实用数值方法及应用程序

安里千　张拥军　编著

煤炭工业出版社

责任编辑：顾建中
瓮立平
封面设计：晓　杰

ISBN 7-5020-1961-8

9 787502 019617 >

ISBN 7-5020-1961-8/O241
社内编号：4732　定价：26.00 元

实用数值方法及应用程序

安里千　张拥军　编著

煤炭工业出版社

图书在版编目（CIP）数据

实用数值方法及应用程序/安里千著. —北京：煤炭工业出版社，2000

ISBN 7-5020-1961-8

Ⅰ.实… Ⅱ.安… Ⅲ.数值计算-计算方法 Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2000）第 75192 号

实用数值方法及应用程序

安里千　张拥军　编著

责任编辑：顾建中　瓮立平

*

煤炭工业出版社　出版发行

（北京市朝阳区芍药居 35 号　100029）

北京市宏伟胶印厂　印刷

*

开本 $850\times1168\text{mm}^{1}/_{32}$　印张 $8^{7}/_{8}$

字数 231 千字　印数 1—455

2001 年 6 月第 1 版　2001 年 6 月第 1 次印刷

社内编号 4732　定价 26.00 元

内 容 提 要

本书介绍了在工程和科学计算中最常用的数值计算方法，提出了用函数采样理论求解非线性方程、数值积分等新方法。全书共分六章，主要包括：非线性方程的数值解法、代数方程组的数值解法、矩阵特征值问题、函数插值与逼近、常微分方程的数值解法以及数值微分和数值积分等，并且根据实际应用经验，简述了各种数值方法的选用原则。书中还以例题形式，编写了大量实用C语言程序，并附有一定数量的练习题。

本书为大专院校工科学生及研究生教材，也可供从事科学研究的工程技术人员参考。

前　　言

在科学研究和工程设计中经常需要做大量的数值计算。目前，数值计算问题的基本理论和算法已相当完善，尤其是计算机的普及应用，不仅使数值计算精度有了可靠的保证，而且也为数值计算开辟了新的领域。

本书是作者在《工程和科学实用数值方法》一书的基础上修订而成的。随着科学技术的发展，作者根据多年的教学实践经验，对原书进行了全面的修改，补充了实用算法及各种算法的C语言程序，并且提出了用函数采样理论求解非线性方程和数值积分等方法。本书侧重于数值方法的实际应用，略去了较为繁琐的理论推导及系统论证，力求从实际需要出发，提出问题，找出解决问题的基本计算方法，并给出在计算机上实现这些算法的C语言程序。这些程序虽然是为专门问题设计的，但只要改变输入条件，即可作为通用程序使用。

本书由中国矿业大学（北京校区）安里千教授、张拥军博士编著；参与本书资料收集、书稿整理工作的还有陈志宏、李小铁、张培峰、杨文惠、于文英等同志。本书的出版得到了煤炭工业出版社的领导和有关人员的大力支持，在此一并向他们表示感谢。书中难免有不足之处，希望各位专家、学者给予批评指正。

安里千

2000.7

目　　录

1 非线性代数方程的求解

在科学分析和工程计算中，经常需求解一些代数方程。根据方程所含未知数的数量，代数方程一般可划分为一元函数方程和多元方程组。总体来说，代数方程可分为线性方程和非线性方程。一元非线性代数方程的两种最常用的形式是超越方程和多项式方程。超越方程包括三角函数方程和特殊函数方程。三角函数方程包括正弦函数和余弦函数方程等；特殊函数方程包括对数函数和指数函数方程等。

在一元非线性方程中，有一部分方程可在非重复方式下应用相应的公式求解，并且得到的是精确解，这种方法称为直接方法。但是，很多这类非线性方程无法直接求解，必须重复应用某一算法逐步逼近方程的真实解，最终得到一个能够满足精度要求的近似解，这种方法称为间接法。是非常适合于用计算机进行计算的方法，而且精度可人为控制。

用数值分析方法求解非线性方程时，根的初始值及根存在区间的确定是至关重要的，因为这将直接影响求解的收敛性和收敛速度。本章将重点介绍用采样定理确定根的初始值、根的存在区间、采样求解方程的方法以及函数采样在其他数值求根方法中的应用。

1.1 非线性代数方程的采样法

用数值方法求解非线性方程时，初始值及根存在区间的确定将直接影响求解过程的收敛性和收敛速度，它们的确定一直是用数值方法求解非线性方程的难题之一。如果通过对方程式采样获得离散值，并适当调整采样间隔，找出两端函数值相反符号的采样区间，便可获得方程根的存在区间，而在此区间内进一步用更

