上常用的行之有效的数值方法及程序实现,包括绪论、非线性方程的数值解法、线性代数计算方法、插值与拟合、数值微积分、常微分方程初值问题的数值解法以及算法的程序实现共7章。全书内容精炼、深入浅出、循序渐进,前6章均配有适量的例题和习题,对于每个重要的数值计算方法都给出了便于编程的算法。第7章给出了各经典算法的C语言、VB语言和MATLAB的程序实现。

本书可作为高等工科院校计算方法课程的教材,也可作为成人教育的教材和工程技术人员的自学参考书。

图书在版编目(CIP)数据

计算方法及程序实现/刘华莹主编. —北京: 科学出版社, 2015
(高等教育“十二五”规划教材)

ISBN 978-03-045416-4

I. ①计… II. ①刘… III. ①数值计算—程序设计—高等学校—教材
IV. ①O241 ②TP311.1

中国版本图书馆CIP数据核字(2015)第195650号

责任编辑: 宋 丽 王 为 / 责任校对: 马英菊
责任印制: 吕春珉 / 封面设计: 东方人华平面设计部

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

百善印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015年8月第 一 版 开本: 787×1092 1/16

2015年8月第一次印刷 印张: 11

字数: 257 000

定价: 22.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换〈百善〉)

销售部电话 010-62134988 编辑部电话 010-62135120-2005

版权所有 侵权必究

举报电话: 010-64030229; 010-64034315; 13501151303

前 言

随着科学技术的发展,科学与工程计算已经成为平行于理论分析和科学实验的第三种科学研究手段,而计算方法这门课程就是针对科学与工程计算过程中必不可少的环节——数值计算过程而设立的。本课程研究用计算机解决数学问题的数值方法和理论。目前,各高等工科院校已普遍开设计算方法课程,本书就是为此而编写的。

本书是编者根据多年的教学实践编写而成,其宗旨是向读者介绍有关数值计算方面的基础理论与方法及各经典算法的程序实现。本书内容精炼,侧重于计算机上常用算法的描述与实现,致力于培养数值计算工作者分析问题与解决问题的能力。

本书由刘华荃担任主编,吴雅娟和杨永担任副主编。第1、3、6章由刘华荃编写,第2、4、5章由杨永编写,第7章由吴雅娟编写。本书的授课学时为48~64学时(含上机),教师可以根据授课对象和教学需要选讲部分内容,但作为一门完整的课程体系,选学的内容应由学生自学完成。

在本书的编写过程中,得到了东北石油大学计算机基础教育系的老师们的指导与帮助,在此我们表示诚挚的感谢。

由于编者水平有限,书中难免有不足之处,恳请广大读者批评指正。

编 者

2015年6月

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 计算方法的研究内容与意义	1
1.2 误差	1
1.2.1 误差的主要来源	1
1.2.2 误差的基本概念	2
1.3 数值方法的稳定性与算法设计原则	4
习题 1	6
第 2 章 非线性方程的数值解法	8
2.1 根的隔离	8
2.1.1 试值法	8
2.1.2 作图法	9
2.1.3 扫描法	9
2.2 根的精确化	9
2.2.1 对分法	9
2.2.2 迭代法	10
2.2.3 牛顿法	14
2.2.4 弦割法	16
习题 2	18
第 3 章 线性代数计算方法	19
3.1 高斯消去法	19
3.1.1 三角形方程组的解法	19
3.1.2 高斯消去法	20
3.1.3 主元素消去法	23
3.1.4 用列主元高斯消去法求行列式值	26
3.2 高斯-约当消去法	26
3.2.1 高斯-约当消去法的计算	26
3.2.2 逆矩阵的计算	28
3.3 矩阵的 LU 分解	30
3.3.1 高斯消去法与矩阵的 LU 分解	30
3.3.2 直接 LU 分解	31

