数值计算方法引论

李开宁 编

航空工业出版社

数值计算方法引论

李开宁　编

航空工业出版社

2002.8.

内容提要

本书为数值计算方法的一本入门教材。书中简要介绍了数值计算方法的基本概念、基本理论和一些经典的计算方法，并对一些有代表性的计算方法给出了算法说明。主要内容有：非线性方程的数值解法、线性代数方程组的数值解法、函数的插值与拟合法、插值型数值微分与数值积分、常微分方程初值问题的数值解法。各章配有适量的习题并给出了参考答案与提示。

本书可作为高等院校工科类本科生的基础教材，亦适用于同等程度的读者自学。

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法引论/李开宁编．—北京：航空工业出版社，2002.8

ISBN 7-80183-019-9

Ⅰ.数… Ⅱ.李… Ⅲ.数值计算—计算方法 Ⅳ.0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 055346 号

航空工业出版社出版发行

(北京市安定门外小关东里 14 号 100029)

南京航空航天大学印刷厂印刷　　全国各地新华书店经售

2002 年 8 月第 1 版　　2002 年 8 月第 1 次印刷

开本：787×1092 1/32　　印张：5　　字数：121 千字

印数：1—1000　　定价：8.00 元

前　言

本书是为工科类本科生学习数值计算方法而编写，主要内容分为六章。第一章为绪论，简洁扼要地介绍贯穿于计算方法课程内容的一些基本概念，如相容性、稳定性、收敛性概念.随后五章分类介绍具体的计算方法。第二章非线性方程的数值解法，详细介绍针对一元非线性方程求根中的两类主要方法，在区间收缩法中介绍了有代表性的两分法，而在迭代法中主要介绍了经典的牛顿迭代法和弦截法；第三章为线性代数方程组的数值解法，介绍了直接法和迭代法两大类基本方法，具体涉及十余种常用的算法；第四章为函数插值与拟合法，主要介绍了经典的拉格朗日插值法、牛顿均差插值法、最小二乘法等；第五章为插值型数值微分与数值积分，在数值微分部分，以两点公式、三点公式这两种公式为代表，阐述了利用插值多项式建立数值微分公式的基本技术.而在数值积分部分则主要介绍了牛顿-柯特斯公式和常用的龙贝格积分法；第六章为常微分方程数值解法，主要介绍了常用的欧拉法、改进欧拉法和龙格-库塔方法等。另外，为使本书自完备，便于学生自学，在附录里提供了本书中所用到的若干数学定理。

本书为一本计算方法的入门性教材，适用讲授 24～32 学时。为保证在较短的课时内传授出计算方法的基本精神，编者在内容的取舍上注意精选易于为初学者理解掌握的基本理论和常用算法，而且采用开放式结构对一些当今流行的算法进行简要的介绍并对进一步的学习作了引导性的说明。在本书中还提供了较丰富的典型题例。

本书在计算方法课程有别于其他数学课程的特征上作了较充分的阐述。在理论分析、公式推导方面，着重于介绍具有普遍应用

价值的技术而忽略特殊技术的介绍。其中，均差函数概念等的引入、讨论，是其他同类教材中所没有的，更便于学生学习、掌握相关理论。另外，本书针对工科类学生的特点在算法应用方面进行了尽可能充分的阐述。在本书中不仅对各种方法的特性、应用范围作了扼要的评述，而且对各种方法在应用过程中所涉及到的一些细节问题也作了必要的说明，并提供了一些算法步骤，对学生自行编程和参阅现今流行的算法程序提供了有益的帮助。

本书是在多年来为工科类本科生开设的“计算方法”课程的讲义的基础上不断修改而成。在本书的编写过程中，得到了南京航空航天大学理学院的关心、支持和帮助，编者在此谨向理学院的领导和同仁致以诚挚的感谢。南京大学的何炳生教授详细审阅了全书，提出了许多中肯有益的修改意见，责任编辑熊春茹副编审和航空工业出版社的有关同志为本书的出版付出了辛勤的劳动，在此一并致以真诚的谢意。

