

电子计算机 常用算法

(增订版)

中国科学院沈阳计算技术研究所
后 字 四 一 四 部 队 编
北 京 工 业 大 学 计 算 站

科学出版社

电子计算机 常用算法

(增订版)

中国科学院沈阳计算技术研究所
后 字 4 1 4 部 队 编
北 京 工 业 大 学 计 算 站

科 学 出 版 社

1 9 8 3

0720/06

内 容 简 介

本书是一九七六年出版的《电子计算机常用算法》的增订版，是一本普及计算方法和程序的工具书。内容多为生产实践中常用到的算法，对于功能较强的大型算法也适当选入。每一算法之后，附有计算实例，以便增强对算法的理解，掌握算法的技巧，领会算法的运用。在增订过程中，改进并加强了原有算法和程序的功能，并增加了一些新的算法。

全书共有 113 个算法，主要是初等函数和复数运算、插值、数值微商、数值积分、线性代数计算、常微分方程的数值积分以及特殊函数计算等方面的各种算法，可供广大计算工作者阅读。

电 子 计 算 机 常 用 算 法 (增 订 版)

中国科学院沈阳计算技术研究所
后 字 4 1 4 部 队 编
北 京 工 业 大 学 计 算 站
科 学 出 版 社 出 版
北京朝阳门内大街 137 号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1976 年 11 月 第 一 版	开本：850×1168 1/32
1983 年 8 月 增 订 版	印张：19 3/4
1983 年 8 月 第 二 次 印 刷	字数：525,000

印数：87,951—110,950

统一书号：13031·2307

本社书号：3153·13-1

定价：3.15 元

增订版前言

常用算法是用电子计算机进行科学计算和工程计算的重要资料。ALGOL 语言在国内应用极为广泛，和其它计算机语言相比 ALGOL 语言更适宜于描述算法和交流算法。算法需要在使用过程中不断改进，才能完整可靠，在国外一个算法发表五年到十年后仍有改动的事例并不少见。

本书初版 1976 年出版后，很多计算工作者对此十分关心，不少单位和个人对书中的各种算法予以使用、移植和研究后，给本书提出了很多改进意见。在这次增订过程中，我们根据这些意见对有关内容进行了修改，并增加了一部分新的内容。

我们期望本书对广大使用电子计算机进行各种科学计算的工作者更有助益。

前 言

随着国民经济的发展,使用电子数字计算机的生产技术部门日益增多,普及推广工作势在必行。为了满足科技生产上的需求,结合实际,编写了《常用算法》一书,供从事此项工作的同志查阅使用。

本书的选材,着眼于经常用到的算法。对于功能较强的大型算法,也适当顾及。每一算法之后均附计算实例,以便增强对算法的理解、掌握算法的技巧、领会算法的运用。

本书是中国科学院沈阳计算技术研究所、后字 414 部队、北京工业大学计算站三单位联合编写,参与工作的同志很多,在此不一一列举。本书初稿几经讨论,反复修改,最后由丘玉圃、吴文斗、陈祖荫、吴永化、林公豫、徐峰、郭玉佩、潘振海、薛彦才等定稿。上述同志均以认真负责的精神完成本书的出版工作。

北京工业大学计算站对本书的出版,大力支持。为慎重起见,在原来调试通过的基础上,又将全书共 105 个算法逐一在 DJS-6 或 DJS-21 机上试算通过。值此本书出版之际,谨向北京工业大学计算站全体同志表示衷心的感谢。

