



研究生教材

计算方法教程

— 工程类 —

陈明逵 凌永祥

西安交通大学出版社

研究生教材

计算方法教程

——工程类——

江苏工业学院图书馆

陈明建 廖永祥

藏书章

西安交通大学出版社

内 容 提 要

本书内容包括数值计算和数值分析的基本概念、线性方程组的数值解法、数据近似、数值微积分、非线性方程求解、常微分方程数值解法和最优化计算方法。本书既着重介绍用数字电子计算机求实践中常见问题数值解的有效方法,又对数值计算中可能出现的问题及其处理方法给以足够的重视和分析,并配以较多的数值计算例子,以说明主要概念、方法和理论及其应用。

本书可作为高等工科院校工程类硕士生和非数学专业大学本科高年级学生“计算方法”课的教材或教学参考书,也可供运用计算机进行数值计算的科技工作者自学或参考。

(陕)新登字 007 号

计 算 方 法 教 程

——工程类——

陈明逵 凌永祥

责任编辑 叶涛

*

西安交通大学出版社出版

(邮政编码 710049)

陕西省富平县印刷厂印装

陕西省新华书店经销

*

开本 850×1168 1/32 印张 10.375 字数:256千字

1992年6月第1版 1992年6月第1次印刷

印数:1—3000

ISBN7-5605-0470-1/O·82

定价:6.90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

前 言

本书是为工程类硕士研究生的学位课程“计算方法”编的教材。“计算方法”课程的主要目的是介绍进行科学计算(Scientific Computation)的方法.即,在数字电子计算机上对来自科学研究和工程实际中的数学问题进行数值处理的方法及其有关的问题.这就决定了本书应包含两方面的内容:一是介绍在计算机上对应用中最常见的问题进行数值处理的可靠方法;二是要阐述科学计算中最基本的概念,如问题的性态、算法的稳定性、计算机中数的表示及其运算特点、误差与精度、计算中可能出现的问题及算法组织和描述等,以便读者能将所学方法应用于实际计算.

科学计算要解决的问题非常广泛,使用的数值方法多种多样,作为对学生进行入门训练的教材,不可能包罗万象.这就必须选取那些解最典型问题并经实践证明在计算机上行之有效的办法.因此,本书在取材上力求反映近代数值计算方法的发展,摒弃较陈旧且不适用的内容,加入一些目前已被广泛使用的方法.如,解最小二乘问题的正交化方法、稀疏矩阵的处理、自适应积分方法、最优化方法等.对实际计算中可能出现的问题及其处理方法,书中都给予足够的重视.由于学时限制,不得不舍去一些需要较多数学基础知识的问题和方法,如代数特征值问题和偏微分方程数值解法等.但这并非憾事,因为深入地讨论一部分典型问题比泛泛地叙述所有问题往往更能使读者深刻领会处理科学计算的主要思想.同时,并不需要读者具备较高的数学修养.凡具备了一般“高等数学”和“线性代数”基本知识的读者,便可顺利地阅读本书.当然,若读者有使用某种程序设计语言在计算机上解题的经验,对阅读本书将会大有帮助.除正文外,书末有三个附录,汇集了阅读本书所需的

数学基础知识,供读者查阅.

本书虽然包含了计算方法的传统内容,如线性和非线性方程求解、多项式插值和近似、数值微分和积分、常微分方程数值解等,但在讲述时,是按照最后形成可靠算法的需要来进行的.方法的推导及有关理论的证明,大都是根据如何构造和使用这些方法而精心组织的.尽可能详细地阐明其意义及处理问题的思想,并以适当的例子和算法描述来帮助读者理解.除第一章外,每章末尾都有一个小结,简要回顾本章所讲内容,并对各种方法予以评介.此外,对当前广泛使用、而本书未予介绍的方法和需要较多数学基础的方法,给以简要介绍并指出参考文献.这样,在学完本书以后,将使读者不但有了进一步学习更多新方法的基础,而且具备了将所学方法应用于实际计算的能力.