限于水平，书中恐仍有不当乃至错漏之处，敬请读者批评指正。

编者

2002 年 8 月

目　录

第1章 绪 论

1.1 计算方法的意义和特点

数值计算是科学研究与工程技术中经常遇到的基本问题，但在很多情形下采用传统的数学方法却无法获得所需要的解。以下就是非常有代表性的三种情形。

(1)所涉及的数学模型无系统的求解析解的方法。例如，不定积分 $\int \sqrt{1+\cos^2 x}\,dx$ 无初等意义下的解的表达式，因此可积但积不出来，从而对相应的定积分 $\int_0^1 \sqrt{1+\cos^2 x}\,dx$ 就无法采用经典的牛顿-莱布尼兹公式求积。又如，对于多项式方程 $P_n(x)=0$ 的求根问题，理论上已证明当 $P_n(x)$ 为 n 次实系数多项式时，它在复数域内有且仅有 n 个根，且其若有复根必为共轭复根，但是对于一般的高次多项式方程却没有通用的求根方法。

(2)尽管所涉及的数学模型有一套系统的求解析解的方法，但由于其解法计算量大，只适用于规模较小的情形，而且当计算过程中出现误差时，其解法将会导致误差严重积累以致淹没真解，因此这种解法对大型问题是完全失效的。例如，对于 n 阶线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，若采用克莱姆(Cramer)法则 $x_j=\boldsymbol{A}_j/|\boldsymbol{A}|(j=1,2,\cdots,n)$ 求解，其计算涉及 $(n+1)!$ 次乘除，当 n 增大时，计算量迅速增加，以致不堪承受，而且该方法易造成舍入误差的严重积累导致解失真。一般来说，使用计算机解 n 阶线性方程组时所能承受的计算量为 n^p 量级。

(3)基于离散数据建立数学模型时,已无法采用"微元法"等常规的解析方法建立解析模型.必须采用数值分析的方法建立近似的计算模型。

实际上,除很少一类简单问题外,大多数源于工程实际的问题均涉及规模较大的复杂模型,需要借助于计算机才能进行数值求解。计算方法(又称为数值分析)的任务就是研究如何对给定的问题构建只须进行有限步四则运算的计算模型,以便有效地借助于计算机迅速求出所需要的数值解。这种计算模型通常又称为计算格式。

除纯实验研究外,当今人们进行科学研究通常经过如下过程:分析整理所确定的问题→构建数学模型→建立计算模型→进行程序设计(或仿真计算的设计)→利用计算机解出数据进行分析。

由此可见,数值分析是科学研究中不可或缺的一个重要环节。

另外,计算方法作为一门由数学与计算机科学交叉渗透而产生的应用型研究分支,它具有不同于纯粹数学学科的一些新特点。

首先,计算方法的涉及面十分广泛,各种数值方法因依附于相应的数学分支而表现得相对独立,如数值代数是基于对代数方程(组)和矩阵的数值计算研究,数值微积分是基于对函数微分和积分的数值计算研究,微分方程数值解法是基于对微分方程数值计算的研究等,它们分别与数学学科中的相应分支代数学、微积分学、微分方程理论等的联系较为紧密而相互间的关系反而显得较为松散。但计算方法作为一门独立的研究分支,自有贯穿于其中的精髓,这就是数学模型离散化所要遵循的相容性原则,控制误差积累的数值稳定性要求,以及评价计算格式优劣的计算复杂性(要求节省存储、计算量少(收敛速度快)),为适应大型计算机的计算,现今又提出了并行性要求。希望读者在学习时应从这些方面深刻理解把握所建立的各种数值计算格式。

其次,作为派生于纯粹数学的研究分支,在计算方法中理论的严谨分析固然必不可少,它为评价数值计算格式提供了可靠的保证,但

作为一门应用性很强的分支，实际应用中往往不可能满足理论分析所要求的苛刻条件，因此常常是基于理论分析的结论而代之以近似的实用准则，并以数值试验辅证之。这自然会导致在特殊情况下计算的失败，因此需注意切莫把近似准则当作普适原则来随意使用。