在本书编写过程中,曾得到中国科学院计算技术研究所等单位积极支持、热心帮助,谨致谢意。

书中难免存在缺点与错误,望读者批评指正。

目 录

绪论	1
第一章 初等函数和复数运算	5
1 初等函数的计算	5
2 复数的除法	9
3 e^z (z 为复数)	11
4 复数的模与平方根	13
5 复变量三角函数	16
6 复变量的幂指函数	20
7 复变量自然对数	22
第二章 插值与数值微商	25
8 线性插值	25
9 一元三点插值	27
10 埃特金插值	30
11 爱尔米特插值	33
12 三次样条函数插值、微商或积分	35
13 二重抛物拟合插值、微商或积分	41
14 二元拟线性插值	45
15 二元三点插值	49
16 二维光滑插值	52
第三章 数值积分	61
17 定步长辛普生求积	61
18 变步长辛普生求积	63
19 自适应辛普生求积	66
20 切比雪夫求积	71
21 龙贝格求积	76
22 外推法数值求积	80

23	自动选步长的辛普生方法求二重积分	86
24	高斯法求多重积分	90
第四章 线代数计算		97
§ 1 线代数方程组的求解		97
25	高斯消去法	97
26	列主元高斯消去法	101
27	全主元高斯消去法	107
28	行主元约当逐行消去法	111
29	对称方程组的平方根法	118
30	对称正定方程组的改进平方根法	123
31	带型方程组的列主元消去法	128
32	对称带型方程组的解法	132
33	大型稀疏对称正定方程组的解法	136
34	解三对角型方程组的追赶法	141
35	共轭斜量法	144
36	病态方程组的迭代解法	150
37	复线性方程组的列主元消去法	156
§ 2 行列式求值及矩阵求逆		160
38	利用三角化求实行列式值	160
39	求对称正定矩阵行列式的值	163
40	行主元消去法求逆矩阵	167
41	全主元高斯-约当消去法求逆	172
42	对称正定矩阵的求逆	176
§ 3 特征值与特征向量的计算		181
43	求实对称矩阵的特征值及特征向量的雅可比方法	181
44	用豪塞豪德变换化对称阵为三对角阵	189
45	实对称三对角矩阵的 QL 方法	200
46	用二分法计算对称三对角阵的特征值	211
47	对称带型矩阵的三对角化	218
48	广义特征值 ($Ax=\lambda Bx$, $ABx=\lambda x$ 等)问题的简化	226
49	化一般矩阵为赫申伯格型矩阵	238
50	求实赫申伯格型矩阵特征值的 QR 算法	247

51	用改进的 LR 算法求复赫申伯格矩阵的特征值	259
52	求复矩阵的特征值及特征向量	269
53	求实矩阵的特征值及特征向量	279
第五章 求解代数方程和超越方程		294
54	三次和四次方程的代数解法	294
55	对分区间套法	304
56	求高次代数方程全部实根	307
57	抛物线法求实函数的实零点	310
58	抛物线法求任意函数零点	314
59	贝尔斯特-牛顿联合迭代法解高次方程	324
60	下降法解非线性方程组	332
61	解非线性方程组的拟牛顿法 I	336
62	解非线性方程组的拟牛顿法 II	342
63	改进的牛顿法	347
第六章 常微分方程的数值积分		356
64	定步长维梯方法	356
65	定步长龙格-库塔方法	359
66	定步长基尔方法	362
67	定步长五阶单步方法	367
68	变步长单步方法 I	371
69	变步长单步方法 II	376
70	定步长预报-校正方法	381
71	定步长哈明方法	386
72	外推法	392
73	混合方法	399
74	病态方程组的数值积分	407
75	自动积分法	413
第七章 拟合与平滑		424
76	五点三次平滑	424
77	样条函数平滑	427
78	有理切比雪夫逼近	434
79	切比雪夫曲线拟合	445