学习计算方法的目的是应用.因此,如何组织一个算法,将它在计算机上实现,并能分析计算结果,是本课程的一个重要目的.本书强调了各种方法的算法描述,通过从方法到算法的组织、描述过程,使读者更清楚地了解整个计算过程,加深对所学方法的认识.由于算法描述的目的只在于此,它与具体的程序又有所区别,因此,所有算法描述都力求与课文中的方法一致,致使有些算法不是按最优的方式组织的,但稍加改进,都可成为实用的程序.因而本书也适合于欲用计算机进行科学计算的人们作为自学参考书.

本书全部内容可在 60 学时内讲完.根据需要适当删去一些内容(例如,删去 § 5.3 和第七章),也适用于 50 学时的教学要求.我们特别要强调,要真正掌握并在实际中成功地应用计算方法,除理论知识外,计算经验是非常重要的.因此,建议在课堂理论教学的同时,进行上机实践.根据我们的经验,为配合理论教学,每位学生应有 40 至 50 小时的上机时间.若条件不允许,也可用计算器进行实践.使学生在算法组织、程序编写、上机运行、分析结果等方面得到较全面的训练.

本书是我们多年来在西安交通大学为非数学专业的大学生、研究生讲授“计算方法”的讲稿和讲义的基础上,加以补充、修改、整理而成的.第六章和第七章由凌永祥编写,其余各章及三个附录均由陈明逵编写.

华中理工大学于寅教授和浙江大学李有法副教授仔细地审阅了全书,提出了不少宝贵的修改意见.西安交通大学计算数学教研室部分同志曾用过我们的讲义,为本书的形成和定稿提供了不少建议和帮助.西安交通大学研究生院和西安交通大学出版社对本书的写作和出版给予了大力支持.在此,谨表诚挚的谢意.

由于水平所限,谬误和不妥之处在所难免,恳请同行专家和广大读者不吝赐教.

编者

1991.9. 于西安交通大学



作者简介

陈明远 1940年生。西安交通大学数学系副教授，中国计算数学学会并行算法专业委员会委员。1984年毕业于西安交通大学数理系。长期从事计算数学专业的教学和研究工作。主要研究领域是数值代数、并行算法和应用软件。著有《高等代数》一书，在国内外学术刊物上发表学术论文10多篇。

凌永祥 1946年生。1968年毕业于西安交通大学应用数学专业，1981年获得数学专业硕士学位。多年来一直从事计算数学教学和非线性问题数值方法的研究。近年来发表《关于非线性方程的单调 Steffensen型迭代法》、《可凸分解算子方程的Steffensen型迭代解法》等论文6篇。

目 录

前言

第一章 绪论

§ 1.1 数值计算	(1)
§ 1.2 数值方法的分析	(6)
1.2.1 计算机上数的运算	(7)
1.2.2 问题的性态	(11)
1.2.3 方法的数值稳定性	(15)
§ 1.3 数值算法及其描述	(17)
习题	(21)

第二章 线性代数方程组

§ 2.1 Gauss 消去法	(24)
2.1.1 消去法	(25)
2.1.2 算法组织	(28)
2.1.3 主元	(30)
§ 2.2 矩阵分解	(33)
2.2.1 Gauss 消去法的矩阵意义	(33)
2.2.2 矩阵的 LU 分解	(35)
2.2.3 LDU 分解	(36)
2.2.4 对称正定矩阵	(39)
2.2.5 大型稀疏矩阵	(41)
2.2.6 矩阵分解的应用	(47)
§ 2.3 线性方程组解的可靠性	(49)
2.3.1 误差向量和向量范数	(50)
2.3.2 残向量	(53)

