信息与计算科学丛书

计算机数值方法

Jisuanji Shuzhi Fangfa

李建良 蒋 勇 汪光先 编著

4

东 南 大 学 出 版 社

计算机数值方法

信息与计算科学丛书

计算机数值方法

李建良
蒋　勇　编著
汪光先

东南大学出版社

内 容 提 要

本书是为理工科院校各专业普遍开设的《计算方法》(或《数值分析》、《数值算法分析》)课程编写的教材。着重介绍科学研究和工程技术中常用的、计算机上行之有效的数值方法及其相应的理论与技巧。其内容包括数值逼近、数值微分与数值积分、微分方程数值解、非线性方程数值解、线性方程组的数值解、特征值及特征向量计算等,各章均配有适量的习题,并专门编制了上机实习课题。

本书内容精练,由浅入深,循序渐进,脉络分明,易于教学,可作为工科院校各专业高年级学生和研究生的教材或参考书,也可供从事科技计算、工程应用的人员学习或进行程序设计时参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算机数值方法/李建良等编著.—南京:东南大学出版社,2000.9

(信息与计算科学丛书)

ISBN 7-81050-674-9

Ⅰ.计... Ⅱ.李... Ⅲ.电子计算机-数值计算-高等学校-教材 Ⅳ.TP301.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2000)第 42965 号

东南大学出版社出版发行

(南京四牌楼 2 号 邮编 210096)

出版人 宋增民

江苏省新华书店经销 华东有色地研所印刷厂印刷

开本:787mm×1092mm 1/16 印张:12.5 字数:312 千字

2000 年 9 月第 1 版 2000 年 9 月第 1 次印刷

印数:5000 总定价:180.00 元 本册定价:18.00 元

前　言

“计算机数值方法”(简称“计算方法”,或称“数值分析”、“数值算法分析”等),在科学研究和工程技术等领域中有着重要的作用,随着计算机的快速发展,学习常用的计算方法并上机实习显得尤为重要,“计算方法”已成为理工科大学普遍开设的一门重要课程。本书是为高年级学生和研究生学习计算方法及上机实习编写的教材,系根据国家教委“计算方法”(“数值分析”)课程大纲,结合编者多年教学实践的经验编写而成。本书在保持系统性与严谨性的前题下,从实用角度出发,并考虑到现代科学技术的发展,重点阐述数值计算的必备理论、方法与技巧,并努力体现出培养能力及提高素质的思想。本书取材上考虑精练实用,内容适当;编排上注意由浅入深、循序渐进;写作上力求通俗易懂、重点突出;既有适量的理论推导,又有足够的计算实例,从而有利于提高学生的分析问题与解决问题的能力。对于课时较少或自学读者,可略过有关理论分析与推导,而注重对基本内容的掌握。读者仅需具有高等数学和线性代数的基本知识,即可较顺利地学习本书的基本内容。

本教材可供工科院校各专业、师范院校和理科院校的部分专业教学选用与参考。据编者及有关教师的教学实践,认为72学时可授完本书全部内容。若略去部分理论推证及相对独立的部分章节(例如,第4章全部、第8章全部等),亦可安排在32～48学时讲授。需要说明的是,完成书中所配习题及第9章安排的计算实习课题是教学的主要环节之一,教师或自学者可根据具体情况有选择地进行演习。

本书由李建良、蒋勇、汪光先编著,在编写过程中,得到了南京理工大学理学院计算数学与应用软件教研室的教师及部分研究生的帮助,还得到南京理工大学教务处及教材科,特别是东南大学出版社的大力支持,在此谨向他们深表感谢。

