

● 姜佩仁 王新民 主编

地学中的近代计算方法

地学中的近代计算方法

地学中的近代计算方法

地学中的近代计算方法

地学中的近代计算方法

地学中的近代计算方法

地学中的近代计算方法

地学中的近代计算方法

地学中的近代计算方法

地学中的近代计算方法

地学中的近代计算方法

吉林大学出版社

前 言

随着现代科学技术的蓬勃发展和我国“四化”建设的突飞猛进，属于高精尖的计算机科学技术在各科技领域的应用中，愈加不断地普及和深入。地质科学作为自然科学的一个重要分支，对计算机技术的应用，已成为它现代化的一个重要标志。

随着地质科学对计算机技术的广泛而深入地应用，对计算机软件所使用的数学方法，提出了更高、更迫切的要求。作为培养高级地质人才的高等学府，当然要开设这门课程。我们编写本书的目的，就是要为高等地质院校各专业的本科生提供一本教材，同时，本书也可供研究生和地质工程技术人员作参考书使用。

本书是在长春地质学院有关课程多年教学实践的基础上编写而成的。内容选材既注意基础知识，又注意了跟踪本学科发展的“前沿”，既注意了普遍性，又注意了针对性。内容编排合理，便于教学，适于自学。

本书第一章、第二章、第三章后五节、第七章后二节由姜佩仁主笔。第三章前五节、第六章和第七章前三节由王新民主笔。第四章由李淑芹主笔。第五章由韩生主笔。本书各章插图由姜志强用计算机绘制。韩生对全稿的文字、符号等作了统一加工。

本书由杨天行教授主审，田树槐副教授、姜立芝副教授任副主审。本书在编写过程中，得到了长春地质学院教务处、教材科和基础科学系等有关部门领导的大力支持。在此，谨对上述各位领导和同事，致以诚挚的谢意。

书中如有不当之处，恳请读者批评指正。

编著者

1993年5月10日

于地质宫

目 录

第一章 误差的基本知识	1
§ 1 误差的来源	1
§ 2 近似数的误差估计	2
2.1 绝对误差与相对误差	2
2.2 估差公式与误差限	3
2.3 有效数字与误差估计	4
§ 3 和、差、积、商的误差估计	8
3.1 和、差、积、商的绝对误差的估计	8
3.2 和、差、积、商的相对误差的估计	9
§ 4 数值计算中要注意的几个问题	12
本章小结	14
习题一	14
第二章 线性代数方程组的数值解法	16
§ 1 Gauss 消去法	17
1.1 Gauss 消去法的消元公式	17
1.2 Gauss 消去法的回代公式	19
1.3 Gauss 消去法的计算量	22
1.4 Gauss 消去法的可行性定理	23
§ 2 Gauss 主元素消去法	24
2.1 选主元的必要性	24
2.2 主元的选法	26
§ 3 LU 分解法	29
3.1 不选主元的 LU 分解法	30

3.2	选主元的 LU 分解法	34
3.3	LU 分解的存在与唯一性定理	36
§ 4	特殊矩阵的三角分解法	37
4.1	Cholesky 分解法	37
4.2	追赶法	42
4.3	带状矩阵的三角分解法	44
§ 5	向量与矩阵的范数	47
5.1	向量的范数	47
5.2	矩阵的范数	49
§ 6	Gauss 消去法的误差分析	51
6.1	计算机上的舍入误差	51
6.2	方程组对舍入误差的敏感性	52
6.3	消元误差的估计	54
6.4	三角方程组解的误差估计	55
§ 7	迭代法	55
7.1	Jacobi 迭代法	56
7.2	Gauss-Seidel 迭代法	59
7.3	松弛法	60
§ 8	迭代法的收敛条件及误差估计	63
8.1	问题的引出	63
8.2	准备知识	64
8.3	迭代法的收敛定理	65
* § 9	Housholder 方法与矩阵的 QR 分解	67
9.1	H 方法的基本思想	68
9.2	正交矩阵 Q 的计算	68
9.3	矩阵 A 及右端 b 的约化公式	72
* § 10	矛盾方程组的近似解法	78
10.1	矩阵的奇异值分解	78
10.2	矛盾方程组的最小二乘解	80