2.3.3	误差的代数表征	(54)
2.3.4	几何意义	(57)
§ 2.4	解线性方程组的迭代法	(59)
2.4.1	基本迭代法	(60)
2.4.2	迭代法的矩阵表示	(62)
2.4.3	收敛性	(64)
2.4.4	算法	(69)
小结		(72)
习题		(73)
第三章 数据近似		
§ 3.1	多项式插值	(79)
3.1.1	多项式插值	(79)
3.1.2	Lagrange 形式	(81)
3.1.3	Newton 形式	(83)
3.1.4	插值公式的误差	(91)
§ 3.2	分段插值	(95)
3.2.1	分段线性插值	(95)
3.2.2	分段二次插值	(98)
3.2.3	三次样条插值	(99)
§ 3.3	最小二乘近似	(107)
§ 3.4	近似函数的形式	(118)
小结		(120)
习题		(121)
第四章 数值微积分		
§ 4.1	内插求积、Newton-Cotes 公式	(126)
4.1.1	Newton-Cotes 公式	(127)
4.1.2	复化求积公式	(130)
4.1.3	步长的选取	(132)
4.1.4	样条函数的应用	(136)

§ 4.2 自适应积分法	(137)
§ 4.3 Romberg 方法	(145)
§ 4.4 数值微分	(149)
小结	(157)
习题	(158)

第五章 非线性方程求解

§ 5.1 解一元方程的迭代法	(160)
5.1.1 简单迭代法	(161)
5.1.2 Newton 方法	(164)
5.1.3 割线法	(167)
5.1.4 区间方法	(169)
§ 5.2 收敛性问题	(173)
5.2.1 简单迭代——不动点	(173)
5.2.2 收敛性的改善	(176)
5.2.3 Newton 法的收敛性	(179)
5.2.4 收敛速度	(182)
§ 5.3 非线性方程组	(185)
5.3.1 简单迭代法	(186)
5.3.2 Newton 法	(189)
5.3.3 Newton 法的简单变形	(193)
小结	(196)
习题	(197)

第六章 常微分方程数值解法

§ 6.1 常微分方程初值问题的数值方法	(199)
6.1.1 Euler 方法及其变形	(200)
6.1.2 多步法	(204)
6.1.3 问题的性态和算法的稳定性	(208)
6.1.4 预估-校正方法	(214)
6.1.5 Runge-Kutta 方法	(225)

6.1.6	微分方程组与高阶方程	(233)
§ 6.2	常微分方程边值问题数值方法简介	(236)
6.2.1	差分离散化	(237)
6.2.2	差分方程组的求解	(238)
小结		(243)
习题		(244)
第七章 最优化方法简介		
§ 7.1	最优化问题	(247)
§ 7.2	一维优化方法	(248)
7.2.1	四等分法	(249)
7.2.2	0.618 法(黄金分割法)	(250)
7.2.3	插值方法	(253)
§ 7.3	无约束优化方法	(256)
7.3.1	基本问题	(256)
7.3.2	梯度法	(258)
7.3.3	变尺度方法	(262)
7.3.4	直接搜索法	(267)
§ 7.4	约束优化方法简介	(272)
7.4.1	Lagrange 乘子法	(272)
7.4.2	梯度法	(274)
7.4.3	罚函数法	(276)
小结		(281)
习题		(282)
附录 I	微积分学的一些结论	(284)
附录 II	矩阵代数	(290)
附录 III	Vandermonde 行列式与 Lagrange 插值多项式	(302)
参考文献		(306)
部分习题答案		(309)

第一章 绪 论

§ 1.1 数值计算

自第一台电子数字计算机(以下简称计算机)于 1946 年问世以来,计算机在科学技术各个领域广泛使用所取得的成就无可辩驳地说明,科学方法的第三个分支——计算的方法——已经建立起来了.今天,除了传统的理论方法和实验方法以外,计算的方法已渗透到自然科学和社会科学的大多数领域中,研究工作和工程设计更加离不开计算的方法.它将许多领域的科学研究工作由定性阶段迅速地推向定量阶段.

计算机的高速计算能力和一定的逻辑功能使它成为数学应用于各领域最有力的工具.由于计算技术和计算数学的发展,对科学研究和工程实际中非常复杂的问题求数值解,例如从适当的计算结构设计和算法分析到物理、化学、生物、工程乃至社会科学中的很多问题,都可以而且必须用计算机才能获得满意的解答.

利用计算机解决实际问题,大多具有一个共同的方式,通常按以下三步进行.