3.4	追赶法	35
3.5	迭代法	38
3.5.1	向量范数和矩阵范数	38
3.5.2	迭代法的一般形式	41
3.5.3	雅可比迭代法	41
3.5.4	高斯-塞德尔迭代法	44
3.5.5	迭代法的收敛性	46
3.5.6	逐次超松弛迭代法	50
3.6	矩阵的特征值与特征向量的计算方法	51
3.6.1	乘幂法	52
3.6.2	原点位移法	55
3.6.3	反幂法	56
	习题 3	58
第 4 章	插值与拟合	61
4.1	插值法概述	61
4.1.1	插值法基本概念	61
4.1.2	代数插值多项式的存在唯一性	61
4.2	线性插值与二次插值	62
4.2.1	线性插值	62
4.2.2	二次插值	63
4.3	拉格朗日插值多项式	64
4.3.1	拉格朗日插值多项式的定义	64
4.3.2	插值多项式的余项	66
4.4	均差与牛顿基本插值公式	67
4.4.1	均差、均差表及均差性质	67
4.4.2	牛顿基本插值公式	70
4.4.3	均差插值多项式的余项	72
4.5	差分与等距节点插值公式	72
4.5.1	差分与差分表	72
4.5.2	等距节点插值公式	74
4.6	分段低次插值	76
4.6.1	高次插值的缺陷	76
4.6.2	分段线性插值	77
4.6.3	分段埃尔米特插值	78
4.7	三次样条插值	80
4.7.1	三次样条插值的定义	81
4.7.2	用节点处的二阶导数值表示的三次样条函数	81

4.8 最小二乘法与曲线拟合	84
4.8.1 最小二乘法	85
4.8.2 多项式拟合	87
4.8.3 幂函数型、指数函数型经验公式	90
习题 4	92
第 5 章 数值微积分	95
5.1 牛顿-柯特斯公式	95
5.1.1 牛顿-柯特斯公式的推导	95
5.1.2 低阶牛顿-柯特斯公式的误差分析	98
5.1.3 牛顿-柯特斯公式的稳定性	99
5.2 复合求积公式	100
5.2.1 复合牛顿-柯特斯公式	100
5.2.2 复合求积公式的余项	101
5.3 变步长求积公式	103
5.3.1 变步长求积公式的推导	103
5.3.2 变步长梯形公式算法	104
5.4 龙贝格求积公式	105
5.5 数值微分	109
5.5.1 插值型求导公式	109
5.5.2 样条求导公式	111
习题 5	112
第 6 章 常微分方程初值问题的数值解法	114
6.1 欧拉方法	114
6.1.1 欧拉方法的推导	114
6.1.2 改进的欧拉方法	115
6.1.3 局部截断误差和方法的阶	116
6.2 龙格-库塔方法	118
6.2.1 龙格-库塔方法的基本思想和一般形式	118
6.2.2 二阶龙格-库塔方法	118
6.2.3 四阶龙格-库塔方法	120
6.2.4 变步长的四阶龙格-库塔方法	121
6.3 线性多步法	122
6.3.1 线性多步法的计算公式	122
6.3.2 阿达姆斯方法	122
6.4 一阶常微分方程组和高阶常微分方程的数值解法	125
6.4.1 一阶常微分方程组的数值解法	125

6.4.2 高阶常微分方程的数值解法	126
习题 6	127
第 7 章 算法的程序实现	129
7.1 秦九韶算法和对分法	129
7.2 牛顿法和弦割法	134
7.3 线性方程组的直接法	136
7.4 线性方程组的迭代法	143
7.5 拉格朗日插值和牛顿基本插值	147
7.6 曲线拟合	152
7.7 数值积分	156
7.8 常微分方程初值问题的数值解法	162
参考文献	165

第 1 章 绪 论

1.1 计算方法的研究内容与意义

随着科学技术的发展,科学与工程计算已被推向科学活动的前沿,它与实验、理论三足鼎立,相辅相成,成为人类科学活动的三大方法之一。因此,熟练地运用电子计算机进行科学计算,已成为科技工作者的一项基本技能。

一般来讲,用计算机解决科学计算问题需要经历如下过程:

实际问题→数学模型→数值计算方法→程序设计→上机计算求出结果

由此可见,计算方法这门课程就是针对科学与工程计算过程中必不可少的环节——数值计算过程而设立的,用于研究用计算机解决数学问题的数值方法和理论。它以纯数学为基础,着重研究解决问题的数值方法的效果,如计算速度、存储量、收敛性、稳定性及误差分析等。