80	最小二乘曲线拟合	450
81	最小二乘曲面拟合	457
第八章 特殊函数		470
82	Γ 函数	470
83	Γ 函数的自然对数	472
84	第一类和第二类完全椭圆积分	474
85	贝塞尔函数	477
86	正交多项式	481
87	正态分布函数	485
88	指数积分	488
89	正弦积分、余弦积分和弗莱斯那积分	490
第九章 其他		499
90	多项式及其导数的计算	499
91	富里叶级数逼近	502
92	快速富氏变换	506
93	满足均匀分布的随机数的产生 I	521
94	满足均匀分布的随机数的产生 II	523
95	满足正态分布的随机数的产生	526
96	正态随机偏差	528
97	满足普阿松分布的随机数的产生	531
98	三角回归	535
99	方差的因素分析	544
100	线性规划问题解法	551
101	全整数线性规划问题解法	561
102	广义逆矩阵及线性方程组的最短最小二乘解	566
103	阻尼最小二乘法	573
104	广义逆法解非线性方程组	582
105	变尺度方法求函数极小	589
106	筛法	605
107	减缩(一)	607
108	减缩(二)	609
109	级数的反演	611
110	级数的除法	614
111	级数的幂	617
112	切比雪夫多项式系数	620
113	二项式系数	623

绪 论

- 电子计算机是本世纪重大科学发明之一。它的出现,对科学技术的各个领域,特别是对计算数学,产生了深远的影响。但是,在电子计算机问世以后,它的高运算速度和人工编码的缓慢形成了明显的矛盾。直到五十年代末,算法语言诞生,这一矛盾才得到缓和。算法语言不仅把人们从繁琐的人工编码中解放出来,而且大大提高编制程序的效率,同时便于公开交流算法。我们知道,手编程序依赖于电子计算机的性能,并且只能在该计算机上使用。因此,要熟悉一个程序,必须先了解计算机的指令系统(因不同型号计算机其指令系统各异,故妨碍了算法的交流),而算法语言的采用,则克服了上述缺点。按照一种语言系统编制的程序,可以在采用该语言系统的任何电子计算机上使用,不管其指令系统如何千差万别。因此,算法语言为建立通用标准程序库创造了条件。

鉴于使用标准程序可以避免重复性劳动,提高计算机的效率,便于交流算法,我们编写了这本 ALGOL 60 常用算法。编写的方针是常用而有效,同时注意近年来出现的新算法,如 *LB*, *QR* 算法、样条(Spline)函数、快速富氏变换等,其中也包括从生产实际提出的具体问题的算法。为了通用,程序一律用 ALGOL 60 语言编写。所有程序均在 DJS-6 或 DJS-21 电子计算机上调试过。除个别程序外,一般未加注解。有关程序的编制和注意事项可以在算法的说明部分找到。ALGOL 60 对输入语句和输出语句未作定义,而输入、输出语句的表示也不统一,本书对输入、输出中的整型量、实型量、数组等未加区别,一律用 read 表示输入,用 print 表示输出。本书对部分程序加了保护性措施,即程序指明计算何时失败。一般的处理是设置一个非局部标号,失败(如消元过程中,发现主元为零)时转此标号。应在标号处安排输出语句、打印标志或作其它处置。

本书中,有一类过程(如数值求积或常微分方程组的数值积分过程),以过程作为形式参数.相应的实在参数(计算被积函数的过程或计算常微分方程右端 $f(t, y)$ 的过程)过程,自行编制,其过程导引形式已在参数表中规定,在分程序中的位置见相应的例题.一般,不改变过程体本身,则不允许改变作为形式参数所对应的过程的过程导引形式.

本书还使用了固有(own)变量和固有数组.对于不允许使用固有变量和固有数组的计算机,应将其作全程量处理.

在本书中,程序均以过程(procedure)形式出现,编写格式如下:

一 功能. 简单叙述过程的用途.

二 方法概要. 给出相应于过程的数值方法或计算公式.对于熟知的方法,叙述简短;对于新方法,叙述稍详.若想深入了解数值方法,可查阅参考文献所列各书.

三 过程及使用说明. 共分三项,介绍如下:

1 形式参数表. 逐个列出过程的形式参数,指明其意义.

2 过程. 给出 ALGOL 60 程序.