1)建立数学模型.数学模型用来描述研究对象的某些性质,通常用数学方程来表示.为方便计,模型力求简单,但所有有关因素必须以无二义性的方式加以考虑,所以要作相应的假定.例如,在研究天体运动时,假定行星为质点;在研究经济问题时,模型中因素的依赖关系常假定为线性的.为使所确定的模型有意义,描述模型的数学问题必须是适定的.模型的构造及问题适定性的证明一般可用数学推导方式解决.

2) 计算问题的解. 对应用来讲, 只证明了问题的适定性是远不够的, 必须知道具体的解是什么. 例如, 对于空间旅行, 理论上可以证明描述太空船轨迹的微分方程解的存在性, 但若真要实施这一旅行, 如太空船要在月球上着陆, 仅有解的存在性结论是不够的, 必须将航行的路线(轨迹)具体给出来. 这就要求把微分方程的解求出来.

3) 实验验证. 在将计算所得结果应用于实践之前, 必须验证所得结果是否符合客观规律, 这一步是科学实验的一个重要目的. 若计算结果与实验不相符, 必须重新考察前面两步的工作, 予以适当修正、重新计算, 直到获得满意的解答为止.

计算数学的任务主要是用计算机计算出数学问题的数值解. 从这种意义上说, 计算数学是一门辅助性的学科, 它是为各具体学科服务的. 它的着眼点不在于纯数学的、公理化的、独立于具体事物的抽象结论, 而在于(通常来自其它领域的)具体问题的数值解.

计算数学的任务决定了它的研究内容, 这就是寻找求解各种问题的数值方法, 并对它们的数值性质进行研究, 这种研究称为数值分析. 更具体地说, 计算数学首先要构造可计算出各种问题解的数值方法, 将其在计算机上实现, 求出数值解, 然后检查计算解是否可用, 即是否符合实际. 为保证计算解的可靠性, 需要对方法进行分析. 首先分析方法的可靠性, 即, 按此方法计算得到的解是否合理, 与准确解之差是否很小, 以确保计算解有用. 其次, 要分析方法的效率, 分析比较求解同一问题的各种方法的计算速度, 以便使用者根据各自的情况采用高效率的方法, 节省人力和物力, 取得较好的经济效益. 这样的分析是数值分析的一个重要部分. 应当指出, 数值方法的构造和分析是紧密相联不可分割的.

构造数值方法主要借助于数学推导, 因此计算数学同数学的关系十分密切. 下面的两个例子示出了如何用数学推导来构造数值方法.

例 1.1 用数学的方法推导出计算实二次方程

$$ax^2 + bx + c = 0 \quad (1-1)$$

根的方法.

解 方程(1-1)在 $a \neq 0$ 的条件下等价于方程

$$x^2 + \frac{b}{a}x + \frac{c}{a} = 0$$

因对任何 x, a, b 和 c 都有

$$\begin{aligned} x^2 + \frac{b}{a}x + \frac{c}{a} &= x^2 + \frac{b}{a}x + \left(\frac{b}{2a}\right)^2 + \frac{c}{a} - \left(\frac{b}{2a}\right)^2 \\ &= \left(x + \frac{b}{2a}\right)^2 + \frac{c}{a} - \left(\frac{b}{2a}\right)^2 \end{aligned}$$

故 x 是方程(1-1)根的充要条件是

$$\left(x + \frac{b}{2a}\right)^2 = \left(\frac{b}{2a}\right)^2 - \frac{c}{a}$$

从而, 当 $\left(\frac{b}{2a}\right)^2 - \frac{c}{a} \geq 0$, 即 $b^2 - 4ac \geq 0$ 时, 方程(1-1)有实根

$$x = -\frac{b}{2a} \pm \frac{\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (1-2)$$

而当 $b^2 - 4ac < 0$ 时, 方程(1-1)有一对共轭复根

$$x = -\frac{b}{2a} \pm i \frac{\sqrt{|b^2 - 4ac|}}{2a} \quad (1-3)$$

因此, 计算方程(1-1)的根就应该首先判断 $b^2 - 4ac$ 的符号, 然后确定选用式(1-2)还是式(1-3)进行计算. 这样, 我们就借助于数学推导得到计算实系数二次方程根的一种方法.

