计算方法基础及题解

王兵团 编著

中国铁道出版社

JISUAN FANGFA JICHU JI TIJIE

封面设计 马 利

责任编辑 赵 静

ISBN 7-113-04843-9

9 787113 048433 >

ISBN 7-113-04843-9/O·102

定 价: 16.60 元

计算方法基础及题解

王兵团　编著

中国铁道出版社
2002年·北京

(京)新登字 063 号

内 容 简 介

本书着重介绍了科学与工程计算中的基本概念、常用算法及其构造处理方法。书中涉及的各种算法均以实际例题引出,由浅入深,以期读者能顺利进入科学计算领域。书中内容编排科学紧凑,适用面广,尤其适用初次接触科学计算的读者。

全书内容有:非线性方程的求根方法,线性方程组的解法,数据逼近方法,数值积分与微分方法,求矩阵特征值与特征向量的方法及常微分方程初值问题的数值解法等。书中的习题全部给出了解答或提示。

本书可作为高等学校非计算数学专业的教材和参考书,也可用于科技人员的自学和参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算方法基础及题解/王兵团编著.—北京:中国铁道出版社,2002.8

ISBN 7-113-04843-9

Ⅰ.计… Ⅱ.王… Ⅲ.计算方法 Ⅳ.0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 058374 号

书　　名:计算方法基础及题解
作　　者:王兵团　编著
出版发行:中国铁道出版社(100054,北京市宣武区右安门西街 8 号)
责任编辑:赵　静　　编辑部电话:021-73133(路)　010-51873133(市)
封面设计:马　利
印　　刷:中国铁道出版社印刷厂
开　　本:880×1230　1/32　印张:7.5　字数:215 千
版　　本:2002 年 8 月第 1 版　　2002 年 8 月第 1 次印刷
印　　数:1～3 000 册
书　　号:ISBN 7-113-04843-9/O·102
定　　价:16.60 元

前　言

在提倡培养学生创新能力的教学改革大环境下，作为现代科学三大组成部分之一的科学计算正越来越受到重视。科学计算的核心是以计算机为工具、以数学模型为基础的模拟研究，因此，随着社会的进步，从事科学研究的人员必须了解和掌握科学计算的有关知识。

计算方法是科学计算的基础，其中的内容不但可以帮助人们了解科学计算的特点、方法及进行简单的科学计算，而且它还涉及到很多科学研究的方法和现代数学的概念，这对提高科研素质和学习现代数学知识是很有益处的。

本书在选材上主要选择科学计算中常用的有代表性的算法及其概念与处理技术，目的是使读者在学完此书后能对科学计算有基本的了解，并能在思想上建立起科学计算的意识，在所遇到的一些计算问题上少犯错误。书中的每个算法均突出构造与分析部分。为有助于理解和应用，所讲的算法都配以相应的例题。根据作者多年讲授计算方法课程的经验和科学研究的体会，本书采用了一种新的编写方式，这种方式突出了相关概念和内容的联系与衔接，加入了现代数学知识，层次清晰，强调算法的构造过程与应用，弱化了所讲内容的枯燥性，便于自学。为帮助读者提高学习效率及对科学计算有比较深入的认识，书中加入了学习导引和习题解答部分，读者在学习本书之前最好先阅读学习导引部分，以便对计算方法能做什么有个大致的了解，并能在计算方法的学习中有意识地学习其中的科学方法。

本书涵盖了非计算数学专业计算方法课几乎所有算法，定位于非计算数学专业的本科生和研究生。学习本书要求读者具有高等数学和线性代数方面的一些知识，为便于缺乏这方面知识的读者学习，书中将要用到的高等数学和线性代数的有关概念以附录形式给出。此外，为使读者能尽快使用计算机编程实现算法，书中最后还以附录的形式简单介绍了易学易用的 Matlab 软件。

