

TONGJIDAXUECHUBANSHE

燃气工程电算方法

冯良 张同 全惠君 编著



同济大学出版社

内 容 提 要

本书针对燃气管网计算分析中遇到的一些数值计算原理,较系统地介绍了非线性方程、线性方程组、插值与拟合、数值积分和微积分的计算原理和数值分析方法,并结合燃气管网,重点介绍了网络拓扑的基本概念、拓扑矩阵的计算机形成方法、稀疏矩阵技术和非线性方程组的迭代解法。书中所述算法程序均经实际调试,具有较实用的价值。

本书供燃气工程专业学生作教材使用,同时,也可供燃气工程技术人员参考。

责任编辑 胡兆民

封面设计 陈益平

燃气工程电算方法

冯 良 张 同 全惠君 编著

同济大学出版社出版

(上海四平路1239号)

新华书店上海发行所发行

上海青年报印刷厂印刷

开本: 787×1092 1/16 印张: 5 字数: 125千字

1998年2月第1版 1998年2月第1次印刷

印数: 1~1000册 定价: 6.00元

ISBN 7-5608-1820-X/TP·201

目 录

第一章 方程求根	(1)
§ 1.1 二分法	(1)
§ 1.2 定点迭代法	(4)
§ 1.3 牛顿法	(5)
§ 1.4 弦截法	(8)
第二章 线性方程组的数值解法	(11)
§ 2.1 迭代法	(11)
§ 2.2 列主元高斯消去法	(14)
§ 2.3 追赶法	(18)
§ 2.4 线性方程组的分解法	(20)
第三章 插值与拟合	(24)
§ 3.1 一元 n 点插值	(24)
§ 3.2 分段插值	(26)
§ 3.3 最小二乘法与曲线拟合	(28)
第四章 数值积分和微分方程数值解法	(32)
§ 4.1 变步长梯形数值积分	(32)
§ 4.2 变步长辛卜生求积法	(34)
§ 4.3 一阶微分方程边值问题的数值解法	(36)
§ 4.4 二阶微分方程边值问题的数值解法	(39)
第五章 网络拓扑基础	(43)
§ 5.1 基本概念	(43)
§ 5.2 拓扑矩阵方程	(44)
§ 5.3 拓扑矩阵的计算机形成	(48)
第六章 稀疏矩阵技术	(55)
§ 6.1 引言	(55)
§ 6.2 不考虑压缩的稀疏矩阵技术	(55)
§ 6.3 实对称矩阵的稀疏矩阵技术	(58)
第七章 燃气管网的分析	(63)
§ 7.1 节点分析法	(63)
§ 7.2 节点方程的直接形成	(64)
§ 7.3 管网非线性方程组的迭代算法	(66)
§ 7.4 应用举例	(70)
参考文献	(75)

第一章 方程求根

本章主要讨论数学的一个基本问题——求给定方程的根。对于高于四次的代数方程，一般不存在通用的求根公式来计算其准确解，超越方程一般也不能求出其准确解，即此时不用解析法求方程的根，而只能用数值方法求方程的近似根。

一般方程式 $f(x)=0$ 的根或解是指使 $f(x)$ 等于零的那些 x 值。方程 $f(x)=0$ 可能无根，也可能有单根、多根甚至无限多根。本章着重讨论多项式方程的数值计算方法求根。设 m 次多项式方程的一般形式为

$$f(x) = a_m x^m + a_{m-1} x^{m-1} + \cdots + a_1 x + a_0 = 0 \quad (1-1)$$

式中， $a_m, a_{m-1}, \cdots, a_0$ 是已知常数。

方程求根通常分两步走：第一步先确定根的某个粗略的近似值所谓“初始近似值”，然后再将初始近似值逐步加工成满足精度要求的结果。本章介绍几种常用的计算方法。

§ 1.1 二分法

设函数 f 在区间 $[a, b]$ 上连续，且 $f(a), f(b)$ 异号，则在 (a, b) 内至少有一点 x ，使得方程 $f(x)=0$ 。这样的点 x 叫做函数 f 的一个零点（或根）。

令 s 为区间 $[a, b]$ 的中点，若 $f(s) = 0$ ，则 s 是函数 f 的一个零点，若 $f(s) \neq 0$ 则以下不等式之一成立： $f(s)f(a) < 0$ 或 $f(s)f(b) < 0$ 。在第一种情况下，区间 (a, s) 至少含有函数 f 的一个零点，在第二种情况下，函数 f 在区间 (s, b) 中至少含有一个零点。对重新起 $[a, b]$ 区间作用的 $[a, s]$ 或 $[s, b]$ 逐次地重复上述步骤，我们可以任意精确地求得 f 的零点。该逼近过程称为二分法。图 1-1 说明了它的应用，图中， x_2, x_3, x_4 表示逐次得到的中点。