因种种原因,书中缺点、错误在所难免,望读者多提宝贵意见。

编　者

2000年6月于南京

目　录

绪 论

计算机数值方法是一门研究数值计算的理论与方法的学问，相应的计算实习则是将有关理论和方法在计算机上实现的系统训练。

计算机的工作依赖于以算法为核心的应用软件(俗称程序)，而算法通常分为数值算法与非数值算法。从计算机的出现至今，数值算法一直受科技与工程领域各个学科的共同关注，人们习惯称其为数值计算方法或计算方法。随着计算机的发展，在内存、速度等方面已逐渐达到其物理极限。因此，研究、设计、应用计算方法已不仅仅要求提供可解决实际问题的算法，而且必须考虑降低算法复杂性等问题。例如，如何提高算法的速度、减少占用的内存、降低算法的结构复杂性、增加算法的稳定性等，也都成了计算方法的研究内容。

虽然计算方法本身可以不依赖于计算机而作为科学与工程中的重要理论与方法，但是将计算方法与计算机应用结合起来，一方面可以使问题得到更好的解决，另一方面可以大大提高计算机应用的水平。因此，进行适当的计算实习也自然成为本门课程的重要环节。

通过计算机数值方法的学习和训练，可使学生在掌握计算方法的理论与方法的同时，提高自己发现问题、分析问题、解决问题的能力，从而达到提高综合素质的目的。这对进入21世纪的科技工作者、劳动者显然更为重要。

计算机数值方法的任务

为了说明计算机数值方法的任务及研究对象，我们自然要看清它在解决实际问题中扮演的角色。一般，用数学方法或计算机计算解决实际问题的过程可概括为如图0-1所示的模式。

由图0-1可见，用计算机解决科学与工程计算问题，一般包括：建立数学模型(a)；设计计算方法(b)；程序设计(c)；上机运算(d)等过程。以分别得到“A. 数学模型”，“B. 计算方法”，“C. 程序”，“D. 结果”等为目标。不难看出从“A. 数学模型”经过“设计计算方法”得到适当的“B. 计算方法”，再经过“程序设计”得到可行的“C. 程序”都是实际问题能否得到解决的关键过程，这也恰好就是本书所要处理的问题。总之，计算机数值方法的主要目的是：根据数学模型设计出相应的计算方法，并将计算机数值方法得以在计算机上实现。除此之外，计算方法中的有关理论与方法也在“建立数学模型”等环节中扮演着重要角色。例如，本书第2章中的曲线拟合方法通常被作为建立数学模型的主要工具之一。可见，计算机数值方法在科学与工程技术中起着重要的作用。

那么，计算机数值方法包括哪些内容呢？可以说，凡是有数学模型出现的地方都有一个设计计算方法的问题。尽管实际问题复杂多变，相应的数学模型五花八门，但从数学理论上可对其作比较系统的分类，从而对应的计算方法问题可以大致概括为：数值逼近、数值微分

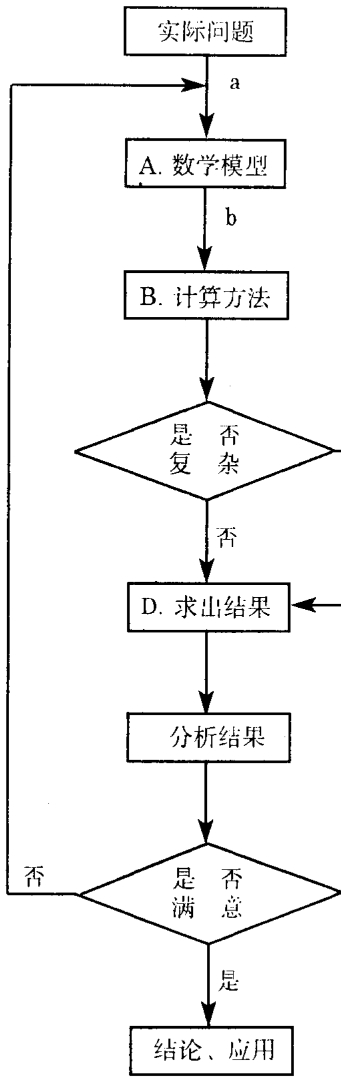

图 0-1 计算机解决实际问题的一般过程

与数值积分、微分方程数值解、非线性方程数值解、线性方程组的数值解、特征值及特征向量计算等。我们将通过对这些问题中比较常见的简单的计算方法的学习，掌握计算方法的基本理论、方法与技巧，提高程序设计的能力，以便为今后解决各种实际问题奠定良好的基础。