3 说明. 指出编制程序和调用过程时应注意的事项,诸如原始数据和计算结果的排列、存放和输入、输出以及失败处理等等.

四 例题. 以具体的数值例子说明怎样使用过程并给出相应的程序和计算结果.

最后,给出有关数值方法或过程的主要参考文献.

本书分九章,共一百零五个常用算法.

第一章是初等函数和复数运算.这里编写了一般编译系统未包括在其内而实践中常常用到的复变量初等函数.其中,介绍用连分式计算实变量初等函数的目的(没有给出直接使用的程序),是为了给使用者提供一个算法.

第二章是插值和数值微商.考虑到一般多项式插值,当插值多项式的次数较高时,并不一定给出好的结果这一事实,以及从实

用出发, 我们选取的算法大部分是从 n 个数据点中选取两个点或三个点进行插值, 即线性插值或抛物插值. 当插值点超出数表范围时, 进行外插. 三次样条函数插值是样条函数在插值方面的应用.

第三章是数值积分. 这一章主要是单重积分的计算过程. 除了常用的定步长和变步长辛普生求积法外, 还有龙贝格和切比雪夫求积过程, 这是在实际计算中很有效的方法. 自适应辛普生方法是辛普生方法的改进, 其特点是根据被积函数的性态分割积分区间, 因而在速度和精度方面都有显著提高; 特别是当被积函数为强峰函数时, 尤为有效. 此外, 还有重积分的计算过程.

第四章是线代数计算. 本章包括线性方程组求解、行列式计算、矩阵求逆以及特征值和特征向量计算等过程. 在方程组求解方面, 除解一般方程组的精确法外, 还包括高阶对称方程组和带型方程组的求解过程, 为应用有限元法提供了有效的工具. 此外, 还介绍了复的和病态方程组, 这里介绍的病态方程组的解法还在继续研究中. 关于矩阵求逆, 均为常用算法, 但在节省存贮方面有所考虑. 在特征值和特征向量的计算上, 主要是近年来发展迅速而有效的 LR 和 QR 算法. 从计算观点来看, 对三对角阵, 特别是对 Hessenberg 型矩阵(简称 H -型阵), 应用这些算法尤为有利. 因为在应用这些算法时, 总是先把对称矩阵化成三对角阵, 把一般矩阵化成 H -型阵, 故我们选了化对称矩阵为三对角阵和化一般矩阵为 H -型阵的过程. 由于求一般矩阵的特征值或特征向量时, 应首先调用这些过程, 然后再调用求特征值或特征向量的过程, 因而在形式参数表中区分输入参数和输出参数, 方便使用.

第五章是代数方程和超越方程求根. 由于在实际工作中超越方程和非线性方程组比高次代数方程普遍, 所以我们着眼于前者. 而在解法上, 则侧重于牛顿法. 对于高次代数方程, 仅选常用而有效的传统方法. 由于非线性方程组与最优化问题关系密切, 故引进改进的牛顿法解非线性方程组的算法, 以利于解决最优化问题.

第六章是常微分方程初值问题的数值积分. 本章包括常用的定步长和变步长方法, 还有高精度混合方法和外推法、自动积分和

病态方程组的积分过程. 其中, 病态方程组的数值积分法近年来颇受重视, 应用广泛. 使用本章的过程, 必须自行编制计算微分方程右端函数的过程, 要注意过程导引形式(在形式参数表中给出). 应当指出的是, 常微分方程组的自动积分方法提供了为达到预定精度而恰当选取积分公式的阶(变阶)和步长(变步长)的完全自动过程, 然而, 对一般问题使用这种方法, 不见得在所有情况下都有利.

第七章是拟合与平滑. 本章包括曲线拟合和曲面拟合. 在方法上, 则有最小二乘拟合、切比雪夫拟合和样条函数平滑等. 这些都是常用而有效的算法.