10.3 广义逆矩阵与最小二乘解	81
* § 11 解大型稀疏方程组的技巧问题	82
本章小结	84
习题二	85
第三章 函数逼近方法	88
§ 1 Lagrange插值法	88
1.1 Lagrange插值多项式的构造	89
1.2 插值多项式的余项	94
§ 2 Newton插值法	97
2.1 差商及其性质	98
2.2 Newton插值多项式	99
§ 3 Hermite插值法	102
3.1 Hermite插值多项式的构造	102
3.2 Hermite插值余项	104
§ 4 样条插值法	106
4.1 样条函数的概念	107
4.2 三次样条函数	108
§ 5 二元函数分片插值法	113
5.1 问题的提出	113
5.2 矩形域上的分片插值问题	114
5.3 三角形域上的分片插值问题	120
§ 6 曲线的拟合——最小二乘法	124
6.1 直线型函数的拟合	124
6.2 n 次拟合多项式	126
6.3 双曲函数与指数函数的拟合	129
§ 7 最佳平方逼近与广义多项式	131
7.1 最佳平方逼近	131
7.2 广义多项式	131
7.3 最佳平方逼近问题的一般形式	132

7.4 最佳平方逼近多项式的存在与唯一性	134
§ 8 正交多项式与广义 Fourier 和	136
8.1 正交函数系	136
8.2 广义 Fourier 和	137
8.3 Toeplitz 定理	138
§ 9 函数的磨光	141
9.1 问题的提出	141
9.2 磨光函数及其应用	142
9.3 数据的平滑	147
§ 10 快速 Fourier 变换(FFT)	150
10.1 问题的提出	150
10.2 快速 Fourier 变换(FFT)	154
本章小结	163
习题三	164
第四章 数值微分与数值积分	166
§ 1 数值微分法	166
1.1 利用差商求数值微商	166
1.2 利用插值多项式求数值微商	168
§ 2 数值积分法的三个基本问题	171
2.1 数值积分的必要性	171
2.2 数值积分法的三个基本问题	172
§ 3 Newton-Cotes 型求积公式	174
3.1 公式的一般形式	174
3.2 常用的 Newton-Cotes 公式	175
3.3 复化求积公式	179
3.4 区间逐次分半法	184
3.5 Romberg 方法	187
§ 4 Gauss 型求积公式	192
4.1 问题的提出	192

4.2 常用的正交多项式·····	195
4.3 Gauss型求积公式的构造及其误差·····	197
4.4 常用的Gauss型求积公式·····	198
§ 5 重积分的数值积分法简介·····	205
5.1 复化梯形公式·····	205
5.2 复化抛物形公式·····	205
5.3 Gauss 型求积公式·····	206
本章小结·····	206
习题四·····	208
第五章 常微分方程的数值解法 ·····	210
§ 1 解常微分方程初值问题的 Euler 方法·····	211
1.1 Euler 方法·····	211
1.2 改进的 Euler 方法·····	212
§ 2 Taylor 展开法与截断误差·····	215
2.1 Taylor 展开法·····	215
2.2 局部截断误差及其“阶”·····	216
§ 3 Runge-Kutta 方法·····	218
3.1 R-K方法的基本思想·····	219
3.2 N级R-K公式·····	219
3.3 标准 4 级 4 阶R-K 公式·····	222
§ 4 线性多步法·····	223
§ 5 一阶微分方程组的解法·····	227
§ 6 常微分方程边值问题的数值解法·····	229
本章小结·····	232
习题五·····	233
第六章 偏微分方程的差分解法 ·····	235
§ 1 椭圆型方程的差分解法·····	235
1.1 差分方程的建立·····	235
1.2 边界条件的处理·····	239