除性质论证外,在实际问题中人们主要关心的是问题的解,包括解析解和数值解。解析解固然很重要,但不是任何时候都能获得的。例如,定积分 $I = \int_a^b e^{-x^2} dx$, 其中的被积函数 $f(x) = e^{-x^2}$ 没有有限形式的原函数 $F(x)$, 因此不能用牛顿-莱布尼茨公式求其值, 而从应用的角度看能得到数值解也就够了, 故可用某种数值计算方法求出 I 的满足一定精度要求的近似解。再如 20 阶线性方程组 $Ax=b$, 若系数矩阵 A 非奇异, 则用克莱默 (Cramer) 法则可求得其精确解, 但该方法的乘除法运算次数为 9.7×10^{20} 次, 用 1 亿次/s 的计算机计算也要 30 万年, 说明用该方法解此问题是行不通的; 而若采用某种解线性方程组的数值方法, 如列主元高斯消去法, 虽然只能求得近似的数值解, 但其乘除法运算次数为 2670 次, 即使用普通计算机计算也只需几秒。可见, 研究实用的数值方法是很有意义的。

1.2 误 差

一般来讲, 数值计算都是近似计算, 求得的结果都是有误差的, 因此误差分析和估计是数值计算过程中的重要内容, 通过它们可以确切地知道误差的性态和误差的界。

1.2.1 误差的主要来源

近似值与准确值之差, 称为误差。按其来源, 可分为模型误差、测量误差、截断误差和舍入误差等。

1. 模型误差

建立数学模型时, 往往要忽略很多次要因素, 把模型简单化、理想化, 这时模型与

真实背景之间就有了误差，这种误差称为模型误差。

2. 测量误差

数学模型中的已知参数，多数是通过测量得到的，而测量过程受工具、方法、观测者的主观因素、测量时随机因素的干扰等影响，必然存在误差，这种误差称为测量误差。

3. 截断误差

数学模型中的表达式一般都很复杂，常用易于计算的近似公式来代替。原来表达式的准确值与近似公式的准确值之差称为截断误差。这类误差往往是在用一个有限过程逼近无限过程的时候产生的。例如，函数 e^x 可展开为

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots$$

若用 $1 + x + \frac{x^2}{2!}$ 代替 e^x ，则其截断误差为 $\frac{x^3}{3!}e^{\theta x}$ ($0 < \theta < 1$)。降低截断误差通常要以增大运算量（如在近似公式中多取几项）作为代价。

4. 舍入误差

用计算机做数值计算时，由于计算机的字长有限，当某数据的位数超过计算机所能表示的位数时，就要进行舍入，由此产生的误差称为舍入误差。例如，用 3.14159 代替 π ，用 1.414 代替 $\sqrt{2}$ ，等等。

一般情况下，每一步的舍入误差是微不足道的，但是经过计算过程的传播和积累，舍入误差也可能对真值产生很大的影响。

误差的来源虽然有以上种种，但是前两种误差往往不是计算工作者所能独立解决的，因此，在计算方法课程中一般只讨论后两种误差，即截断误差和舍入误差。

1.2.2 误差的基本概念

定义 1.1 设 x 为准确值， x^* 为其近似值，称 $E = x - x^*$ 为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。

在实际问题中， x 不能确知，故而 E 的准确值无法求出，只能估计出 $|E|$ 的上界 ε ，即

$$|E| = |x - x^*| \leq \varepsilon$$

ε 称为 x^* 的绝对误差限，简称误差限，也叫精度。由误差限 ε 可知准确值 x 的范围

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

在工程中常记为

$$x = x^* \pm \varepsilon$$

对同一个准确值 x 而言，误差限 ε 越小，近似值 x^* 就越精确；然而对于不同的准确值 x 和 y ，误差限 ε 的大小就不能完全反映出近似值 x^* 和 y^* 哪个更精确。例如，有 $x = 10 \pm 1$ 和 $y = 10000 \pm 5$ ，其中 x 和 y 的近似值分别为 $x^* = 10$ 和 $y^* = 10000$ ，相应的误差限 ε 分