本书适用面广，内容具有伸缩性。全部讲授需 60 学时，选学部分章

节和内容也可满足少学时的教学需要。书中带有“*”号部分主要用于开阔学生知识面，可酌情讲授。

本书初稿曾在北方交通大学的本科生和研究生中使用过多次，此次出版作者又进行了全面的整理和补充，并经过北京科技大学刘钦圣教授和北方交通大学陈立成教授的仔细审阅，北方交通大学刘迎东副教授和冯国臣老师对本书提出了很多宝贵意见和建议，北方交通大学教务处资助了本书的编写，谨在此向他们表示衷心的感谢。

由于作者水平有限，书中不当之处在所难免，敬请同行和读者批评指正。

编　者

2002年5月于北京

学 习 导 引

科学计算是现代科学的三大组成部分之一,其核心内容是以计算机为工具、以数学建模为基础的模拟研究,在国外被认为是21世纪技术科学中最有用的两个数学研究领域的一个。计算方法是帮助读者学习和了解怎样借助计算机来进行实际中遇到的数学问题的计算和求解的基本课程。由于计算方法中涉及科学研究方法和创新思想几乎无处不在,了解科学研究方法论的人会发现整个计算方法的内容本身就是科学研究方法的实际应用,其每个算法的构造过程都是科学方法的具体实现。因此,学习计算方法除了能学习科学计算的常用算法和数值计算的基本概念等重要内容外,还能培养读者的创新能力和提高读者的素质。此外,纵观计算方法所涉及的内容,可以看到它们几乎是由一个个运用科学研究常用方法解决问题的成功范例组成的,这些素材在当前提倡素质教育的教学改革中尤为显得重要。为使读者能学好计算方法,下面对本书的基本内容和涉及的科学方法素材给出简要说明和解释。

* 本书的基本内容

1.怎样求解非线性方程的根

如:怎样求方程 $x^3+2x-\cos x=0$ 的根或一般的函数方程 $f(x)=0$ 的根?此类问题在高等数学的介值定理中只给出了根的存在范围,但没有给出怎样把根求出来的方法。计算方法在解决此类问题中给出了很多有效的方法,学完了计算方法,函数方程 $f(x)=0$ 的求根问题将难不倒你。

2.怎样求解大型线性方程组的解

线性方程组的求解在线性代数中给出了几种解法,对低阶线性方程组你可能会解,但对实用中的大型线性方程组(如 10 000×10 000 阶)你想过应怎样求解吗?学完了计算方法,你将学到用计算机求解线性方程组的一些方法,并能有效地解决许多大型线性方程组的求解问题。

3.怎样利用函数的一组函数值来推断该函数的其他函数值或近似函数

若已知某些变量存在函数关系但其关系式不知道,或要处理的函数太复杂,想用一个较简单的函数取代之,怎样解决这样的问题? 前者是为一组离散数据建立连续模型的问题,而后者是函数逼近问题。计算方法在解决此类问题中有很多方法,而且还能对未知函数计算导数值。学完了计算方法,你将学到解决此类问题的一些方法和理论。

4.怎样计算定积分

若遇到一个不能用定积分基本公式计算的定积分,或当被积函数的表达式过于复杂,怎样计算这样的定积分? 计算方法可以很好地解决此类问题,而且还能计算反常积分。学完了计算方法,你将学到用计算机求定积分的一些方法,并不再被此类问题所困。

5. 怎样求常微分方程初值问题的解

常微分方程初值问题就是常微分方程特解问题,在高等数学中只介绍几个典型的常微分方程的解法,对一般的常微分方程,如怎样求方程 $y'+2x-\sin(xy)=0, y(0)=1$ 的特解? 用高等数学中介绍的方法将解不出来。计算方法中给出了在计算机上求解一般常微分方程特解的方法,学完了计算方法,你将学到解决此类问题的一些方法,并能了解到其求解方式。