例 1.2 构造一个求解 n 元线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = \beta_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = \beta_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = \beta_n \end{cases} \quad (1-4)$$

的方法.

解 线性方程组(1-4)可以写成矩阵形式

$$Ax = b \quad (1-4')$$

式中

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

是 n 阶矩阵,称为方程组的系数矩阵.

$$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T, \quad b = (\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_n)^T$$

是 n 维向量,分别称为未知向量和右端向量. 将矩阵 A 按列分块成

$$A = (a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_n)$$

这里, a_j 是 A 的第 j 列,即

$$a_j = (a_{1j}, a_{2j}, \cdots, a_{nj})^T, \quad j = 1, 2, \cdots, n$$

以 b 代替 A 的第 i 列,并根据式(1-4'),便有

$$(a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_{i-1} \ b \ a_{i+1} \ \cdots \ a_n) = (a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_{i-1} \ Ax \ a_{i+1} \ \cdots \ a_n)$$

从而

$$(a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_{i-1} \ b \ a_{i+1} \ \cdots \ a_n) = A(e_1 \ e_2 \ \cdots \ e_{i-1} \ x \ e_{i+1} \ \cdots \ e_n) \quad (1-5)$$

式中, e_j 是 n 阶单位矩阵的第 j 列,即

$$e_j = (0, \cdots, 0, 1, 0, \cdots, 0)^T, \quad j = 1, 2, \cdots, n$$

第 j 个

将等式(1-5)两边取行列式便得

$$\begin{aligned} \det(a_1 \ \cdots \ a_{i-1} \ b \ a_{i+1} \ \cdots \ a_n) &= \det(A) \det(e_1 \ \cdots \ e_{i-1} \ x \ e_{i+1} \ \cdots \ e_n) \\ &= x_i \det(A) \end{aligned}$$

因此,当 A 非奇,即 $\det(A) \neq 0$ 时

$$x_i = \frac{\det(a_1 \ \cdots \ a_{i-1} \ b \ a_{i+1} \ \cdots \ a_n)}{\det(A)} \quad (1-6)$$

对 $i=1, 2, \cdots, n$ 均成立. 上式通常写成形式

$$x_i = \frac{\begin{vmatrix} \alpha_{11} & \cdots & \alpha_{1,i-1} & \beta_1 & \alpha_{1,i+1} & \cdots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \cdots & \alpha_{2,i-1} & \beta_2 & \alpha_{2,i+1} & \cdots & \alpha_{2n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{n1} & \cdots & \alpha_{n,i-1} & \beta_n & \alpha_{n,i+1} & \cdots & \alpha_{nn} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \cdots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \cdots & \alpha_{nn} \end{vmatrix}}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (1-6')$$

这就是计算方程组(1-4)解的公式,称为 **Cramer 法则**.

上面两个例子给出了用数学推导构造求解数学问题的方法,并得到解的公式.但并不是一切问题的解都能用一个代数式表示出来.例如,Galois 证明了五次以上的代数方程不可能用公式求解.事实上,在以后各章将会看到,大多数问题的解不可能用公式来表示.例如,计算函数 $f(x)$ 的积分

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (1-7)$$

只有在极少数情况下才能用 Newton-Leibniz 公式计算,而在一般情况下,取 $h = (b-a)/n$, $x_k = a + kh (k=0, 1, \dots, n)$, 用

$$S = \sum_{k=1}^n f(x_k) h \quad (1-8)$$

计算,无论 n 多么大,都只能获得定积分(1-7)的近似值.用式(1-8)进行计算就是求定积分(1-7)的一种(近似)数值方法.

又如计算初等函数 e^x 在给定点处的值,它不能用一个简单的代数式进行计算.一种近似的替代是用其 Taylor 展开式

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} \quad (1-9)$$

的前面若干项,即

$$S_n = \sum_{k=0}^n \frac{x^k}{k!} \quad (1-10)$$