别为 1 和 5。从误差限来看,前者小后者大,但是,不能简单地认为 x^* 比 y^* 精确度更高,还应考虑准确值的大小。

定义 1.2 近似值 x^* 的误差与其准确值 x 之比

$$E_r = \frac{E}{x} = \frac{x - x^*}{x}$$

称为近似值 x^* 的相对误差。

相对误差绝对值的任一个上界 ε_r 均称为相对误差限,即

$$|E_r| = \frac{|x - x^*|}{|x|} \leq \frac{\varepsilon}{|x|} = \varepsilon_r$$

实际计算时,准确值 x 往往不知道,故而常用 $E_r^* = \frac{E}{x^*}$ 代替相对误差 E_r , 用 $\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon}{|x^*|}$

代替相对误差限 ε_r 。

根据定义 1.2, 近似值 $x^*=10$ 和 $y^*=10000$ 的相对误差限 ε_r^* 分别为 $\frac{1}{10}=0.1$ 和 $\frac{5}{10000}=0.0005$, 由此可见, y^* 近似 y 的程度比 x^* 近似 x 的程度好得多。

例 1.1 已知 $e=2.71828182\cdots$, 求其近似值 $e^*=2.71828$ 的绝对误差限 ε 和相对误差限 ε_r^* 。

解 $E=e-e^*=0.00000182\cdots$, 故 $|E|=0.00000182\cdots<0.000002=2\times 10^{-6}=\varepsilon$, 于是

$$\frac{\varepsilon}{|e^*|} = \frac{0.000002}{2.71828} \approx 0.704 \times 10^{-6} < 0.71 \times 10^{-6} = \varepsilon_r^*$$

显然,也可将绝对误差限 ε 取为 3×10^{-6} 或 1.9×10^{-6} 或其他,相对误差限 ε_r^* 亦可取为 0.8×10^{-6} 或 10^{-6} 或其他,即绝对误差限 ε 和相对误差限 ε_r^* 都是不唯一的,这是由于一个数的上界不唯一所致。

定义 1.3 设 x^* 是准确值 x 的一个近似值,把它写成规格化形式

$$x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n a_{n+1} \cdots a_m \times 10^k \quad (1.1)$$

其中 $a_i (i=1,2,\cdots,m)$ 为 $0\sim 9$ 中的某个数字,且 $a_1 \neq 0$ 。若 x^* 的绝对误差 E 满足

$$|E| = |x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{k-n}$$

则称 x^* 有 n 位有效数字 $a_1, a_2, \cdots, a_n$ 。

由定义 1.3 可知,如果 x^* 的误差限是其某一数位的半个单位,则从 x^* 左边第一个非零数字起,到这一位数字止,都是该数的有效数字。例如, $\pi=3.14159265\cdots$, 其近似值 3.14 和 3.1416 分别有 3 位和 5 位有效数字,而 3.14365 也只是 π 的有 3 位有效数字的近似值。

一般地,如果认为计算结果各数位可靠,将它四舍五入到某一位,由于四舍五入的原因,舍入后的值与计算结果之差必不超过该数位的半个单位。设从左边第一个非零数字起,到这一位数字止,共有 n 位数字,则这 n 位数字皆为有效数字。因此习惯上说将

计算结果保留 n 位有效数字。例如, 在计算机上算得方程 $x^3 - x - 1 = 0$ 的一个正根为 1.32472, 则保留 4 位有效数字的结果为 1.325, 保留 5 位有效数字的结果为 1.3247。

相对误差与有效数字位数的关系十分密切, 有以下定理。

定理 1.1 设 x^* 是准确值 x 的某个近似值, 其规格化形式为式 (1.1)。

(1) 若 x^* 具有 n 位有效数字, 则 x^* 的相对误差 E_r^* 满足

$$|E_r^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-n+1}$$

(2) 若 x^* 的相对误差 E_r^* 满足

$$|E_r^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-n}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字。

证 $10^{k-1} = 0.1 \times 10^k \leq |x^*| \leq 10^k$, 于是有:

(1) 若 x^* 具有 n 位有效数字, 则

$$\frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{k-n}}{10^{k-1}} = \frac{1}{2} \times 10^{-n+1}$$

即 $|E_r^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-n+1}$ 。

(2) 若 $|E_r^*| = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{1}{2} \times 10^{-n}$, 则

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-n} \times |x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-n} \times 10^k = \frac{1}{2} \times 10^{k-n}$$