第八章是特殊函数计算. 近年来, 关于特殊函数的计算, 新方法很多. 本章仅选常见和常用的特殊函数算法, 主要着眼于精度和使用方便, 在计算速度方面考虑不多.

第九章是其它. 就内容讲, 不便列入上述八章的算法均编入本章, 因此, 方面多、内容杂. 其中包括富氏变换、线性规划、概率计算以及用广义逆矩阵方法解最优化问题等. 关于富氏变换, 共两个算法. 其一是快速算法, 另一是实富氏系数算法. 因富氏变换算法的总计算量是 n^2 个乘法, 而快速算法的总计算量是 $n \log_2 n$ 个乘法, 故当 n 较大时, 可用快速算法; 当 n 不大时, 使用后者, 程序简短. 关于用阻尼最小二乘法、广义逆矩阵法解线性或非线性方程组的算法, 已在实用中收到良好效果. 另外, 变尺度法对于解最优化问题也极为有效. 关于线性规划问题, 共有两个算法. 一个是全整数线性规划问题, 另一是一般线性规划问题, 前者采用对偶单纯形方法, 后者则用改进的单纯形方法. 改进的单纯形法采用不完全人工基底, 既能解有自然基底的问题, 也能解无自然基底的问题. 概率计算的几个算法, 也是常见而有效的.

本书的算法, 虽均经调试, 并且解算过实际课题, 但在广泛的使用中, 难免出现这样或那样的问题. 同时, 目前计算机的使用日益广泛, 必然会不断改进旧算法、产生新算法. 所以, 一个真正达到标准的标准程序库, 只能在广泛使用、反复考验中逐步完善, 最后成型.

第一章 初等函数和复数运算

I 初等函数的计算

一 功 能

本过程用连分式计算以下七个函数:

$\sin x, \cos x, \tan x, e^x, \sinh x, \cosh x, \tanh x$
中的任一个.

二 方 法 概 要

若记连分式

$$b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \frac{a_3}{b_3 + \dots}}} = b_0 + \frac{a_1}{b_1} + \frac{a_2}{b_2} + \frac{a_3}{b_3} + \dots, \quad (1)$$

则由高斯的结果[1], 可将函数 e^x 展开为

$$e^x = 1 + \frac{x}{1} - \frac{x/1 \cdot 2}{1} + \frac{x/2 \cdot 3}{1} - \frac{x/2 \cdot 3}{1} + \frac{x/2 \cdot 5}{1} - \dots \\ - \frac{x/2(2n-1)}{1} + \frac{x/2(2n+1)}{1} - \dots. \quad (2)$$

再利用紧缩连分式即可将上述展式¹⁾化为

$$e^x = 1 + \frac{x}{1-x/2} + \frac{x^2/4 \cdot 3}{1} + \frac{x^2/4 \cdot 15}{1} + \frac{x^2/4 \cdot 25}{1} + \dots \\ + \frac{x^2/4(4n^2-1)}{1} + \dots. \quad (3)$$

1) 见[2].

记连分式

$$F(x^2) = \frac{x^2/4 \cdot 3}{1} + \frac{x^2/4 \cdot 15}{1} + \frac{x^2/4 \cdot 35}{1} + \dots$$

$$+ \frac{x^2/4(4n^2-1)}{1} + \dots \quad (4)$$

及

$$f(x^2) = 2(F(x^2) + 1), \quad (5)$$

则(3)式可简化为

$$e^x = \frac{f(x^2) + x}{f(x^2) - x}. \quad (6-1)$$

由此得到

$$\begin{cases} \sinh x = \frac{2xf(x^2)}{f^2(x^2) - x^2}, \\ \cosh x = \frac{f^2(x^2) + x^2}{f^2(x^2) - x^2}, \\ \tanh x = \frac{2xf(x^2)}{f^2(x^2) + x^2}. \end{cases} \quad (6-2)$$

再利用等式

$$\sin(iy) = i \sinh y, \quad \cos(iy) = \cosh y,$$

其中 $i = \sqrt{-1}$, 易得

$$\begin{cases} \sin x = \frac{2xf(-x^2)}{f^2(-x^2) + x^2}, \\ \cos x = \frac{f^2(-x^2) - x^2}{f^2(-x^2) + x^2}, \\ \tan x = \frac{2xf(-x^2)}{f^2(-x^2) - x^2}. \end{cases} \quad (6-3)$$

注意(6-2)与(6-3)的区别仅是将一切 x^2 代以 $-x^2$.