1.3 差分格式的性质	244
§ 2 抛物型方程的差分解法	247
2.1 一维抛物型方程的差分格式	247
2.2 差分格式的收敛性和稳定性	254
2.3 二维抛物型方程的差分格式	262
§ 3 双曲型方程的差分解法	266
本章小结	269
习题六	271
第七章 微分方程的其他近代数值解法简介	273
§ 1 一维问题的有限元法	273
1.1 单元剖分与构造基函数	274
1.2 单元刚度矩阵和单元荷载向量	276
1.3 总刚度矩阵和总荷载向量	277
1.4 有限元法的解题步骤	279
§ 2 二维问题的有限元法	283
2.1 单元剖分	284
2.2 确定单元基函数	285
2.3 单元刚度矩阵与单元荷载向量	287
2.4 总体合成	291
2.5 有限元方程组	292
§ 3 边界积分方程法	298
3.1 积分方程	299
3.2 边界积分方程	303
3.3 边界积分方程的离散化	305
§ 4 积分守恒型方程的差分化——积分插值法	307
4.1 两点边值问题的差分化	308
4.2 热传导问题的差分化	310
4.3 三角网格上的差分格式	313
§ 5 广义差分法	317

5.1 广义Galerkin方法.....	318
5.2 广义差分法.....	318
主要参考文献	327
人名索引	328

第一章 误差的基本知识

任何一门科学技术，不仅需要定性描述，而且更需要定量计算。定量计算，是现代科学技术中不可缺少的一大方面。要计算，就涉及到两个问题：一要有好的计算机；二要有好的计算方法。后者正是本课程所要研究的课题。

所谓好的计算方法，应该具备以下条件：

1. 公式的精确度高，数值稳定性好，即计算的结果误差要小。
2. 算法的逻辑结构简单，容易编制计算程序。
3. 计算量小，省机时。用计算机作四则运算时，加减操作所花的机时，比相同次数的乘除操作所花的机时少得多，故一般情况下，只用乘除法的次数来估计机时。
4. 所需要的存贮量小。

由此看来，误差问题是计算方法的首要问题，是衡量计算方法好坏的重要依据。没有误差估计的算法，人们是不敢用的。因此，作为本书的第一章，我们要介绍一些关于误差的基本知识。

§ 1 误差的来源

在数值计算过程中，误差是不可避免的。它主要来自以下几个方面：

1. **描述误差** 我们在解决实际问题时，总是先建立一个数学模型，而数学模型的建立，往往总要附加许多限制条件，忽略一些次要因素。这样建立的“理想化”的数学模型，与实际问题之间存在着一定的误差。这种误差就称为描述误差或模型误差。

2. 观测误差 在各种计算公式中，往往要包含一些参数，例如时间、距离等等。这些参数一般都是由实验或观测得到的，而由于仪器、方法或读数等方面存在误差，因此测得的参数值必然存在误差。这种误差称为观测误差。

3. 截断误差 许多数学运算，如微分、积分、无穷级数求和等，是通过极限过程来定义的，然而计算机只能完成有限次的算术运算及逻辑运算，因此，就需要将某种无限过程加以“截断”。这样产生的误差，称为截断误差，又称为构造误差、方法误差或公式误差。

4. 舍入误差 在计算过程中，由于电子计算机的位数（称为字长）是一定的，因此，往往要将无限小数变为有限小数，将位数较多的数变为位数较少的数，即要进行四舍五入。这样产生的误差，称为舍入误差。

由上所述，在计算过程中，总要产生这样或那样的误差，因此，误差是不可避免的，绝对精确的数是不存在的，关键是要注意构造或选择较好的计算公式，有效地控制误差的“泛滥”，得到满足一定精度要求的结果。