在实际的方程求解过程中，可采用具体做法如下：

从左端点 $x = a$ 出发，按某个预选的

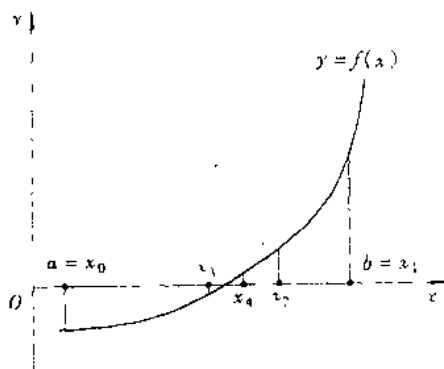


图 1-1 二分法的说明

步长 h ，一步一步向右跨，每跨一步进行一次根的“扫描”，即检查每一步的起点 x_0 和终点 $x_0 + h$ 的函数值。对于每一个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ ($x_{i+1} = x_i + h$):

若 $f(x_i) = 0$ ，则 x_i 为一实根，且从 $x_i + h/2$ 开始再往后搜索；

若 $f(x_i)f(x_{i+1}) = 0$ ，则 x_{i+1} 为一实根，且从 $x_{i+1} + h/2$ 开始再往后搜索；

若 $f(x_i)f(x_i + h) > 0$ ，则说明当前小区间内无实根，从 x_{i+1} 开始再往后搜索；

若 $f(x_i)f(x_i + h) < 0$ ，则说明当前小区间内有一实根。此时，反复将区间减半，直到区间长度小于 ϵ 为止，区间的中点即为方程的一个实根。然后再从 x_{i+1} 开始往后搜索。其中 ϵ 为预先给定的精度要求。

以上过程一直作到整个区间端点 b 为止。

在求方程的实根时，要注意步长 h 的选择。若步长 h 选得过大，可能会导致某些实根的丢失；若步长 h 选得过小，则计算工作量太大。

需要注意的是，由于函数的符号在一个偶数重根的邻域内不改变，所以通常不能用二分法求得偶数重根。

二分法的 FORTRAN 子程序如下：

哑元说明：

A——实型变量，输入参数。求根区间的左端点。

B——实型变量，输入参数。求根区间的右端点。

H——实型变量，输入参数。搜索求根时采用的步长。

EPS——实型变量，输入参数。预先给定的精度要求。

X——实型一维数组，长度为 N ，输出参数存放所有的单实根（前 M 个）。

N——整型变量，输入参数。方程根个数的预估值，也即一维数组 X 的长度。

M——整型变量，输出参数。求根区间内方程实根的实际个数。若 $M = N$ ，则有可能在求根区间 (a, b) 内实根围搜索完。

F——实型函数名，输入参数。用于计算方程 $f(x) = 0$ 。

```
subroutine dlrt(a, b, h, eps, x, n, m, f)
real h
dimension x(n)
m = 0
x1 = a
100 f1 = f(x1)
x2 = x1 + h/2.0
f2 = f(x2)
if(abs(f1) .lt. eps) then
  m = m + 1
  x(m) = x1
  x1 = x1 + h/2.0
elseif(abs(f2) .lt. eps) then
  m = m + 1
  x(m) = x2
  x1 = x2 + h/2.0
```

```

elseif(f1 * f2 .gt. 0.0) then
    x1 = x2
elseif(f1 * f2 .lt. 0.0) then
200  x3 = (x1 + x2)/2.0
    f3 = f(x3)
    if(f1 * f3 .gt. 0.0) then
        x1 = x3
        f1 = f3
    else
        x2 = x3
        f2 = f3
    endif
    if(abs(x2 - x1) .gt. eps .and. abs(f3) .gt. eps) goto 200
    m = m + 1
    x(m) = x3
    x1 = x3 + h/2.0
endif
if(x1 .lt. b + h/2.0 .and. m .ne. n) goto 100
return
end