1.2 计算格式的相容性与稳定性

为便于读者更好地理解后面各章所介绍的计算格式，在此对计算格式的相容性与稳定性概念作一简要陈述。

定义 1.1 如果一个计算格式在取某种极限后可还原成某数学模型，则称该计算格式与此数学模型**相容**。

由此定义可知，数学模型 $y' = 2x$ 与计算格式 $\frac{y(a+h)-y(a)}{h} = 2a$ 相容。这是因为当 $h \to 0$ 时 $\frac{y(a+h)-y(a)}{h} \to y'(a)$，从而当 $h \to 0$ 时，该计算公式还原为 $y'=2x$ 的特例 $y'(a)=2a$。

又对于计算格式 $S_n = \sum\limits_{k=0}^{n} \frac{1}{k!} x^k$，由于 $\lim\limits_{n\to\infty} S_n = \sum\limits_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} x^k$，故它与数学模型 $e^x = \sum\limits_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} x^k$ 相容，用 S_n 可近似计算 e^x。

相容性保证了计算格式的理论解充分接近精确解。在本教材中各种基于数学模型离散化而构建的计算格式均满足相容性。

但在实际计算中，由于计算机字长有限等原因，难免要进行舍入处理而产生计算误差。为保证解的足够准确，必须保证计算误差控制在所要求的范围内。对此，我们引进计算格式的稳定性概念。

定义 1.2 如果在用某一计算格式进行数值计算的过程中，误差不会严重积累，从而保证解满足所要求的精确度（简称**精度**），则称该计算格式**数值稳定**（简称为**稳定**），反之则称为**不稳定**。

为了简便，对于计算格式的稳定性分析通常基于对初始误差的传播状况的讨论。

例 1.1 试建立计算 $I_n=\int_0^1 x^n e^{x-1}dx$ 的稳定的计算格式。

解 分部积分得

$$I_n = x^n e^{x-1}\big|_0^1 - n\int_0^1 x^{n-1}e^{x-1}dx = 1 - nI_{n-1}$$

因此可建立如下两种计算格式。

格式(A)：$I_n=1-nI_{n-1}\quad(n=1,2,\cdots)$

格式(B)：$I_{n-1}=\frac{1}{n}(1-I_n)\quad(n=N,N-1,\cdots)$

为便于讨论这两种计算格式的性态，先对该定积分作一定性分析。

注意到被积函数 $x^n e^{x-1}$ 在区间(0,1)内恒大于零，故得

性质 1 对任何 n，$I_n>0$

又由于

$$I_n < \int_0^1 x^n e^{1-1}dx = \frac{1}{n+1}$$

$$I_{n-1} = \frac{1-I_n}{n} > \frac{1}{n}\left(1-\frac{1}{n+1}\right) = \frac{1}{n+1}$$

$$I_n > \int_0^1 x^n e^{0-1}dx = \frac{e^{-1}}{n+1}$$

故得

性质 2 $\frac{e^{-1}}{n+1} < I_n < \frac{1}{n+1} < I_{n-1}$

进一步，由性质 2 易得

性质 3 $I_n\downarrow 0$（即 I_n 单调递减趋于零）

关于计算格式的初始值，可采用如下方法确定。对于格式(A)，我们可根据 $I_0=\int_0^1 e^{x-1}dx=1-e^{-1}$ 通过对 e^{-1} 的近似取值得到格式(A)的充分精确的近似值 $\tilde{I}_0$。

对于格式(B)，则可根据性质 2，近似取 $\tilde{I}_N=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{N+1}+\frac{e^{-1}}{N+1}\right)$

作为初始值 I_N 的近似值。这时初始误差 $|I_N-\tilde{I}_N|<\frac{1-e^{-1}}{2(N+1)}$。

下面分析计算格式的稳定性。记 $\tilde{I}_n$ 为在初始值有误差时计算得到的近似值，忽略计算过程中产生的新误差，则由格式(A)得到 $\tilde{I}_n=1-n\tilde{I}_{n-1}$，由格式(B)得到 $\tilde{I}_{n-1}=\frac{1}{n}(1-\tilde{I}_n)$。记 $e_n=I_n-\tilde{I}_n$ 为误差，则对格式(A)有

$$e_n=-ne_{n-1}$$

故得
$$|e_n|=n!\,|e_0|$$

随着 n 增加，误差迅速增长，计算不稳定。

而对于格式(B)则有

$$e_{n-1}=-\frac{1}{n}e_n$$

故得
$$|e_n|=\frac{1}{n+1}\cdot\frac{1}{n+2}\cdot\cdots\cdot\frac{1}{N}|e_N|\quad(n<N)$$