然而我们不能片面地将计算机数值方法理解为各种数值方法的简单罗列和堆积，其实它本身就是一门内容丰富、研究方法深刻、有自身理论体系的学科。它既有纯数学的高度抽象性与严密科学性，又有应用的广泛性与实际试验的高度技术性，是一门与计算机使用密切结合的实用性很强的应用数学与计算机应用课程。为了说明它与纯数学课及计算机理论课不同，我们来考虑线性方程组的数值解。在线性代数中只介绍解的存在唯一性及有关理论和精确解法，用这些理论和方法还不能在计算机上解上百个未知数的方程组，甚至，我们在第 6 章的引言中将发现，就是二三十个未知数的线性代数方程组，都难以求解。更不用说求

解十几万个未知数的方程组了。可见，要求解这类问题，还应根据方程特点研究适合计算机使用的、满足精度要求的、计算时间节约的有效算法及其相关的理论。在实现这些算法时往往还要根据计算机容量、字长、速度等指标，研究具体求解步骤和程序设计技巧。另外，对于被证明是行之有效的其他方法也应采用。

计算机数值方法的特点概括如下：

1）面向计算机　要根据计算机特点提供实际可行的有效算法，即算法只能包括加、减、乘、除运算和逻辑运算，是计算机能直接处理的。

2）有可靠的理论分析　能任意逼近并达到精度要求，对近似算法要保证收敛性和数值稳定性，还要对误差进行分析，这些都建立在相应数学理论的基础上。

3）要有好的计算复杂性　时间复杂性好是指节省时间，空间复杂性好是指节省存储量，这也是建立算法要研究的问题，它关系到算法能否在计算机上实现。

4）要有数值实验　即任何一个算法除了从理论上要满足上述三点外，还要通过数值试验证明是行之有效的。

根据计算机数值方法的这些特点，学习时我们首先要注意掌握方法的基本原理和思想，要注意方法处理的技巧及其与计算机的结合，要重视误差分析、收敛性及稳定性和基本理论；其次，要通过例子，学习使用各种数值方法来解决实际计算问题；最后，为了掌握本课的内容，还应做一定数量的理论分析与计算练习。由于本课内容包括了微积分、代数、常微分方程的数值方法，读者必须掌握这几门课的基本内容才能学好这一课程。

下面我们举 2 个例子，对上述内容加以说明。

关于方程求根及其二分法

我们考虑如下问题：

问题 A　求 $f(x) = x^4 - 2x^2 - 4x + 19\,590\,426$ 的极限。

问题 B　求 $y = f(x) = (x^3 - x - 1)^{-1}$ 与 $y = 0, x = 0, x = 1.3$ 所包围的面积。

问题 C　求方程 $y''' - y' - y = 0$ 的通解。

由高等数学的知识，不难发现它们都归结为方程 $x^3 - x - 1 = 0$ 的求根问题。对大多数人来说，找出其解并不是一个容易的事情。而这仅仅是实际问题中出现的一个非常简单的代数方程的求根问题，我们面对的其它实际问题也不仅仅是代数方程的求根问题。即使是代数方程的求根问题，当方程的次数较高时人们也难以用公式、分析等等方法直接求解。事实上，19 世纪挪威数学家 Abel 已经证明：对次数高于四次的代数方程，不可能由方程的系数经公式直接表示出解的形式！这就迫使人们去寻求解决各种实际问题的切实可行的数值计算方法。这里，我们不妨来看一个解代数方程的比较经典的求根方法 —— 二分法。