于是 x^* 至少具有 n 位有效数字。

该定理表明, 近似值的有效数字位数越多, 则其相对误差限越小; 反之, 相对误差限越小, 则其有效数字位数越多。

以下如无特别申明, 对写出的具有有限位数字的数, 从其左边第一个非零数字到最后一位数字, 都认为是有效数字。

1.3 数值方法的稳定性与算法设计原则

对于一个数值方法, 若原始数据或某一步有舍入误差, 但在执行的过程中这些误差能得到控制 (即误差不会放大或不影响结果的精度要求), 则称该数值方法是稳定的, 否则便称为是不稳定的。稳定的数值方法可以保证由原始数据的小误差引起的计算结果的误差也很小。

例 1.2 计算积分

$$I_n = \frac{1}{e} \int_0^1 x^n e^x dx \quad (n = 0, 1, 2, \dots, 9)$$

$$\text{解} \quad I_n = \frac{1}{e} \int_0^1 x^n e^x dx = \frac{1}{e} \left(x^n e^x \Big|_0^1 - \int_0^1 n x^{n-1} e^x dx \right) = 1 - n \cdot \frac{1}{e} \int_0^1 x^{n-1} e^x dx$$

即

$$I_n = 1 - n I_{n-1} \quad (1.2)$$

(1) 先计算 I_0 , 然后使用递推公式 (1.2) 依次计算 $I_1, I_2, \dots, I_9$ 。

设计算值 I_n^* 的误差为 $E(I_n^*) (n=0, 1, 2, \dots, 9)$ 。易证, 若 $|E(I_0^*)| = \delta$, 则

$$|E(I_1^*)| = \delta, |E(I_2^*)| = 2!\delta, \dots, |E(I_9^*)| = 9!\delta$$

由此可见, 若计算 I_0 时产生了误差, 则用该方法计算 I_9 时将误差放大了 $9! = 362880$ 倍, 因此该数值方法不可取。

(2) 先计算 I_9 , 然后用由式 (1.2) 得到的递推公式 $I_{n-1} = \frac{1 - I_n}{n}$ 计算 $I_8, I_7, \dots, I_0$ 。

显然, 若在计算 I_9 时产生误差 $|E(I_9^*)| = \eta$, 则用该方法计算 I_0 时的误差为 $|E(I_0^*)| = \frac{\eta}{9!}$ 。

由此可知, 使用该方法计算时不会放大舍入误差, 所以该数值方法是稳定的。

为了求得满意的数值解, 在选用数值方法和设计算法时, 都应注意以下原则:

(1) 防止大数“吃掉”小数。在数值运算中参加运算的数有时数量级相差很大, 而计算机位数有限, 如不注意运算次序就可能出现大数“吃掉”小数的现象, 从而影响计算结果的可靠性。

(2) 避免两个相近数相减。在计算中两个相近数相减, 有效数字的位数会严重损失, 因此, 如果在算法分析中发现有可能出现这类运算, 最好的办法是改变计算公式。例如, $\sqrt{x+1} - \sqrt{x} (x \gg 1)$ 可改成 $\frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}$ 来计算。

(3) 避免大数作乘数和小数作除数。当用一个绝对值很大的数乘一个有误差的数时, 积的误差就会被乘数的误差大很多倍; 类似地, 在进行除法运算时, 如果除数的绝对值太小, 则商的误差就会比被除数的误差大很多倍。因此, 在算法设计中, 要尽可能避免出现这类运算。

(4) 减少运算次数, 避免误差积累。一般说来, 运算次数越多, 中间过程的舍入误差积累越大。因此, 同样一个计算问题, 如果能减少运算次数, 不仅可以提高计算速度, 还能减少舍入误差的积累。

例 1.3 在五位十进制计算机上, 计算

$$A = 52492 + \sum_{i=1}^{1000} \delta_i$$

其中 $0.1 \leq \delta_i \leq 0.9$ 。

解 把参与运算的数写成规格化形式

$$A = 0.52492 \times 10^5 + \sum_{i=1}^{1000} \delta_i$$

在计算机内计算时要对阶, 设 $\delta_i = 0.a_1^{(i)} a_2^{(i)} \dots a_{n_i}^{(i)}$, 则对阶时

$$\delta_i = 0.00000a_1^{(i)}a_2^{(i)}\cdots a_{n_i}^{(i)} \times 10^5$$

在五位的计算机中表示为机器零, 因此

$$A = 0.52492 \times 10^5 + 0.00000a_1^{(1)}\cdots a_{n_1}^{(1)} \times 10^5 + \cdots + 0.00000a_1^{(1000)}\cdots a_{n_{1000}}^{(1000)} \times 10^5$$