6. 怎样求矩阵的特征值和特征向量

求矩阵的特征值及特征向量的问题在实际问题中也经常遇到,在线性代数中给出了方法,同样那里的方法对低阶(小于 5 阶)的矩阵的特征值及特征向量求解还能有效,但对大于 4 阶的矩阵特征值及特征向量求解一般是很困难的。计算方法对此类问题也有有效的计算机解法。

* 计算方法中培养创新能力的素材

1.计算方法中的改进方法

科学创新中最常用的一种方法是对已有的科学结论做改进而得到新的结论,这种“改进”方法是进入科学研究的第一步,该方法简单、有效,可以较好地培养读者发现问题和解决问题的能力。计算方法内容里有很多这方面实际例子,如:非线性方程求根的割线法是发现牛顿迭代公式中要求函数可导及要进行导数计算的不足而对牛顿迭代公式做改进得出的;线性方程组求解的赛德尔迭代法是发现雅可比迭代法中没有及时利用已

经算出的数值而做的一个改进,它只是在计算向量各分量时,及时把已经算出的向量分量值用于后面分量的计算而产生的一个新算法;而选主元方法是对高斯消元法的改进,它是发现高斯消元法有时不能有效求出线性方程组解的不足,以误差理论为依据采用在每次做高斯消元时先挑选主元的方式得出的新方法,诸如此类等等都是这方面的例子,其特点都是发现已有结论的不足而对其进行改进得出的。虽然所做的改进工作并不复杂,但得出的结果却很有效。这些例子简单有效,可以很好地帮助读者学习这种“改进”科学研究方法。

2.计算方法中的近似处理方法

对实际问题的合理近似或简化往往是解决问题的关键,而且它往往能产生重要的科学发现。计算方法中的很多方法都是经过近似处理得出的,如:数值积分和数值微分方法及常微分方程初值问题的数值解法等,其中,对连续系统的离散化处理更是贯穿在计算方法的整个内容中。在实际问题中,采用适当近似处理得出的问题的方法不一定比用准确处理得出的方法差,而且有时还能得到更好的方法。计算方法课程中的内容给出了这方面令人信服的例子,如:方程求根方法中,严格地利用方程等价变换得出的求根迭代公式一般是线性敛速的,而采用近似处理方法,把求根方程作线性化近似处理可以得出收敛更快的牛顿迭代公式。应该指出的是由近似处理得出的在实用中有效方法虽说起初看起来是不严密的,但实践表明这样得到的方法还是具有严密的理论基础的。例如,对求根方程作线性化近似处理得出的牛顿迭代公式可以用准确的迭代理论证明其收敛于方程的根且具有平方敛速。通常,由近似处理得到的结果需晚些时候随着人们对其认识的增加才能给出严格的证明。目前,在我们的教育体制中,往往特别强调培养学生的严密思考方法,这对培养学生严格的科学态度当然是有益处的,但对此强调得过多而忽视对问题的带有误差的近似性解决方法往往会制约学生的创造性思维,不利于学生的创新,因此,要培养学生的创新精神,让他们学习采用近似处理解决问题的方法是非常必要的。

3.计算方法中的类比方法

类比方法是把已经有的结果推广到其他问题上,常常是在新领域中获得重要结果的最便捷的方法,可以培养读者快速进入不熟悉的领域进

行科学研究的能力，这种研究方法在计算方法中的例子也有很多，如：插值问题中的埃尔米特插值方法就是把拉格朗日插值的基函数方法推广到带有导数信息的插值问题中得到的；非线性方程组的牛顿迭代法就是把构造非线性方程求根的牛顿迭代法的线性化方法推广到非线性方程组问题中得到的，类似的，还有函数逼近问题中的最佳平方逼近是曲线最小二乘拟合方法的推广；求特征值问题中的 QR 方法是雅可比方法的推广等。此外，很多数学分支学科就是对于某一类或某些已知的知识，通过采用类比的科学研究方法得出的。