小的间隔采样，可获得根存在的更小区间。此区间可以用于“对分法”、“线性插值法”等来求解非线性方程，也可以用来确定迭代求解方程的初始值。如果在这个小区间内继续进行采样，可直接获得满足精度要求的方程近似解。若根据区间两端函数值的比例，不断缩小根存在的区间，可以使计算速度加快，并能保证其收敛性，迅速得到方程根的近似解。

1.1.1 函数采样与离散化

在工程和科学研究中，经常遇到的函数是连续变化的，这种连续变化量称为模拟量。但是，计算机只能处理数字量，因此必须将连续函数离散化，并量化离散的模拟量使其转换成数字量。通过对函数“采样”可以实现函数的离散化，即自变量按一定的间隔 Δ 计算函数值，得到一个函数值序列，这个序列只是函数的一部分值，称为离散函数值。Δ 称为采样间隔或采样周期。自变量的采样序列可用 $n\Delta(n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots)$表示，则函数$f(x)$的离散序列为 $f(n\Delta)$。

例如，连续函数为

$$f(x)=0.25x-\sin x$$

则相应的离散函数为

$$f(n\Delta)=0.25(n\Delta)-\sin(n\Delta)\quad(n=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$

实际上，这是一个函数值序列，是从连续函数

$$f(x)=0.25x-\sin x$$

中取出的一部分值。因此，离散函数与连续函数之间的关系是局部和整体的关系，一般来说，这些局部的函数值难以反映整个连续函数，即离散的函数值难以惟一确定或恢复出原连续函数。因为任意两点之间，例如 $f(n\Delta)$与 $f[(n+1)\Delta]$之间连续的曲线不是惟一的，因而 $y_n=f(n\Delta)$给出的连续函数也是任意多的。但是，在一定的条件下，离散函数值可按一定的方式恢复出原连续函数。这就要求对连续函数采样时，必须遵循函数采样定理。

定理一 设连续函数 $y=f(x)$的频谱为 $F(f)$，以采样周期 Δ

采样，得离散函数为 $y_n=f(n\Delta)$。如果频谱 $F(f)$ 存在截止频率 f_c，并且采样周期 $\Delta\leqslant\frac{1}{2f_c}$，则可由离散函数 $f(nx)$ 完全确定。

$$F(f)=\Delta\sum_{n=-\infty}^{+\infty}f(n\Delta)\mathrm{e}^{-j2\pi f(n\Delta)}$$

$f(x)$ 可由 $f(n\Delta)$ 完全确定

$$f(x)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}f(n\Delta)\frac{\sin 2\pi f_c(x-n\Delta)}{2\pi f_c(x-n\Delta)}$$

定理二 如果连续函数 $y=f(x)$ 的频谱不存在截止频率 f_c，或 f_c 存在，但采样周期 $\Delta>\frac{1}{2f_c}$ 时，则离散函数 $f(n\Delta)$ 的频谱 $F_\Delta(f)$ 与连续函数 $f(x)$ 的频谱之间的关系式为

$$F_\Delta(f)=\sum_{i=-\infty}^{+\infty}F\left(f+\frac{i}{\Delta}\right)$$

采样定理二说明：当采样定理的条件不能同时满足时，离散函数的频谱将发生畸变，此时，应该尽量减小采样周期 Δ，以克服离散函数频谱畸变给原函数带来的影响。

从采样定理一、二可知，频率 $\frac{1}{2\Delta}$ 对离散函数 $f(n\Delta)$ 的频谱 $F_\Delta(f)$ 起重要作用，设

$$f_N=\frac{1}{2\Delta}$$

则 f_N 称为 Nyquist 频率。

当满足采样定理一时，在 Nyquist 频率范围内，即 $f_N=\frac{1}{2\Delta}\geqslant f$，离散函数的频谱 $F_\Delta(f)$ 与连续函数的频谱 $F(f)$ 是相等的。一般情况下，当满足采样定理二时，在 Nyquist 频率范围内，离散函数的频谱 $F_\Delta(f)$ 是由连续函数 $F(f)$ 折叠成的，故 Nyquist 频率又称折叠频率。

定理三 原始离散函数 $f(n\Delta)$ 的频谱为 $F_\Delta(f)$，重采样后的离散函数 $f(m\Delta_1)$ $(\Delta_1=\mu\Delta)$ 的频谱为 $F_{\Delta_1}(f)$，则两个频谱之间的关系式为

$$F_{\Delta_1}(f)=\sum_{m=-\infty}^{+\infty}\widetilde{F}\left(f+\frac{m}{\Delta_1}\right)$$