$$\stackrel{\Delta}{=} 0.52492 \times 10^5 \quad (\text{符号} \stackrel{\Delta}{=} \text{表示机器中相等})$$

$$= 52492$$

结果显然不可靠, 这是由于运算中大数 52492 “吃掉”了小数 δ_i ($i=1, 2, \cdots, 1000$) 造成的。如果在连加中将小数放在前面, 即先加小数, 然后由小到大逐次相加, 则能对和的精度作适当改善。在例 1.3 中, 将计算次序改为

$$\sum_{i=1}^{1000} \delta_i + 52492$$

由于

$$0.1 \times 10^3 \leq \sum_{i=1}^{1000} \delta_i \leq 0.9 \times 10^3$$

故而

$$0.001 \times 10^5 + 0.52492 \times 10^5 \leq A \leq 0.009 \times 10^5 + 0.52492 \times 10^5$$

即

$$52592 \leq A \leq 53392$$

计算结果的精度有了较大的改善。

例 1.4 计算 x^{255} 。

解 (1) 如果直接计算 x^{255} , 需进行 254 次乘法运算;

(2) 若用公式 $x^{255} = x \cdot x^2 \cdot x^4 \cdot x^8 \cdot x^{16} \cdot x^{32} \cdot x^{64} \cdot x^{128}$ 计算, 只需做 14 次乘法运算。

例 1.5 计算 $P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$ 的值。

解 (1) 如果直接进行计算, 需进行 $\frac{n(n+1)}{2}$ 次乘法和 n 次加法运算。

(2) 若改用如下递推公式

$$\begin{cases} s_n = a_n \\ s_k = x s_{k+1} + a_k \quad (k=n-1, n-2, \cdots, 1, 0) \\ P_n(x) = s_0 \end{cases}$$

来计算, 只需做 n 次乘法和 n 次加法运算。这种方法称为秦九韶法。

习 题 1

1.1 将下列各数

$$326.785, 7.000009, 0.0001326580, 0.6000300$$

皆四舍五入为具有五位有效数字的数。

1.2 指出由四舍五入得到的下列各数分别有几位有效数字。

7.8673, 8.0916, 0.06213, 0.0007800

1.3 设准确值为 $x=3.78695$, $y=10$, 它们的近似值 $x_1^*=3.7869$, $x_2^*=3.7870$, $y_1^*=9.9999$, $y_2^*=10.1$, $y_3^*=10.0001$ 分别具有几位有效数字?

1.4 设 $x^*=0.0056731$ 是 x 的具有五位有效数字的近似值, 试计算其绝对误差限和相对误差限。

1.5 设 $x=1990 \pm 10$, $y=1.99 \pm 0.001$, $z=0.000199 \pm 0.000001$, 试问这三个近似值 $x^*=1990$, $y^*=1.99$ 和 $z^*=0.000199$ 哪一个精确度高? 为什么?

第2章 非线性方程的数值解法

在生产实际和科学计算中,经常会遇到求解非线性方程

$$f(x)=0 \quad (2.1)$$

的问题,其中 $f(x)$ 是一元非线性函数。若 $f(x)$ 为 n 次多项式($n>1$),则称式(2.1)为 n 次代数方程;若 $f(x)$ 是超越函数,则称式(2.1)为超越方程。由代数理论可知,五次及五次以上的代数方程没有公式解,而超越方程就更加复杂,难以求解,因此研究非线性方程的数值解法就显得非常必要。

方程 $f(x)=0$ 的根,也称为函数 $f(x)$ 的零点。根有实根和复根两种,本章只讨论实根近似值的求法。

对方程 $f(x)=0$ 求根,大致可分三个步骤进行:

(1) 判定根的存在性。确定方程是否有根,如果有,会有几个根。

(2) 根的隔离。先求出有根区间,然后把它分为若干个子区间,使每个子区间内或者没有根,或者只有一个根。这样的有根子区间称为隔根区间,其上的任意一点都可以作为根的初始近似值。