设函数 $f(x)$ 在闭区间 $[a,b]$ 上连续，且 $f(a)f(b) < 0$，根据连续函数的性质，$f(x)$ 在开区间 (a,b) 内一定有实的零点，即方程 $f(x) = 0$ 在开区间 (a,b) 内一定有实根。我们这里假定它在开区间 (a,b) 内有唯一的单实根 x^*，此即连续函数介值定理。我们记为定理 0.1。

定理0.1　设实函数 $f(x)$ 在闭区间 $[a,b]$ 上连续，且 $f(a)f(b)<0$，则方程 $f(x)=0$ 在开区间 (a,b) 内至少有 1 个实根。

考察有根区间 (a,b)，取中点 $x_0=(a+b)/2$ 将它分为两半，然后进行根的搜索，即检查 $f(x_0)$（当 $f(x_0)=0$ 时，则 $x^*=x_0$）与 $f(a)$ 是否同号。如果确系同号，说明所求的根 x^* 在 x_0 的右侧，这时令 $a_1=x_0,b_1=b$；否则 x^* 必在 x_0 左侧，这时令 $a_1=a,b_1=x_0$（图 0-2）。不管出现哪一种情形，新的有根区间 $[a_1,b_1]$ 的长度仅为 $[a,b]$ 的一半。

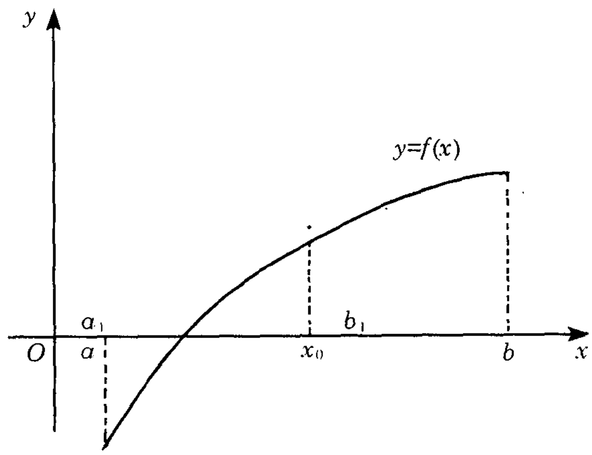

图 0-2　二分法求根的几何意义

对压缩了的有根区间 $[a_1,b_1]$ 又可施行同样的手续，即用中点 $x_1=(a_1+b_1)/2$ 将区间 $[a_1,b_1]$ 再分为两半，然后通过根的搜索判定所求的根在 x_1 的哪一侧，从而又确定一个新的有根区间 $[a_2,b_2]$，其长度是 $[a_1,b_1]$ 的一半。

如此反复二分下去，即可得出一系列有根区间

$$[a,b]\supset[a_1,b_1]\supset[a_2,b_2]\supset\cdots\supset[a_k,b_k]\supset\cdots$$