```

【例】 求方程

$$f(x) = x^6 - 5x^5 + 3x^4 + x^3 - 7x^2 + 7x - 20 = 0$$

在区间 $[-2, 5]$ 内的全部单实根。取步长 $H = 0.2$, $\epsilon = 0.000001$ 。方程中各系数均为准确值。

因为这是一个 6 次方程, 最多有 6 个实根, 取 $N = 6$ 。

要求计算结果取到小数点后 5 位。

主程序及函数子程序如下:

```

dimension x(6)
external f
call dbrt(-2.0, 5.0, 0.2, le=6, x, 6, m, f)
write(*, 10)m
10  format(1x, 'm = ', i2)
do 20 i = 1, m
20  write(*, 30)i, x(i)
30  format(1x, 'x('i2, ') = ', e15.6)
end

function f(x)
f = (((((x - 5) * x + 3) * x + 1) * x - 7) * x + 7) * x - 20.0
return
end

```

运算结果如下:

$$m = 2$$

$$x(1) = - .140246E + 01$$

$$x(2) = .433376E + 01$$

§ 1.2 定点迭代法

如果一个单变量的非线性代数方程

$$f(x) = 0$$

可以表达为

$$f(x) = x - F(x) = 0$$

的形式,则解方程就等效于解方程

$$x = F(x) \quad (1-2)$$

我们称上式为函数 $f(x)$ 的定点式,并且称 $f(x)$ 的正确解 x^* 为函数 $F(x)$ 的定点。

定点式的求解可以通过逐步猜试的办法来实现。比如,先任选初始猜值 $x = x^0$,显然 x^0 不会恰好就是 x^* ,所以需要继续猜试。在一定的条件下,可以证明,如果将 $x^1 = F(x^0)$ 作为第二个猜值,它会比 x^0 更接近 x^* ,即有 $|x^1 - x^*| < |x^0 - x^*|$ 。所以,依次类推,就可以得到所谓的定点迭代算法,其步骤如下:

(1) 给定某允许误差值 ϵ ,并任选初始猜值为 x^0 。令 $j=0$, $x^{(j)} = x^0$ 。

(2) 计算 $x^{(j+1)} = F(x^{(j)})$ 。

(3) 若 $|x^{(j+1)} - x^{(j)}| < \epsilon$,则算法终止,否则转(4)。

(4) 令 $j = j + 1$,转(2)。

定点迭代法的几何意义可以用图 1-2 来加以说明。图中曲线 $y = F(x)$ 与直线 $y = x$ 的交点所对应的就是方程的正确解 x^* ,即函数 $F(x)$ 的定点。定点迭代法的全部过程对应于图中的折线路径,其中箭头代表过程进行的方向。首先在曲线上任选一点起始点 a(对应于初始猜值 x^0),然后过 a 点作平行线交直线于 b 点(它的横坐标 x^1 就是第二个猜值),再过 b 点作垂直线交曲线于 c 点,然后再过 c 点作平行线交直线于 d 点(它的横坐标 x^2 就是第三个猜值),……如此继续下去,直到这些交点逐步逼近到定点为止。

可以验证图 1-2 所示的例子。不管选择什么起点,定点迭代法总会收敛到定点。但是,这并不表明对于所有的情况应用定点迭代法都会收敛。例如,对于图 1-3 所示的情况,选择任何起点算法都是发散的。

【例】 用迭代法求以下方程的根:

$$f(x) = x^2 - \sqrt{x} - 3 = 0$$

精度要求为 $\epsilon = 0.000001$,最大迭代次数为 60。

我们取 $x = F(x) = (3 + \sqrt{x})^{1/2}$,因此它的迭代公式为

$$x_{n+1} = (3 + \sqrt{x_n})^{1/2}$$

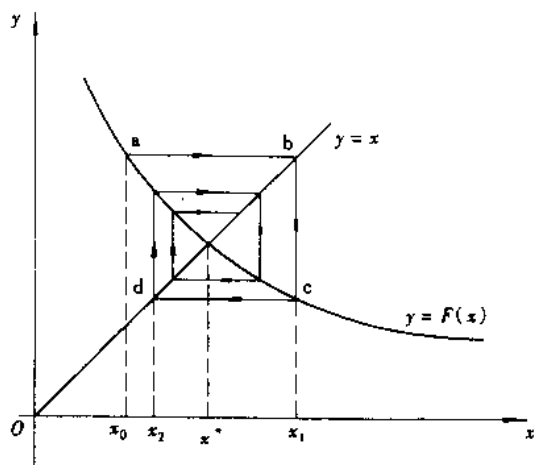


图 1-2 定点迭代法的几何意义

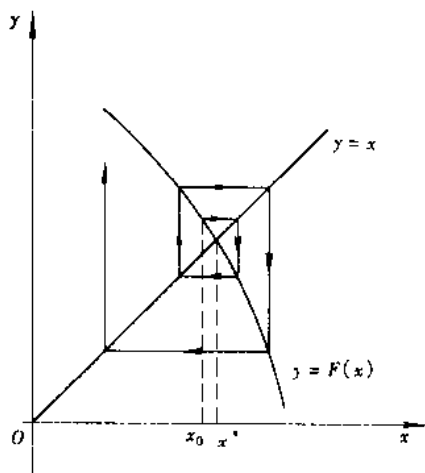


图 1-3 定点迭代法的发散情况

FORTTRAN 程序如下:

```

f(x) = sqrt(3 + sqrt(x))
l = 60
x0 = 2.0
eps = 0.000001
10  x1 = f(x0)
    if(abs(x1 - x0) .gt. eps .and. l .gt. 0)then
        l = l - 1
        x0 = x1
        goto 10
    endif
    write(*,20)x1
20  format(1x,'x = ',e12.6)
    end

```

运行结果为

x = .211012E + 01

§ 1.3 牛顿法

牛顿法是求解方程 $f(x) = 0$ 的一种重要的迭代法。这种方法的基本思想是设法将非线性方程 $f(x) = 0$ 逐步转化为某种线性方程来求解。

假定 $x = x^{(j)}$ 为第 j 次的猜值,且假定它还不是正确解,即 $f(x^{(j)}) \neq 0$,于是,可以将 $f(x)$ 在 $x = x^{(j)}$ 处进行泰勒展开:

$$f(x) = f(x^{(j)}) + f'(x^{(j)})(x - x^{(j)}) + \text{高次项}$$

若令下一个猜值为 $x = x^{(j+1)}$ 很接近正确解,从而使得 $x^{(j+1)} - x^{(j)}$ 非常小,忽略上式中

的高次项,得近似式:

$$f(x^{(j+1)}) = f(x^{(j)}) + f'(x^{(j)})(x^{(j+1)} - x^{(j)})$$

因为我们希望 $x^{(j+1)}$ 是方程的解,所以应该选择 $x^{(j+1)}$,使得 $f(x^{(j+1)}) = 0$,于是有

$$f(x^{(j)}) + f'(x^{(j)})(x^{(j+1)} - x^{(j)}) = 0 \quad (1-3)$$

再从上式解出 $x^{(j+1)}$,就得到牛顿迭代公式:

$$x^{(j+1)} = x^{(j)} - f(x^{(j)})/f'(x^{(j)}) \quad (1-4)$$

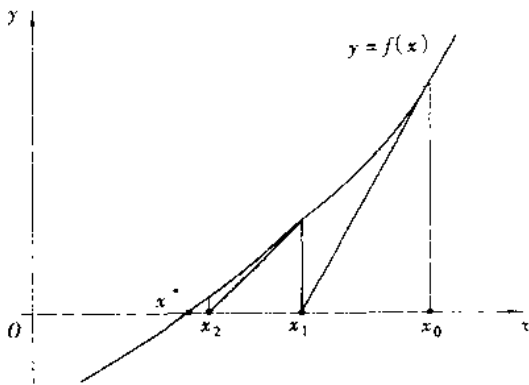


图 1-4 Newton 法的说明

牛顿迭代法的几何意义可以用图 1-4 来加以说明。图中曲线 $y=f(x)$ 与 x 轴的交点就是一个非线性代数方程 $f(x)=0$ 的解点。假定 $P^{(j)}$ 为曲线上与 $x^{(j)}$ 相对应的点,在这一点上的曲线斜率为 $f'(x^{(j)})$ 。根据牛顿迭代公式,得下一个迭代点的 $x^{(j+1)}$ 是从原点到曲线上过 $P^{(j)}$ 点切线与 x 轴交点的距离,从而得到下一个迭代点 $P^{(j+1)}$ 。重复上述步骤,迭代可以很快收敛到解点。

牛顿法的收敛性与初始猜值的好坏有关,这是在推导牛顿迭代公式时所作假定的必然结果。当初始猜值远离解点时,算法可能发散。

显然,用牛顿迭代法只能求方程的一个实根。可以证明,当方程 $f(x)=0$ 满足以下条件:

- (1) $f(x)$ 在闭区间 $[a, b]$ 上, $f'(x)$ 与 $f''(x)$ 均存在,且各自保持固定符号;
- (2) $f(a) \cdot f(b) < 0$;
- (3) $f(x_0) \cdot f''(x) > 0$, $x, x_0 \in [a, b]$

则方程 $f(x)=0$ 在区间 $[a, b]$ 上有且只有一个实根,取初值 x_0 ,有牛顿迭代格式:

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n) \quad (1-5)$$

计算得到的序列 $x_0, x_1, \dots, x_n, \dots$,收敛于方程 $f(x)=0$ 的根。

结束迭代过程的条件为

$$|f(x_{n+1})| < \epsilon \text{ 和 } |x_{n+1} - x_n| < \epsilon$$

其中, ϵ 为预先给定的精度要求。

牛顿法 FORTRAN 子程序如下:

哑元说明:

x ——实型变量,输入兼输出参数。调用时存放迭代初值;返回时存放方程实根的近似值。

eps ——实型变量,输入参数。预先给定的精度要求。

fs ——子程序名,输入参数。用于计算方程 $f(x)=0$ 的左端函数的值与导数值。

l ——整型变量,输入兼输出参数。输入时用于控制迭代次数,输出时,如果 $l=0$,则说明求根没满足精度或迭代发散。

q ——逻辑变量,输出参数,当导数为 0 时, q 为假。

```

subroutine newton(x, eps, fs, l, q)
logical p, q
call fs(x, f, df)
p = .true.
if(df .ne. 0.0)then
    q = .true.
else
    q = .false.
endif
100 if(1 .gt. 0. and .p. and .q)then
    x1 = x - f/df
    if(abs(x1 - x) .lt. eps. or .abs(f) .lt. eps)then
        p = .false.
    else
        l = l - 1
        x = x1
        call fs(x, f, df)
        if(df .eq. 0.0)q = .false.
    endif
    goto 100
endif
return
end

```

【例】 设方程

$$f(x) = x^3 - x^2 - 1 = 0$$

导函数为

$$f'(x) = 3x^2 - 2x$$

求此方程在 $x_0 = 1.5$ 附近的一个实根, 取 $\epsilon = 0.000001$, 最大迭代次数为 60 次。

```

logical q
external fs
x = 1.5
eps = 1e - 6
l = 60
call newton(x, eps, fs, l, q)
if(q)then
    if(1 .eq. 0)then
        write( *, * )'err1'
    else
        write( *, 10)x
    endif
else

```

```

write( *, * )'err2'
endif
10 format(1x, 'x = ', e15.6)
end

subroutine fa(x, f, df)
f = x * x * (x - 1.0) - 1.0
df = 3.0 * x * x - 2.0 * x
return
end
运行结果为:
x = .146557E+01

```

§ 1.4 弦截法

牛顿法的突出优点是收敛速度快,但它有个明显的缺点:需要计算导数 $f'(x)$,如果函数 $f(x)$ 比较复杂,使用牛顿迭代公式是不方便的。

在执行二分法时,我们每次把区间分为两个相等的部分。现对二分法加以修正,依照区间端点上函数值之比来划分区间,即成为所谓的试位法。因为在一个小区间上,可把 f 近似看成为一线性多项式,所以在 f 是可微的情况下,该过程应该是合理的。

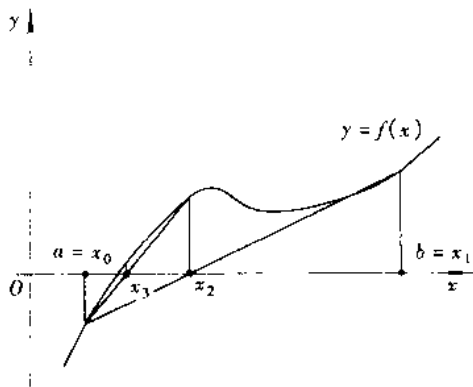


图 1-5 试位法的说明

令 $[a, b]$ 是初始区间,满足条件 $f(a)f(b) < 0$; 则 s 定义为 x 轴和联结两点 $(a, f(a))$ 、 $(b, f(b))$ 的弦的交点。若 $f(s) = 0$, 则 f 的一个零点已经找到,故算法结束,若 $f(s)f(a) < 0$, 则区间 (a, s) 含有 f 的一个零点,而若 $f(s)f(b) < 0$, 则区间 (s, b) 至少含有 f 的一个零点。对缩减的区间逐次地重复上述过程,则从初始项 $x_0 = a, x_1 = b$ 出发,可获得一个序列 $x_k (k=0, 1, 2, \dots)$, 如图 1-5 所示,考虑上述方法的一般步骤,设在 k 步获得的区间以点 x_j 和 x_k 作为端点,则连结点 $(x_k, f(x_k))$ 和点 $(x_j, f(x_j))$ 的弦的方程形式为

$$y - f(x_k) = \frac{f(x_j) - f(x_k)}{x_j - x_k} (x - x_k)$$

由此推得弦和 x 轴的交点是 x_{k+1} , 其中

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_j)}{f(x_k) - f(x_j)} \quad (1-6)$$