式中 $\widetilde{F}(f)=\begin{cases}F(f) & -\frac{1}{2\Delta}\leqslant f\leqslant\frac{1}{2\Delta}\\ 0 & \text{其他}\end{cases}$

$\Delta_1=\mu\Delta$（μ 为正整数）为重采样周期，m 为重采样点数。

离散函数 $f(n\Delta)$ 与连续函数 $f(x)$ 之间是局部与整体的关系，要使 $f(n\Delta)$ 真实地再现 $f(x)$，必须按一定的条件对函数 $f(x)$ 进行采样，获得的离散函数 $f(n\Delta)$ 才有实际意义。这个条件为

(1) 函数 $f(x)$ 的频谱 $F(f)$ 有截止频率 f_c，即当频率 $|f|\geqslant f_c$ 时，$F(f)=0$；

(2) 采样间隔 $\Delta\leqslant\frac{1}{2f_c}$ 或 $f_c\leqslant\frac{1}{2\Delta}$。

例如，确定 $f(x)=0.25x-\sin x$ 的采样周期，由于 $\sin x$ 的周期为 $\left[-\frac{\pi}{2},\ \frac{\pi}{2}\right]$，$|f|=\frac{1}{\pi}$，所以，采样周期 $\Delta\leqslant\frac{\pi}{2}$，如果要求解方程 $0.25x-\sin x=0$ 的一个根，用采样方法寻找根存在的区间，则采样间隔 Δ 应该小于或等于 $\frac{\pi}{2}$，即根存在的区间长度应该小于或等于 $\frac{\pi}{2}$。例如，在区间 $\left[-\frac{\pi}{4},\frac{\pi}{4}\right]$ 内求解方程，由于 $f\left(-\frac{\pi}{4}\right)=0.511$，$f\left(\frac{\pi}{4}\right)=-0.511$，此区间两端点处函数值异号，故知方程根必在此区间。继续缩小此区间，两端函数值的绝对值将越来越小，逐步趋近于零，根存在的区间也逐步趋近于零，即方程的解 $x=0$。

1.1.2 初始值及根存在区间的确定

对于任意一个在实轴上定义的方程 $f(x)=0$，用数值方法求解时，确定其根存在的区间或初始值是至关重要的，这将直接影响求解过程的收敛性、计算时间及计算精度。对于对分法、线性插值法等，方程根存在的区间 $[x_1,\ x_2]$ 内 $f(x)$ 的值是连续单调增加（或减少）的，则该区间两端 $f(x_1)$，$f(x_2)$ 的值必反号。为了寻找

方程根存在的区间，可以先将函数 $y=f(x)$ 离散化，以采样间隔 Δ 对 $y=f(x)$ 采样，即取 $x=n\Delta$，求 $y=f(n\Delta)(n=0,\pm1,\pm2,\cdots)$ 的值。

在采样过程中，若 $f(n\Delta)f((n+1)\Delta)<0$，则原方程的根必在区间 $[n\Delta, (n+1)\Delta]$ 内，因此可在该区间实施对分法、线性插值法等计算，以求得方程的近似解。该区间的任一值也可作为迭代法解方程的初始值，以确保迭代计算的收敛性，加快收敛速度。在采样过程中，也可以在这个区间上逐次减小的采样间隔进行采样，直到获得满足误差要求的根存在小区间，这个小区间两端点的任一值可以作为方程的近似解为止。

例如，求 $x^3-5x+1=0$ 所有根存在的区间。首先取采样间隔为 $\Delta=1$，离散函数 $f(x)$ 为

$$f(n1)=(n1)^3-5(n1)+1 \quad (n=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$

$$\left.\begin{aligned}&n=0, x_0=0, f(0)=1\\&n=1, x_1=1, f(1)=-3\end{aligned}\right\} f(0)f(1)<0$$

$$\left.\begin{aligned}&n=2, x_2=2, f(2)=-1\\&n=3, x_3=3, f(3)=13\end{aligned}\right\} f(2)f(3)<0$$

$$n=-1, x_{-1}=-1, f(-1)=5$$

$$\left.\begin{aligned}&n=-2, x_{-2}=-2, f(-2)=3\\&n=-3, x_{-3}=-3, f(-3)=-11\end{aligned}\right\} f(-2)f(-3)<0$$

由图 1.1.1 表示的 $f(x)$ 曲线，可知方程的 3 个根分别在区间 $[-3, -2]$，$[0, 1]$，$[2, 3]$ 内，然后用对分法或线性插值法等，可分别在 3 个区间内求出 3 个近似解，亦可分别在这 3 个区间内，确定初始值，用迭代法求解方程。