随着计算的推进，误差逐渐减小，计算稳定。

实际上，如果取 $\tilde{I}_0=0.632\ 1$，这时初始误差 $|e_0|\approx\frac{1}{2}10^{-4}$，采用格式(A)计算得到 $\tilde{I}_8=-0.728$，不满足性质 1；而当取 $\tilde{I}_9=\frac{1}{2}(\frac{1}{10}+\frac{e^{-1}}{10})\approx0.068\ 4$ 时，用格式(B)计算得到的 $\tilde{I}_8,\tilde{I}_7,\cdots,\tilde{I}_0$ 均大于零。可见，格式(B)为稳定有效的计算格式，而格式(A)不稳定。

一般来说，若一个计算格式满足如下误差关系式

$$|e_{后}|\leqslant C|e_{初}|\qquad(C\text{ 为常数})$$

则认为该计算格式数值稳定。

对于所要求解的数学模型的精确解 x^*，记 x 为相应计算格式在无误差影响时所得到的理论解，$\tilde{x}$ 为实际采用该计算格式进行近似计算所得到的近似解，则有如下关系式成立

$$|x^* - \tilde{x}| \leqslant |x^* - x| + |x - \tilde{x}|$$

而计算格式的相容性可保证$|x^* - x|$足够小，计算格式的稳定性可保证$|x - \tilde{x}|$足够小。因此，一个相容且稳定的计算格式可保证计算产生的近似解足够精确。所以，人们通常以相容性和稳定性作为对一个计算格式可行性的基本要求。

习 题 一

1. 给定计算格式 $y_{n+1} = (1 - 20h)y_n$ $(h = x_{n+1} - x_n, y_n$ 为 $y(x_n)$的近似值)

(1)它与何种数学模型相容？

(2)确定使该计算格式稳定的 h 的取值范围。

第2章　非线性方程的数值解法

数学、物理和工程实际中提出的问题常常归结为求解非线性函数方程

$$f(x)=0$$

其解 x^* 称为该方程的**根**或 $f(x)$的**零点**。

常见的比较简单的非线性函数方程为**代数方程**,即 $f(x)$为代数多项式的情形。例如

$$x^{100}-x^7+8x^4+90=0$$

对于 n 阶实系数代数方程,虽然理论上已经确证其在复数域内有且仅有 n 个根,但却往往难以直接求解出根的精确值。

更为复杂的非线性方程为**超越方程**,即 $f(x)$中含有超越函数(非代数多项式的解析函数),如指数函数、对数函数、三角函数等,这时方程的解的个数、性态等更加难以直接确定或求解。

由于对绝大多数非线性函数方程的解难以直接求出简洁的解析表达式,因此通常采用数值求其近似解的方法。

非线性函数方程的数值计算方法主要分为两大类。

第一类是**区间收缩法**。其方法是首先确定初始含根区间 $[a_0,b_0]$,例如从某个点 x_0 出发以 h 为步长依次考察点 $x_i=x_0+ih$ $(i=1,2,\cdots)$,直至搜索出一个含根区间 $[x_{i-1},x_i]$为止,并取 $[a_0,b_0]=[x_{i-1},x_i]$。初始含根区间取定之后,根据某种原则构造区间序列 $\{[a_k,b_k]\mid x^*\in[a_k,b_k];\ k=1,2,\cdots\}$,使得

$$[a_0,b_0]\supset\cdots\supset[a_k,b_k]\supset\cdots\cdots,\text{且}\lim_{k\to\infty}(b_k-a_k)=0$$

从而当 k 充分大,以至 $b_k-a_k<\varepsilon$(ε 为精度要求)时,便可取 $[a_k,b_k]$中的点作为 x^* 的近似解。对这类方法本章仅介绍常用的二