目　　录

第1章　绪　　论

本章主要介绍科学计算的特点及与计算方法有关的知识和概念，对了解和学习计算方法，以及今后从事科学计算工作都是很有帮助的。

1.1　学习计算方法的重要性

科学计算是用计算机进行数学计算的，很多人，甚至为数不少的一些科研人员，常常认为只要把涉及到的一些数学公式，用一种计算机语言正确编程，计算机就一定能给出正确的结果，问题是这样简单吗？请看下面的例子。

【例1.1】 求一元二次方程

$$x^2-(10^9+4)x+4\times10^9=0$$

的根。

解　常用的一元二次方程求根公式为

$$x_{1,2}=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

式中，a，b，c 分别为二次项系数、一次项系数和常数项。若利用这个公式编程并在字长为8位的计算机上计算，得到的结果为 $x_1=10^9$，$x_2=0$，易验证本题的两个根为 $x_1=10^9$，$x_2=4$，可见计算机给出的计算结果不对。

【例1.2】 计算数列　$I_n=\int_0^1\frac{x^n}{x+5}\,\mathrm{d}x$。

解　因为

$$\begin{aligned}I_n&=\int_0^1\frac{x^n+5x^{n-1}-5x^{n-1}}{x+5}\mathrm{d}x\\&=\int_0^1x^{n-1}\,\mathrm{d}x-5\int_0^1\frac{x^{n-1}}{x+5}\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{n}-5I_{n-1}\end{aligned}$$

得到计算 I_n 的递推公式

$$I_n = -5I_{n-1} + \frac{1}{n} \qquad (n=1,2,\cdots) \tag{1.1}$$

由 $I_0=\int_0^1 \frac{1}{x+5}dx=\ln 6-\ln 5$ 可依次算出 $I_1,I_2,\cdots,I_n$。现在把式(1.1)用计算机编程来计算，会发现当 n 较大时，I_n 的计算结果出现负数，例如在字长为 8 的计算机上编程计算，可出现 $I_{12}=-0.329\,021\,10\times 10^{-2}$，这显然是错误的，因为 I_n 的被积函数在积分区间上是非负的，故总应有 $I_n\geqslant 0$ 才对。

除了上面的两个例子之外，还有很多计算机可以产生错误结果的例子，在此不再列举了。这些例子说明，并不是把科学计算中涉及的数学公式机械地编程计算就一定能得到正确的结果，这其中有很多值得认识和探讨的问题。当然这里并不是否定计算机在科学计算中的作用，事实上，计算机正是由于可以进行科学计算才发展起来的。用计算机做科学计算时绝大部分情况下都能得到所需要的准确的结果，但若在用计算机做科学计算时对可能出现的问题有所警惕并注意采用合适的方法计算，我们就能少犯或不犯错误。怎样使计算机的计算结果可信和尽量减少出错的情况，在科学计算中是非常重要的，因为错误的计算结果会产生错误的结论或否定原来正确的数学模型，这会给科研工作带来很大的损失。

现在很多科学研究和工程问题的解决都是借助计算机进行的，通常用计算机解决实际问题有如下四个步骤：①**建立数学模型**；②**选择数值方法**；③**编写程序**；④**上机计算**。

建立数学模型是对实际问题进行分析后，根据其内在规律做出简化假设，并运用适当的数学工具来得到一个适定的数学问题，其表现形式可能是一个方程组、一个函数极小化、一个积分计算式、一个微分方程以及它们的不同组合等。建立数学模型需要一定的专业知识。

选择数值方法是为已建立的数学模型选择合适的一个或几个数值计算方法，以用于编程和计算。这里要考虑的问题是所选择的方法能否达到要求的精度、方法的计算量是否太大、程序能否实现以及方法对数据的微小扰动反应是否敏感等。这些问题正是计算方法所研究和讨论的，了解了如何处理这些问题，就可以最大限度地保证计算机的求解少犯错误。

编写程序是根据所选的数值计算方法，用计算机语言写出源程序。