能够证明,对连续函数 f , 序列 $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ 收敛且其极限等于函数 f 的一个零点。

如果从牛顿法出发,为了避免导数的计算,我们用差商

$$\frac{f(x^{(j)}) - f(x^{(j-1)})}{x^{(j)} - x^{(j-1)}}$$

替换牛顿迭代公式中的导数 $f'(x^{(j)})$, 得到下列离散化形式:

$$x^{(j+1)} = x^{(j)} - f(x^{(j)}) (x^{(j)} - x^{(j-1)}) / (f(x^{(j)}) - f(x^{(j-1)})) \quad (1-7)$$

上式即为弦截法的迭代公式。

图 1-6 为弦截法前三步的几何意义。曲线 $y = f(x)$ 上取两点 P_{j-1}, P_j , 对应的横坐标为 x_{j-1}, x_j , 则差商

$$\frac{f(x^{(j)}) - f(x^{(j-1)})}{x^{(j)} - x^{(j-1)}}$$

即为弦 $P_{j-1}-P_j$ 的斜率。因此,按迭代公式求得的 $x^{(j+1)}$ 实际上是弦 $P_{j-1}-P_j$ 与 x 轴的交点,因此,这种算法称为弦截法。

在试位法中,每一步对应函数值的符号决定缩减区间的选择。但在凸函数或凹函数的情况下,每一个缩减区间的端点与初始区间的端点相重合,所以缩减区间的长度不趋于零。弦截法实际上是每一步选择 $j = k - 1$ 的试位法。显然,弦截法和牛顿法一样具有较快的收敛速度,但是它与初始猜值的好坏有关。当初始猜值远离解点时,算法可能发散。另外,虽然弦截法省略了计算导数,但它需要两个初值。

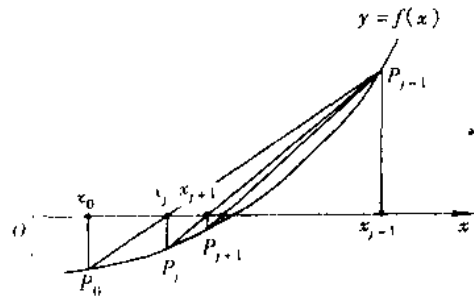


图 1-6 为弦截法的说明

弦截法 FORTRAN 子程序如下:

哑元说明:

$x0$ ——实型变量,输入参数。调用时存放迭代初值 1;

$x1$ ——实型变量,输入参数。调用时存放迭代初值 2;

eps ——实型变量,输入参数。预先给定的精度要求。

f ——子程序名,输入参数。用于计算方程 $f(x) = 0$ 的左端函数的值与导数值。

l ——整型变量,输入兼输出参数。输入时用于控制迭代次数,输出时,如果 $l = 0$,则说明求根没满足精度或迭代发散。

```

subroutine xj(x0, x1, eps, l, x2)
  n = 1
  fx0 = f(x0)
  fx1 = f(x1)
10  x2 = x0 - fx0 * (x0 - x1) / (fx0 - fx1)
  fx2 = f(x2)
  if(abs(x2 - x1).gt.eps.and.n.le.l)then
    x0 = x1
    fx0 = fx1
  
```

```

        x1 = x2
        fx1 = fx2
        n = n + 1
        goto 10
    endif
return
end

```

【例】 求方程

$$f(x) = x^3 - 7.8x^2 + 18.5x - 11.3 = 0$$

在 1.0 附近的一个实根, 取精度 $\epsilon = 0.000001$, 最大迭代次数为 60 次。

```

external f
eps = 1e - 6
l = 60
call xj(0.0, 1.0, eps, l, x2)
write( *, 10)x2
10  format(1x, 'x = ', e12.6)
end

function f(x)
f = ((x - 7.8) * x + 18.5) * x - 11.3
return
end
运行结果为
x =      .935621E + 00