其中，每个区间都是前一个区间的一半，因此二分 k 次后的有根区间 $[a_k,b_k]$ 的长度

$$b_k-a_k=\frac{1}{2^k}(b-a)$$

可见，如果二分过程无限地继续下去，这些有根区间最终必收缩于一点 x^*，该点显然就是所求的根。

设第 k 次二分后，取有根区间的中点

$$x_k=\frac{1}{2}(a_k+b_k)$$

作为根的近似值，则在二分过程中可以获得一个近似根的序列 $x_0,x_1,x_2,\cdots$，该序列以根 x^* 为极限。

不过在实际计算时，我们一般不可能完成这种无穷过程，其实也没有这种必要，因为数值分析的结果允许带有一定的误差，由于

$$|x^*-x_k|\leqslant\frac{1}{2}(b_k-a_k)=\frac{1}{2^{k+1}}(b-a)$$

只要二分足够多次(即 k 充分大),便有

$$|x^* - x_k| < \varepsilon$$

式中,ε 为预定精度。

上述求根方法称为**二分法**,它是电子计算机上一种常用算法。我们给出其算法框图。在图 0-3 中,a,b 表示有根区间的左、右端点;x 表示近似根。

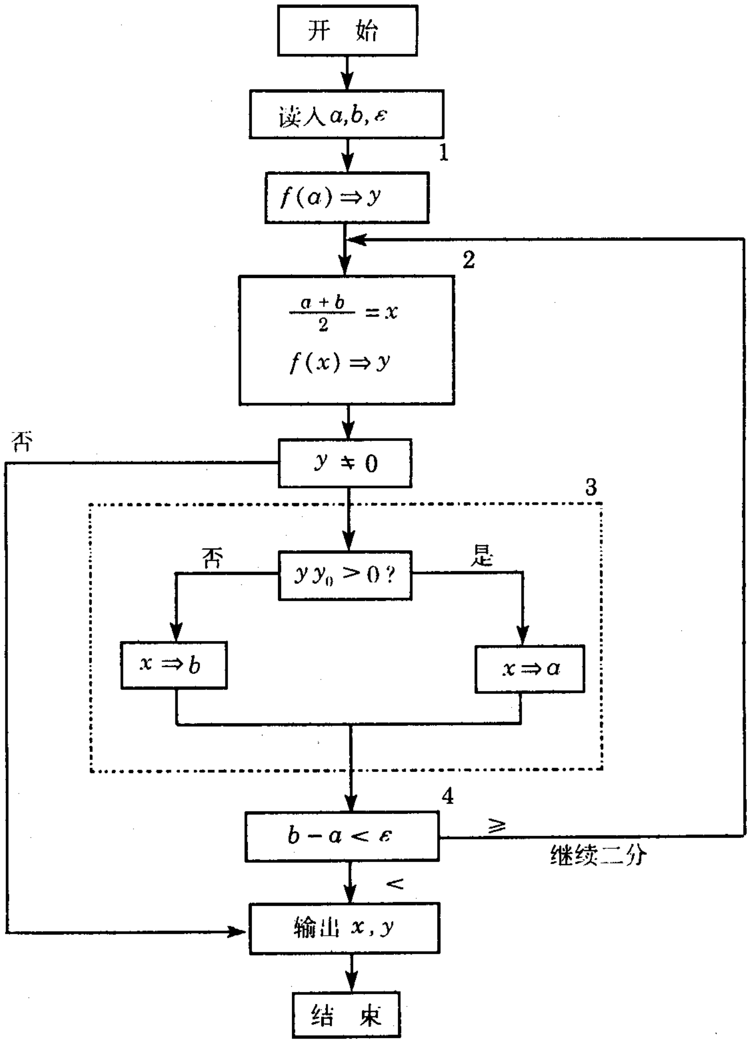

图 0-3　二分法的算法框图

各框的具体含义如下:

[框 1]　从所给区间(a,b)着手二分。

[框 2]　取有根区间(a,b)的中点 x 作为近似根。

[框 3]　确定二分后新的有根区间(a,b)。

[框 4]　检查近似根 x 是否满足精度要求。

例 0.1 用二分法求方程 $x^3 - x - 1 = 0$ 在区间(1,1.5)内的一个实根,要求误差不超过0.005。

解 ① 因为 $f(1) = -1, f(1.5) = 3.375$,所以

$$f(1)f(1.5) < 0$$

另外,显然 $f(x)$ 在[1,1.5]连续,故由定理0.1,在区间(1,1.5)内有根。

② 预估所要二分的次数。按误差估计式

$$|x^* - x_k| \leqslant \frac{1}{2^{k+1}}(b-a)$$

只需二分6次,便能达到所要求的精度。

③ 二分法的计算结果如表0-1所示。

表 0-1 二分法(例 0.1)的计算结果

k	a_k	b_k	x_{k+1}	$f(x_k)$ 符号
0	1.000 0	1.500 0	1.250 0	−
1	1.250 0		1.375 0	+
2		1.375 0	1.312 5	−
3	1.312 5		1.343 8	+
4		1.343 8	1.328 1	+
5		1.328 1	1.320 3	−
6	1.320 3		1.324 2	−