分法。

第二类是基于点逼近思想的**迭代法**。其方法是首先选定 x^* 的若干个近似值 $x_0, x_{-1}, \cdots, x_{-m}$，然后按某种原则计算出点序列 $\{x_k | k=1,2,\cdots\}$，使得 $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = x^*$，这样当 k 充分大时，x_k 便可作为解 x^* 的近似值。对这类方法本章主要介绍牛顿迭代法和弦截法。

2.1 二分法

二分法又称为**对分法**，其基本假设是在给定的闭区间$[a,b]$上，$f(x)$连续且$f(a)f(b)<0$。从而由闭区间上连续函数的性质知：存在 $x^* \in [a,b]$，使 $f(x^*)=0$。

2.1.1 二分法的计算步骤

二分法的计算步骤是首先选取初始含根区$[a_0,b_0]=[a,b]$，计算区间中点 $x_1 = \frac{1}{2}(a_0+b_0)$，然后判断 x^* 是落在$[a_0,x_1]$还是$[x_1,b]$内来确定更小的含根区间$[a_1,b_1]$，其具体做法是：

$$
\text{若 } f(x_1)f(a_0)\begin{cases} >0 & \text{取}[a_1,b_1]=[x_1,b_0] \\ <0 & \text{取}[a_1,b_1]=[a_0,x_1] \\ =0 & \text{则 } x_1=x^*\text{，终止计算} \end{cases}
$$

一般地，如果已计算得到含根区间$[a_k,b_k]$($k=1,2,\cdots$)，则令

$x_{k+1} = \frac{1}{2}(a_k+b_k)$，

$$
\text{若 } f(a_k)f(x_{k+1})\begin{cases} >0 & \text{取}[a_{k+1},b_{k+1}]=[x_{k+1},b_k] \\ <0 & \text{取}[a_{k+1},b_{k+1}]=[a_k,x_{k+1}] \\ =0 & \text{则 } x_{k+1}=x^*\text{，终止计算} \end{cases}
$$

这样，除碰巧出现上面第三种情况而得到根 x^* 外，便构造出长度逐渐减半的含根区间序列$\{[a_k,b_k];\ k=1,2,\cdots\}$。

实际计算时所采用的终止原则为：对于给定的精度要求 $|\tilde{x}-x^*|<\varepsilon$（以下不加说明，即以 $\tilde{x}$ 表示近似值），当计算到 $b_k-a_k<\varepsilon$ 时，便终止计算，取 $\tilde{x}=a_k$ 或 b_k；或当计算到 $b_k-a_k<2\varepsilon$ 时，终止计算，取 $\tilde{x}=\frac{1}{2}(a_k+b_k)$。

2.1.2 二分法的收敛性与事前误差估计

由区间收缩过程易知，$b_k-a_k=\frac{1}{2}(b_{k-1}-a_{k-1})=\cdots=\frac{1}{2^k}(b-a)\to 0(k\to\infty$ 时)，所以二分法总是收敛的。若按上述终止原则的第二种方法取近似值 $\tilde{x}=\frac{1}{2}(a_k+b_k)$，我们有

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

故对给定的精度要求 $|\tilde{x}-x^*|<\varepsilon$，可从 $\frac{1}{2^{k+1}}(b-a)<\varepsilon$，预先估计出所需计算的步数 $K>\frac{\lg\left(\frac{b-a}{\varepsilon}\right)}{\lg 2}-1$，即必需计算的步数为

$$K=\left[\frac{\lg\frac{b-a}{\varepsilon}}{\lg 2}\right] \tag{2-1}$$

这里[ ]为取整符号（例如[2.5]=2）。特别当 $\varepsilon=10^{-m}$ 时（m 为正整数），上式简化为

$$K=\left[\frac{\lg(b-a)+m}{\lg 2}\right] \tag*{(2-1)$'$}$$

例 2.1 试用二分法求 $f(x)=x^3-2x-5=0$ 的一个正根，使误差小于 10^{-3}。

解 取 $x_0=0$，步长 $h=1$，向右搜索得到 $f(0)=-5$，$f(1)=-6$，$f(2)=-1$，$f(3)=16$，故可取初始区间 $[a_0,b_0]=[2,3]$，且由计算步数的估计公式(2-1)$'$预先算出