§ 2 近似数的误差估计

既然在数值计算过程中，误差是不可避免的，那么，对近似数的误差估计就很必要了。下面，我们介绍近似数的误差估计的两种方法。

2.1 绝对误差与相对误差

定义 1 若 x^* 是真值 x 的一个近似值，则称

$$e^* = x^* - x \quad (1.1)$$

为 x^* 的绝对误差。

注意， e^* 可正可负。当 e^* 为正时， x^* 为 x 的一个过剩近似值；当 e^* 为负时， x^* 为 x 的一个不足近似值。

近似数 x^* 的绝对误差看起来很直观,但有时不能确切地反映出某种测量的精确程度。例如,当我们测量100米的距离时,产生的绝对误差是1米,而当测量1000米的距离时,产生的绝对误差是5米,那么,这两次测量哪一次比较精确呢?表面上看,好像第二次的测量误差比较大,但实际上恰好相反。比较科学的对比方法,就是要考虑在两次测量当中,平均每测量1米能产生多大的误差,即有

$$\text{第一次测量每米产生误差 } \frac{1}{100}$$

$$\text{第二次测量每米产生误差 } \frac{1}{1000} = \frac{0.5}{100}$$

可见,还是第二次的测量结果比较精确。于是,又有相对误差的定义。

定义 2 若 x^* 是真值 x 的一个近似值,则称

$$e_r^* = \frac{x^* - x}{x} \quad (1.2)$$

为 x^* 的相对误差。

在实际计算中,真值 x 总是不知道的,故通常将

$$e_r^* = \frac{x^* - x}{x^*} \quad (1.2)'$$

作为 x^* 的相对误差

2.2 估差公式与误差限

一个近似数 x^* 的误差(绝对误差或相对误差)可正可负,并且由于真值总是不知道的,因此,无法按公式(1.1)或(1.2)、(1.2)'来计算 x^* 的误差,而只能去估计误差的范围,一般去估计误差的绝对值的上界,于是,有下面的定义。

定义 3 若一个正数 ε^* 或 ε_r^* 分别为近似数 x^* 的绝对误差或相对误差的绝对值的上界,即

$$|x^* - x| \leq \varepsilon^* \quad (1.3)$$

或

$$\left| \frac{x^* - x}{x^*} \right| \leq \epsilon; \quad (1.4)$$

则称 ϵ^* 为 x^* 的绝对误差限, 称 ϵ 为 x^* 的相对误差限, 称 (1.3)、(1.4) 为近似数 x^* 的估差公式。

注意, 这里误差限总是一个正数

例 1 估计近似数 $x^* = 0.0025$ 的误差。

首先估计其绝对误差。因为 0.0025 可能是由 0.00254 或 0.00245 (当然, 其第五位小数上的数字可能比 4 还小或比 5 还大) 经过四舍五入后而得到的, 故它的绝对误差的绝对值不超过 5×10^{-5} , 或写成 0.5×10^{-4} , 一般又写成 $\frac{1}{2} \times 10^{-4}$, 于是, 这里有

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

式中 $x^* = 0.0025$, x 为其真值。注意, 这里 $\epsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$ 就是近似数 $x^* = 0.0025$ 的绝对误差限, 它是小数点后第 4 位上的半个单位。

估计 x^* 的相对误差。由公式 (1.4), 有

$$\left| \frac{x^* - x}{x^*} \right| \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{-4}}{0.0025} = 2\%$$

2.3 有效数字与误差估计

在估计近似数的误差时, 又引出了有效数字的概念。

定义 1 若近似数 x^* 的绝对误差限是某一位上的半个单位, 且该位直到 x^* 的第一位非零数字一共有 n 位, 则称此近似数 x^* 有 n 位有效数字, 或说精确到该位。

例 2 判定下列近似数 x^* 各有多少位有效数字:

(1) $x^* = 0.0025$ 。

前面已知道, 它的绝对误差限 $\epsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$, 即为小数点后第 4 位上的半个单位, 而从该位起, 直到 x^* 的第一位不为零的数字 2 为止, 共有 2 位数, 故称近似数 $x^* = 0.0025$ 具有 2 位有效数