在根存在区间确定后，用更小的采样间隔在此区间采样，可以得到更小的根存在区间。例如，在区间 $[2, 3]$ 内，取采样间隔为 0.5，进行采样，得

$$f(2+\Delta)=f(2.5)=4.125$$

由于 $f(2)f(2.5)<0$，可知根是在区间 $[2, 2.5]$ 内。还可以进一步

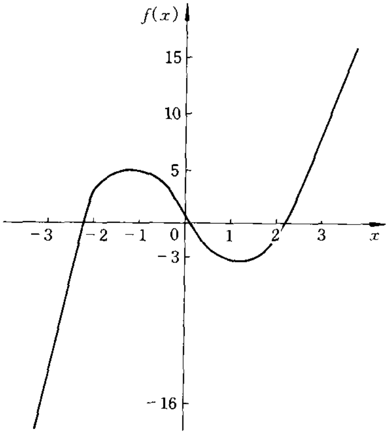

图 1.1.1　$f(x)=x^3-5x+1$ 曲线示意图

减小采样间隔，以缩小根存在的区间。在缩小的区间内，再用对分法或线性插值法或选定初值实施迭代法求解方程，将使收敛速度更快，结果更为精确。

1.1.3　根存在区间两端的函数值的线性插值

在根存在的区间上用线性插值逐步逼近求解的近似根，可以加速求解过程，获得更精确的方程解。如图 1.1.2 所示，设该区间为 $[x_i, x_{i+1}]$，函数 $f(x)$ 在此区间内是单调增加（或减少）的，一般来说此区间可以划分得尽量小，进行插值运算时 $f(x)$ 的变化可以近似为线性。

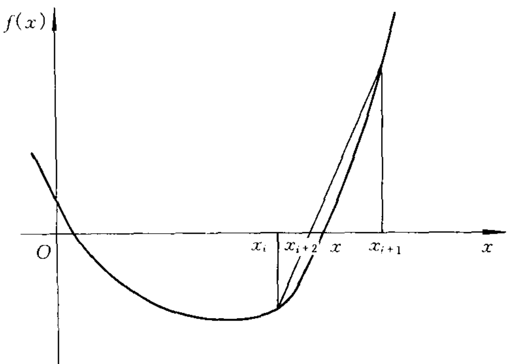

图 1.1.2　线性插值法示意图

根据区间$[x_i, x_{i+1}]$两端点的函数值为$f(x_i)$和$f(x_{i+1})$，由几何关系可知

$$x_{i+2}=x_i+(x_{i+1}-x_i)\Big/\left[\left|\frac{f(x_{i+1})}{f(x_i)}\right|+1\right]$$

或

$$x_{i+2}=x_{i+1}-(x_{i+1}-x_i)\Big/\left(\left[\left|\frac{f(x_{i+1})}{f(x_i)}\right|+1\right]\times\left|\frac{f(x_{i+1})}{f(x_i)}\right|\right)$$

若$f(x_{i+2})$与$f(x_{i+1})$同号，则可在区间$[x_i, x_{i+2}]$内计算，得到新的近似解。

若$f(x_{i+2})$与$f(x_{i+1})$反号，可知方程真实解应在区间$[x_{i+2}, x_{i+1}]$之间，应在此区间计算求出近似根。

以求解方程$x^3-5x+1=0$为例，通过采样得到方程的3个根分别在区间$[-3, -2]$，$[0, 1]$，$[2, 3]$内，用区间两端函数值的线性插值。由图1.1.2可知，设$x_i=2$和$x_{i+1}=3$，区间左端点函数值为$f(2)=-1$，区间右端点函数值为$f(3)=13$，点$(x_2, f(x_2))$与点$(x_3, f(x_3))$之间连线交x轴于x_{i+2}点。

首先在区间[2，3]计算

$$\left[\left|\frac{f(x_{i+1})}{f(x_i)}\right|+1\right]=\left[\left|\frac{f(3)}{f(2)}\right|+1\right]=14$$

$$(x_{i+1}-x_i)\Big/\left[\left|\frac{f(x_{i+1})}{f(x_{i+2})}\right|+1\right]=(3-2)/14\approx0.071$$