```

第二章 线性方程组的数值解法

在工程技术中很多计算问题最后归结为求解线性方程组,求解线性方程组的方法有很多,本章中将介绍几种常用的数值解法。

§ 2.1 迭代法

迭代法是一种近似方法,是通过某种极限过程去逼近精确解,求得满足误差要求的近似解。本节介绍两个迭代方法——简单迭代法和逐个迭代法(即高斯-赛德尔法)。

一、简单迭代法

设有如下一般形式的线性方程组:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

经改写后化成迭代形式:

$$\begin{cases} x_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n + b_1 \\ x_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n + b_2 \\ \cdots \\ x_n = a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n + b_n \end{cases} \quad (2-1)$$

于是,它的一般迭代公式如下:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = a_{11}x_1^{(k)} + a_{12}x_2^{(k)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(k)} + b_1 \\ x_2^{(k+1)} = a_{21}x_1^{(k)} + a_{22}x_2^{(k)} + \cdots + a_{2n}x_n^{(k)} + b_2 \\ \cdots \\ x_n^{(k+1)} = a_{n1}x_1^{(k)} + a_{n2}x_2^{(k)} + \cdots + a_{nn}x_n^{(k)} + b_n \end{cases} \quad (2-2)$$

首先,任意给定初始近似解 $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}$,并代入公式(2-2)的右端,得第一次近似解 $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_n^{(1)}$;再以第一次近似解 $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_n^{(1)}$ 代入迭代公式(2-2),得到第二次近似解;这样做下去,可得到第 k 次近似解。在迭代过程中,随时将前后两次所得到的近似值进行比较,如果发现有

$$|x_i^{(k)} - x_i^{(k+1)}| < \varepsilon$$

$$|x_2^{(k)} - x_2^{(k+1)}| < \varepsilon$$

...

$$|x_n^{(k)} - x_n^{(k+1)}| < \varepsilon$$

其中, ε 为预先要求的误差, 我们的迭代过程就停止。并且取第 $k+1$ 次近似值为方程的近似解, 即

$$x_1 \approx x_1^{(k+1)}, \quad x_2 \approx x_2^{(k+1)}, \quad \dots, \quad x_n \approx x_n^{(k+1)}$$

一个已知线性方程组化为迭代形式不是唯一的, 根据任意一个迭代式进行计算, 不一定都能得到逼近精确解的近似解。一个迭代公式, 如果根据它能够计算出逼近精确解的近似解, 也就是说近似解序列 $x_i^{(k)} (i=1, \dots, n)$ 有极限:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i^*, \quad i=1, \dots, n$$

这里, $x_i = x_i^* (i=1, \dots, n)$ 是方程组的精确解, 那么, 迭代公式叫做收敛的, 否则叫做发散的。

怎样的迭代公式是收敛的呢? 下面介绍两个简单的判别法则。

【定理 1】 假如方程组(2-1)中每个方程右端各系数绝对值的和都不大于一个正数 μ , 而 $\mu < 1$, 即

$$|a_{i1}| + |a_{i2}| + \dots + |a_{in}| \leq \mu \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

那么, 简单迭代公式(2-2)对任取初始值都是收敛的。

【定理 2】 假如方程组(2-1)右端同一未知量的各系数绝对值的和都不大于一个正数 γ , 而 $\gamma < 1$, 即

$$|a_{1i}| + |a_{2i}| + \dots + |a_{ni}| \leq \gamma \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

那么, 简单迭代公式(2-2)对任取初始值都是收敛的。

从前面定理 1, 不难推出下面的结论:

如果线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (2-3)$$

的系数 $a_{ii} (i=1, \dots, n)$ 的绝对值都比同行其余各系数绝对值的和还大, 即

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$$

那么, 迭代公式

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = -\frac{a_{12}}{a_{11}}x_2^{(k)} - \dots - \frac{a_{1n}}{a_{11}}x_n^{(k)} + \frac{b_1}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} = -\frac{a_{21}}{a_{22}}x_1^{(k)} - \dots - \frac{a_{2n}}{a_{22}}x_n^{(k)} + \frac{b_2}{a_{22}} \\ \dots \\ x_n^{(k+1)} = -\frac{a_{n1}}{a_{nn}}x_1^{(k)} - \frac{a_{n2}}{a_{nn}}x_2^{(k)} - \dots + \frac{b_n}{a_{nn}} \end{cases} \quad (2-4)$$