误差分析的重要性

通常人们习惯地认为,只要从理论上给出了计算步骤,即可大胆地计算下去,而不考虑计算过程中舍入误差的影响。也有人在将复杂问题化成简单问题时误认为截去比如方程的无穷小量不至于对方程的解产生很大的误差。诸如此类,在实际问题的求解上,往往会产生面貌全非的结果,甚至在计算机上无法运行下去。

这里我们仅给出一个例子,来说明问题的严重性,从而引起我们在设计计算方法时对相应问题的重视。

例 0.2 建立计算 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+25}dx$ 的递推公式并计算 I_1, I_2, I_3, I_4。

解 ① 显然

$$I_n + 25I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 25x^{n-1}}{x+25}dx = \int_0^1 x^{n-1}dx = \frac{1}{n} \tag{0.1}$$

故有递推公式

$$I_n = \frac{1}{n} - 25I_{n-1}$$

② 保留 4 位有效数字计算如下：

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+25}dx = \ln(x+25)\,|_0^1 = 0.039\,22$$

$$I_1 = 1 - 25I_0 = 1 - 25 \times 0.039\,22 = 0.019\,50$$

$$I_2 = \frac{1}{2} - 25I_1 = \frac{1}{2} - 25 \times 0.019\,50 = 0.012\,50$$

$$I_3 = \frac{1}{3} - 25I_2 = \frac{1}{3} - 25 \times 0.012\,50 = 0.020\,83$$

$$I_4 = \frac{1}{4} - 25I_3 = \frac{1}{4} - 25 \times 0.020\,83 = -0.270\,75$$

③ 分析计算结果：

令 $f_n(x) = \dfrac{x^n}{x+25}$，由于 $f_n(x)$ 在区间$(0,1]$上都是大于零的，所以，对任意的整数 n，都有 $I_n = \int_0^1 f_n(x)dx > 0$，这与 ② 中 $I_4 = -0.270\,75 < 0$ 矛盾。由此可见，上述方法并不能保证结果的正确性，这是为什么呢？这是因为在计算 I_0 时有误差(取小数后 5 位)。

因为准确值

$$I_1 = 1 - 25I_0$$

近似值

$$\tilde{I}_1 = 1 - 25\tilde{I}_0$$

所以

$$|I_1 - \tilde{I}_1| = 25\,|\tilde{I}_0 - I_0|$$

同理

$$|I_2 - \tilde{I}_2| = 25\,|\tilde{I}_1 - I_1| = 25^2\,|I_0 - \tilde{I}_0|$$

$$|I_3 - \tilde{I}_3| = 25\,|I_2 - \tilde{I}_2| = 25^2\,|I_1 - \tilde{I}_1| = 25^3\,|I_0 - \tilde{I}_0|$$

$$|I_4 - \tilde{I}_4| = \cdots = 25^4\,|I_0 - \tilde{I}_0|$$

由于 $|I_0 - \tilde{I}_0|$ 在计算机上进行计算时，不可避免地会丢失有效数字，产生误差，而在递推公式中，每相差一步，误差将放大 25 倍，在运行到第 4 步时，误差放大了 $25^4 = 390\,625$ 倍！

对于这种现象，应该如何处理呢？如果改变次序，可运用以下递推关系式：

由式(0.1)

$$I_{n-1} = \frac{1}{25}\left(\frac{1}{n} - I_n\right) \tag{0.2}$$

$$|I_{n-1} - \tilde{I}_{n-1}| = \frac{1}{25}(|I_n - \tilde{I}_n|)$$

$$|I_4 - \tilde{I}_4| = \cdots = \left(\frac{1}{25}\right)^{n-4} |I_n - \tilde{I}_n|$$

可见，改变次序可以使计算误差愈来愈小。

由于

$$0 < \int_0^1 \frac{x^n}{x+25}dx < \int_0^1 \frac{x^n}{25}dx = \frac{1}{25}\frac{1}{n} \to 0 \qquad n \to \infty$$