字。

$$(2) x^* = 3.054.$$

经四舍五入所产生的绝对误差限为 $\epsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$ ，它是小数点后第 3 位上的半个单位，而从该位起，直到 x^* 的第一位非零数字 3 为止，共有 4 位数，故称近似数 $x^* = 3.054$ 具有 4 位有效数字。

近似数 $x^* = 0.0025$ 又可以写成

$$\begin{aligned} 0.0025 &= 0.25 \times 10^{-2} \\ &= (2 \times 10^{-1} + 5 \times 10^{-2}) \times 10^{-2} \end{aligned}$$

它的绝对误差的估计公式又可写成

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2-2}$$

一般地，[经过四舍五入后得到的一个近似数 x^* ，可以表示成

$$\begin{aligned} x^* &= \pm 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m \\ &= \pm (x_1 \times 10^{-1} + x_2 \times 10^{-2} + \cdots + x_n \times 10^{-n}) \times 10^m \end{aligned} \quad (1.5)$$

其中 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 都是 0, 1, ..., 9 这十个数字中的任何一个，且 $x_1 \neq 0$ ； n 是正整数， m 是整数，则有 x^* 的估差公式

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \quad (1.6)$$

这样，又引出了有效数字的另一个定义。

定义 2 用 (1.5) 式表示的 x 的一个近似数 x^* ，其若有估差公式 (1.6) 成立，则称 x^* 具有 n 位有效数字。

例 3 判定下列近似数 x^* 各有多少位有效数字：

$$\begin{aligned} (1) x^* &= 3.054 = 0.3054 \times 10^1 \\ &= (3 \times 10^{-1} + 0 \times 10^{-2} + 5 \times 10^{-3} + 4 \times 10^{-4}) \\ &\quad \times 10^1, \end{aligned}$$

其绝对误差的估计公式为

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-3} = \frac{1}{2} \times 10^{1-4}$$

故此 x^* 具有 4 位有效数字。

$$(2) x^* = 30.54 = 0.3054 \times 10^2$$

$$= (3 \times 10^{-1} + 0 \times 10^{-2} + 5 \times 10^{-3} + 4 \times 10^{-4}) \times 10^2$$

其绝对误差的估计公式为

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \frac{1}{2} \times 10^{2-4}$$

故此 x^* 仍具有4位有效数字。

$$(3) x^* = 0.03 = 0.3 \times 10^{-1}$$

$$= (3 \times 10^{-1}) \times 10^{-1}$$

其绝对误差的估计公式为

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \frac{1}{2} \times 10^{-1-1}$$

故此 x^* 具有1位有效数字。

$$(4) x^* = 0.0300 = 0.300 \times 10^{-1}$$

$$= (3 \times 10^{-1} + 0 \times 10^{-2} + 0 \times 10^{-3}) \times 10^{-1}$$

其绝对误差的估计公式为

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4} = \frac{1}{2} \times 10^{-1-3}$$

故此 x^* 具有3位有效数字。

注意，上例中的各近似数 x^* 的绝对误差限是根据各 x^* 的小数点后保留的位数写出来的，而变成等号右端的形式，则是根据 x^* 的(1.5)形式的表达式来确定的。

从上例中我们看出，两个不同的近似数，可能有相同的绝对误差限，如(2)与(3)中的两个近似数 x^* ，它们的绝对误差限都是 $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$ ，但是，由于它们的(1.5)形式的表达式不同，故 ε^* 变化后的形式也就不同，(2)中的 ε^* 变为 $\frac{1}{2} \times 10^{2-4}$ ，(3)中的 ε^* 变为 $\frac{1}{2} \times 10^{-1-1}$ ，故它们所具有的有效数字的位数也就不同。

从上例中我们还可以看出，两个不同的近似数，如(1)与(2)中的近似数3.054与30.54，虽然它们的绝对误差限不同，一个是 $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$ ，一个是 $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$ ，但由它们的变化后的 ε^* 的形式看出，它们所具有的有效数字的位数却是相同的。