(3) 根的精确化。根据根的初始近似值,按某种方法逐步精确化,直到满足精度要求为止。

本章恒设 $f(x)$ 连续。

2.1 根的隔离

根的隔离主要有三种方法:试值法、作图法和扫描法。

2.1.1 试值法

根据函数的性质,进行一些试算。由连续函数的性质可知,如果 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续,且满足 $f(a) \cdot f(b) \leq 0$,那么方程 $f(x)=0$ 在区间 $[a,b]$ 上至少有一个实根;进一步,如果 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上单调,那么方程 $f(x)=0$ 在 $[a,b]$ 上只有一个实根。

例 2.1 求方程 $2x^3 + 3x^2 - 12x - 8 = 0$ 的隔根区间。

解 设 $f(x) = 2x^3 + 3x^2 - 12x - 8$,其定义域为 $(-\infty, +\infty)$,其导函数为

$$f'(x) = 6x^2 + 6x - 12 = 6(x-1)(x+2)$$

所以当 $x \in (-\infty, -2)$ 时, $f'(x) > 0$, 函数单调上升; 当 $x \in (-2, 1)$ 时, $f'(x) < 0$, 函数单调下降; 当 $x \in (1, +\infty)$ 时, $f'(x) > 0$, 函数单调上升。因此在每个区间上至多只有一个根。取几个特殊的点计算函数值, $f(-4) = -40, f(-3) = 1, f(-1) = 5, f(0) = -8, f(2) = -4, f(3) = 37$, 所以, 隔根区间可取为 $(-4, -3)$ 、 $(-1, 0)$ 和 $(2, 3)$ 。由于 $f(x)$ 为三次多项式, 至多有3个实根。因此这就是方程 $f(x)=0$ 所有的隔根区间。

2.1.2 作图法

例 2.2 求方程 $f(x) = x^3 - 3x - 1 = 0$ 的隔根区间。

解 $f'(x) = 3x^2 - 3$, $f''(x) = 6x$, 当 $x < 0$ 时, $f''(x) < 0$; 当 $x > 0$ 时, $f''(x) > 0$ 。画出 $f(x)$ 的草图, 如图 2-1 所示, 从图中可大致确定隔根区间为 $(-2, -1)$ 、 $(-1, 1)$ 和 $(1, 2)$ 。

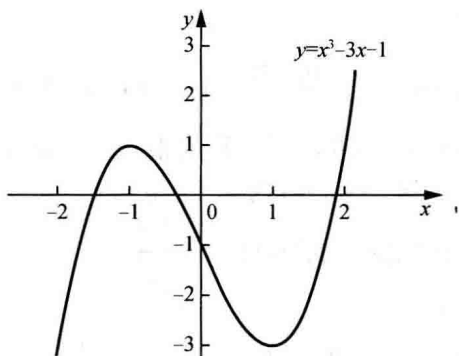


图 2-1

2.1.3 扫描法

扫描法是一种在计算机上较实用的方法。简单地说, 扫描法就是将根区间等分为若干个子区间, 然后从有根区间的左端点开始, 一个一个小区间地检验是不是隔根区间。

扫描法算法:

- (1) 输入有根区间的端点 a, b 及子区间长度 h 。
- (2) $a \Rightarrow x$ 。
- (3) 当 $x \leq b - h/2$ 时, 做循环:
 - ① 若 $f(x) \cdot f(x+h) \leq 0$, 则输出隔根区间 $[x, x+h]$;
 - ② $x+h \Rightarrow x$ 。

对于代数方程

$$f(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \cdots + a_{n-1} x + a_n = 0 \quad (a_0 \neq 0)$$

设 $A = \max(|a_1|, |a_2|, \cdots, |a_n|)$, 则其实根的上、下界分别为 $1 + \frac{A}{|a_0|}$ 和 $-\left(1 + \frac{A}{|a_0|}\right)$, 由

此即可确定其有根区间 $[a, b]$ 。

下面着重介绍对分法、迭代法、牛顿法和弦割法等几种根的精确化方法。

2.2 根的精确化

2.2.1 对分法

设 $[a, b]$ 为方程 $f(x) = 0$ 的一个隔根区间, 即方程 $f(x) = 0$ 在 $[a, b]$ 区间上有且仅有一个根,