连分式 $f(x^2)$ 的展开形式为

$$\begin{aligned} f(x^2) &= 2(1 + F(x^2)) \\ &= 2\left(1 + \frac{x^2/4 \cdot 3}{1} + \frac{x^2/4 \cdot 15}{1} + \dots + \frac{x^2/4(4n^2-1)}{1} + \dots\right) \\ &= 2 + \frac{x^2}{2 \cdot 3} + \frac{x^2}{2 \cdot 5} + \dots + \frac{x^2}{2(2n+1)} + \dots \\ &= (4 \cdot 1 - 2) + \frac{x^2}{4 \cdot 2 - 2} + \frac{x^2}{4 \cdot 3 - 2} + \dots + \frac{x^2}{4(n+1) - 2} + \dots. \quad (7) \end{aligned}$$

若取

$$F_n(x^2) = \frac{x^2/4 \cdot 3}{1} + \frac{x^2/4 \cdot 15}{1} + \dots + \frac{x^2/4(4n^2-1)}{1} = \frac{A_n}{B_n} \quad (8)$$

去逼近 $F(x^2)$, 则截断误差

$$|F - F_n| \leq (x/2)^{2n} / B_{n-1} B_n \prod_{i=1}^n (4i^2 - 1), \quad (9)$$

等号仅对 $x=0$ 成立. 为使 $F_n(x^2)$ 得到 12 位小数的精确度所需取的项数是

x	n
0.1	4
1	6
10	17

三 过程及使用说明

1 形式参数表

x 自变量值.

n 精确度控制变量.

$parm$ 函数类型控制变量.

ans 函数值.

$$parm = \begin{cases} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \text{ 时} \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{cases}, \quad ans = \begin{cases} \sin x \\ \cos x \\ \tan x \\ e^x \\ \sinh x \\ \cosh x \\ \tanh x \end{cases}.$$

2 过程

```
procedure CF(x, n, parm, ans);
value x, n, parm;
```

```

integer n, parm; real x, ans;
begin integer i, nd; real r, f;
  r:=if parm ≤ 3 then -x×x else x×x;
  f:=4×n+2;
  for i:=n step -1 until 1 do f:=4×i-2+r/f;
  nd:=if parm ≤ 3 then parm+1 else parm-3;
  ans:=if nd=1 then (f+x)/(f-x)
        else if nd=2 then 2×x×f/(f×f-r)
        else if nd=3 then (f×f+r)/(f×f-r)
        else if nd=4 then 2×x×f/(f×f+r)
        else x
end;

```

3 说明

$parm$ 为 1—7 以外的其他整型数时, ans 将被赋以 x 的值.

四 例 题

计算 0.25, 0.5 和 $\frac{\pi}{4}$ 的所有七个函数值, 取 $n=4$.

计算结果

x	0.25	0.5	0.7853981634
$\sin x$	0.2474039590	0.4794255384	0.7071067810
$\cos x$	0.9689124216	0.8775825618	0.7071067810
$\tan x$	0.2553419210	0.5463024896	1.000000000
e^x	1.284025416	1.648721270	2.193280050
$\sinh x$	0.2526123166	0.5210953052	0.8686709612
$\cosh x$	1.031413098	1.127625962	1.324609083
$\tanh x$	0.2449186622	0.4621171572	0.6557942024