总之，要判定一个近似数有多少位有效数字，首先要根据近似数 x^* 所保留的小数位数，来确定 x^* 的绝对误差限，然后再根据定义1或定义2来判定 x^* 的有效数字的位数。要根据定义2来判定 x^* 的有效数字的位数时，尚需将 x^* 表示成(1.5)式的形式，并将绝对误差限 ε^* 变成(1.6)式中的形式，然后才能判定。

另外，值得注意的是，近似数的小数点后面的零，不能随便省去。如例3中的0.03与0.0300，前者精确到0.01，有1位有效数字，后者精确到0.0001，有3位有效数字。可见，它们的近似程度完全不同。

下面我们介绍近似数的有效数字与其误差估计的关系。

首先，从(1.6)式可以看出，在 m 相同的情况下， n 越大，绝对误差限 ε^* 就越小，即有效位数越多，近似数就越精确。

其次，再介绍有效数字与相对误差限的关系。由(1.5)式可知，一个具有 n 位有效数字的近似数 x^* （其真值为 x ），有

$$x_1 \times 10^{m-1} \leq |x^*| \leq (x_1 + 1) \times 10^{m-1}$$

再由(1.6)式，有

$$\left| \frac{x^* - x}{x^*} \right| \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{x_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)} \quad (1.7)$$

这就是说，只要知道近似数 x^* 的有效数字的位数 n 及其最左边的第一位非零数字 x_1 ，就可以根据公式(1.7)写出 x^* 的相对误差限。

注意，若近似数 x^* 具有 n 位有效数字，则(1.7)式成立；反之，若(1.7)式成立，则不能说明 x^* 一定具有 n 位有效数字。但我们可以证明，若近似数 x^* 的相对误差限满足关系式

$$\varepsilon_r^* = \frac{1}{2(x_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)} \quad (1.8)$$

时，则 x^* 至少有 n 位有效数字。事实上，由于

$$|x^* - x| \leq |x^*| \cdot \varepsilon_r^* = |x^*| \cdot \frac{1}{2(x_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)}$$

且 $|x^*| \leq (x_1 + 1) \times 10^{m-1}$, 故有

$$\begin{aligned}|x^* - x| &\leq (x_1 + 1) \times 10^{m-1} \cdot \frac{1}{2(x_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)} \\ &= \frac{1}{2} \times 10^{m-n}\end{aligned}$$

于是, 由定义 2 可知, 近似数 x^* 具有 n 位有效数字.

由 (1.7) 式可知, 一个近似数 x^* 的有效数字的位数 n 越大, 则其相对误差限也就越小.

总之, 由 (1.6)、(1.7) 式可知, 一个近似数 x^* 具有多少位有效数字, 直接反映了它的精确程度. 有效数字的位数越多, 该近似数的近似程度就越高, 越精确.

例 4 已知 $\pi = 3.1415926\cdots$, 要使其近似值 x^* 的相对误差限小于 0.1% , 应取多少位有效数字?

若取 x^* 有 n 位有效数字, 则由 (1.7) 式, 有

$$\left| \frac{x^* - \pi}{x^*} \right| \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-n+1}$$

这里, $x_1 = 3$. 显然, 只要取 $n = 4$, 就有

$$\varepsilon_r = \frac{1}{6} \times 10^{-3} < 10^{-3} = 0.1\%$$

于是, 取得 π 的一个近似值为 $x^* = 3.142$.

§ 3 和、差、积、商的误差估计

3.1 和、差、积、商的绝对误差的估计

设 x^* 、 y^* 分别是真值 x 、 y 的近似值, 则 $x^* \pm y^*$ 的绝对误差为

$$(x^* \pm y^*) - (x \pm y) = (x^* - x) \pm (y^* - y)$$

故有

$$|(x^* \pm y^*) - (x \pm y)| \leq |x^* - x| + |y^* - y| \quad (1.9)$$

或者

$$\varepsilon^*(x^* \pm y^*) = \varepsilon^*(x^*) + \varepsilon^*(y^*) \quad (1.9)'$$