对任取的初始值是收敛的。

类似的,还有一个结论:如果线性方程组(2-3)的系数 a_{ii} ($i = 1, \dots, n$) 的绝对值都比同列的其余各系数绝对值的和还大,即

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ji}|$$

那么,迭代公式(2-4)是收敛的。

二、高斯-赛德尔迭代法

高斯-赛德尔迭代法与简单迭代法几乎完全一样,唯一的差别是它们所用的迭代公式不同。这里不用上面的迭代公式(2-2),而是用下面所谓的高斯-赛德尔迭代公式:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = a_{11}x_1^{(k)} + a_{12}x_2^{(k)} + a_{13}x_3^{(k)} + \dots + a_{1n}x_n^{(k)} + b_1 \\ x_2^{(k+1)} = a_{21}x_1^{(k+1)} + a_{22}x_2^{(k)} + a_{23}x_3^{(k)} + \dots + a_{2n}x_n^{(k)} + b_2 \\ x_3^{(k+1)} = a_{31}x_1^{(k+1)} + a_{32}x_2^{(k+1)} + a_{33}x_3^{(k)} + \dots + a_{3n}x_n^{(k)} + b_3 \\ \dots \\ x_n^{(k+1)} = a_{n1}x_1^{(k+1)} + a_{n2}x_2^{(k+1)} + a_{n3}x_3^{(k+1)} + \dots + a_{nn}x_n^{(k)} + b_n \end{cases}$$

这两个迭代公式的差别是在用第 k 次近似值 $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}$ 求第 $k+1$ 次近似值 $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_n^{(k+1)}$ 时,简单迭代公式是将 $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}$ 整个地代入(2-1)的右端;而高斯-赛德尔迭代公式则是将 $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}$ 逐次代入(2-1)中,也就是说,在计算 $x_i^{(k+1)}$ 时,及时地引用新算出的 $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_{i-1}^{(k+1)}$ 。一般说来,在计算过程中,及时地引用新值会比用旧值更接近精确解,收敛速度要比简单迭代快。因此逐个迭代法是更为常用的迭代方法。

显然,定理 1 和定理 2 同样也是判别高斯-赛德尔收敛公式的收敛定理。

高斯-赛德尔迭代法 FORTRAN 子程序如下:

哑元说明:

x ——实型变量,输入兼输出参数。输入时放初始近似值,输出时,放计算结果。

f ——实型变量,输入参数。存放线性方程组的常数项。

a ——实型变量,输入参数。存放线性方程组的系数矩阵。

n ——整型变量,输入参数。存放线性方程组的阶数。

eps ——实型变量,输入参数。求解方程组的预先给出的精度要求。

```
subroutine gasc(x,f,a,n,eps)
dimension x(n),f(n),a(n,n)
10  dalt = 0.0
do 100 i = 1, n
    s = x(i)
    sl = 0.0
    do 20 j = 1, n
        if(j.ne.i) then
            sl = sl + a(i,j) * x(j)
        endif
    20  continue
100  continue
```



```

        x(i) = (f(i) - s1)/a(i,i)
        if(abs(x(i) - s).gt.dalt)then
            dalt = abs(x(i) - s)
        endif
100  continue
    if(dalt.gt.eps)goto 10
end

```

【例】 求解线性方程组

$$\begin{aligned}
 13x_1 + 4x_2 &= 8 \\
 6x_1 - 16x_2 + 5x_3 &= 0 \\
 5x_1 - 5x_2 + 6x_3 &= 5
 \end{aligned}$$

精度要求为 $\epsilon = 0.000001$.

主程序如下:

```

dimension a(3,3),x(3),b(3)
data a/13.0,6.0,5.0,4.0, -16.0, -5.0,0.0,5.0,6.0/
b/8.0,0.0,5.0/,eps/0.000001/
data x/3*0.0/
call gaoe(x,b,a,3,eps)
do 10 i = 1,3
    write(*,20)i,x(i)
10  continue
20  format(1x,'x(',i2,') = ',f12.6)
end

```

运行结果为

```

x(1) = .483971
x(2) = .427094
x(3) = .785935

```

§ 2.2 列主元高斯消去法

高斯消去法的基本思想是:将一个方程乘或除以某个常数,或者将两个方程相加减。通过这两种步骤减少方程中变元的数目,最终使每个方程只含一个变元,从而得到所求的解。

设有如下一般形式的线性方程组:

$$\begin{cases}
 a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\
 a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\
 \cdots \\
 a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n
 \end{cases} \quad (2-6)$$