取区间$[2+0.071, 2+2\times0.071]$，即区间$[2.071, 2.142]$，计算两端点函数值

$$f(2.071)=-0.472,\quad f(2.142)=0.118$$

因为$|f(2.071)|=0.472>|f(2.142)|=0.118$，可用下式将此区间分成更小区间

$$0.071\Big/\left(\frac{0.472}{0.118}+1\right)=0.071/5\approx0.014$$

取区间$[2.142-0.014, 2.142]$，即区间$[2.128, 2.142]$，进行下一步计算

$$f(2.128)=-0.004$$

因为 $f(2.128)$与 $f(2.142)$符号相反，用上面方法计算得

$$0.014/(0.118/0.004+1)\approx 0.014/30\approx 0.0005$$

取区间[2.128+0.0005，2.128+2×0.0005]，计算两端点值

$$f(2.128+0.0005)=f(2.1285)\approx 0.0007$$

$$f(2.128+2\times 0.0005)=f(2.129)\approx 0.0005$$

若给定解的误差小于或等于 0.001，则方程的一个近似解为 $x=2.1285\approx 2.129$。

用此方法，大约只需将区间缩小 3 次即得精度小于或等于 0.001 的近似解，而用对分法则至少需对分 7 次。

1.1.4 采样间隔的确定原则

用采样方法求解非线性方程，其采样间隔的确定是极其重要的，一般来说应遵循以下原则：

(1)如果已知函数 $f(x)$的截止频率 f_c,应根据采样定理一,采样间隔应取为 $\Delta\leqslant\frac{1}{2f_c}$，即 $\Delta\leqslant\frac{1}{2}T_c$　($T_c=1/f_c$)。

(2)如果函数 $f(x)$的频率未定,采样间隔应采取由大到小,多次采样的方法，以保证将方程 $f(x)=0$ 的所有根的区间全部计算出来。

例如，方程 $x^3-5x+1=0$，若开始用间隔等于 3 采样，则方程有两个根的存在区间将无法确定，用采样间隔小于或等于 1 采样，则方程所有 3 个根的存在区间都可确定。

(3)在根存在区间缩小到一定程度后,用给定的误差限制值的一半采样，可一次求出方程的满足精度要求的近似解，将使收敛速度更快。

用采样方法求解非线性代数方程，能准确地确定各根存在的区间,为“对分法”、“线性插值法”等求解非线性方程创造了有利的条件，不仅使求解速度加快，而且通过扩大采样范围找到方程的所有根。本方法也可为“牛顿迭代法”、“直接迭代法”提供较为准确

的初始值，调整在根存在的区间内的迭代值，可以保证迭代的收敛性，并减少迭代时间。如果利用根存在区间两端点的函数值的比值，成比例地缩小根存在的区间，可以十分迅速地得到满足精度要求的近似解。因此，采样法不仅为传统的非线性方程数值解法中初始值及根存在区间的准确确定提供了有效的方法，而且也是数值方法求解方程的一种新途径。

1.2 对分法

对分法求解非线性方程的基本条件是方程 $f(x)=0$ 的根在某一区间内存在，并且在这个区间内函数 $f(x)$是单调增加(或减少)。其求解的基本过程是：首先，采用非线性函数方程的采样求解法，对函数 $f(x)$按一定的间隔进行采样，通过计算采样间隔两个端点处的函数值，找出两端点函数值符号相反的区间，此区间内必存在方程 $f(x)=0$ 的一个根。然后，对分此区间，求出区间中点的函数值，再次，对分两个端点函数值符号相反的新区间，并求出新的区间中点函数值。如此对分下去，区间将越来越小，函数 $f(x)$值也趋近于零。当 $f(x)$值足够小时，便可结束对分过程，将此时的 x 值定为 $f(x)=0$ 的近似根。

例如，假设已求得的区间$[x_n, x_{n+1}]$两端点 $f(x_n)$和 $f(x_{n+1})$的值符号相反，即在此区间内有一个根存在，用公式

$$x_{\mathrm{mid}}=\frac{x_n+x_{n+1}}{2} \tag{1.2.1}$$

计算中点的值，并求出函数值 $f(x_{\mathrm{mid}})$。如果 $f(x_{\mathrm{mid}})$的符号与 $f(x_n)$一致，则用 $f(x_{\mathrm{mid}})$替换 $f(x_n)$，否则就替换 $f(x_{n+1})$。如此继续对分新区间，直到 $f(x_{\mathrm{mid}})$足够小（满足精度要求），便将 x_{mid} 作为 $f(x)=0$ 的解。该对分查找过程如图 1.2.1 所示。在区间$[x_1, x_2]$上实施对分法

$$x_3=\frac{x_1+x_2}{2}$$

因为 $f(x_3)$与 $f(x_1)$符号相同，则用 $f(x_3)$替换 $f(x_1)$，得到