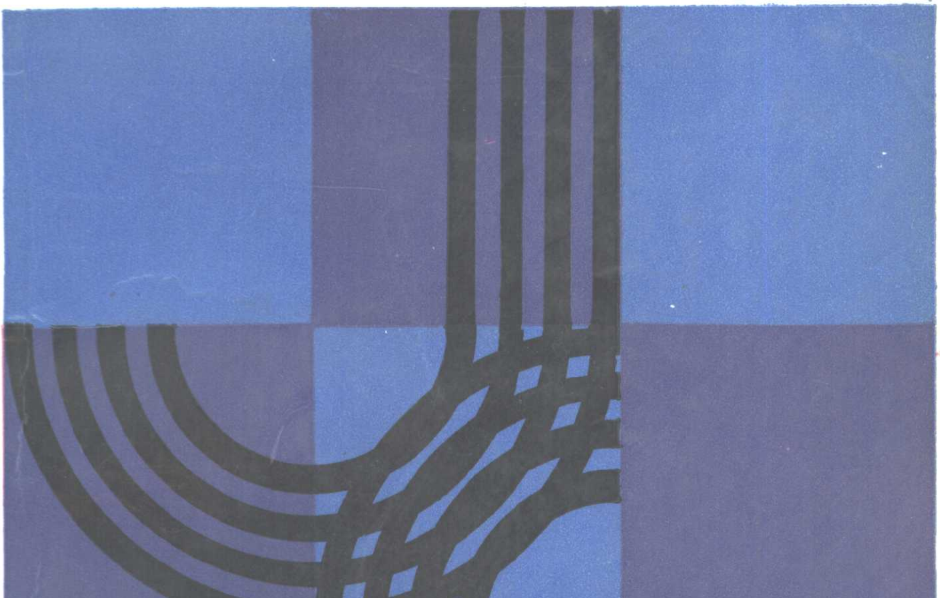
高等学校试用教材

计算方法

唐珍　金坚明　李志杰　编著



高等教育出版社

高等学校试用教材

计 算 方 法

唐 珍 金坚明 李志杰 编著

高等教育出版社

（京）112号

内 容 简 介

本书是作者根据大学本科“计算方法”教学大纲，以及在总结多年教学经验基础上为高等师范院校编写的．本书包括电子计算机上常用的各种数值计算方法：插值函数、快速富氏变换、数值积分、解线性代数方程组的直接法和迭代法、解非线性方程和方程组的迭代法、求矩阵特征值和特征向量的数值方法、解常微分方程和偏微分方程的数值方法．

本书内容丰富，取材较新，理论上较为完善，而且注意到实际应用，许多例题是计算机上计算的结果，还给出了一些常用算法的BASIC程序．

本书可供高等师范院校数学系、计算机系、物理系及高等院校理工科有关专业使用，也可供从事数值计算的科技工作者阅读参考．

高等学校试用教材

计 算 方 法

唐 珍 金坚明 李志杰 编著

*

高等教育出版社 出版

新华书店总店科技发行所发行

北 京 印 刷 一 厂 印 装

*

开本850×1168 1/32 印张 12.75 字数 310 000

1992年9月第1版 1992年9月第1次印刷

印数0 001—3 [illegible]00

ISBN7-04-003907-9/TP·103

定价4.80元

前　言

从1985年以来在历年召开的西北地区及甘肃省师范院校“计算数学”教材讨论会上，代表们一致认为要使培养出来的学生掌握必要的计算方法理论和计算技能，并适应当前计算机日益广泛深入使用的局面，切望能编出一部供高等师范院校用的,新的“计算方法”教材．

从1986年开始我们就着手编写，具体分工如下：

第一，五，六章由唐珍编写．

第三，七，八，九章由金坚明编写．

第二，四章由李志杰编写．

1987年初完稿后，经过在西北师范大学数学系、计算机系多次试用，反复讨论共同修改，最后定稿．

本书在编写过程中，力求注意将一些比较新的、成熟的、重要的方法写进去；注意与计算机的结合；对一些陈旧的在几门课程教学中重复出现的内容进行了压缩删减．

考虑到高等师范院校数学系、计算机系、物理系开设这门课情况不一，课时分配有一定差别，为此，本教材把部分内容打了*号，供使用时根据情况取舍．本书也可供高等院校理工科有关专业使用．

本书在编写中参考了有关书籍和文献，受到不少启示，这里向有关的作者表示谢意．

中国科学院学部委员计算中心主任石钟慈教授在百忙中抽出不少时间对本教材进行了详细认真地审阅，提出了很多宝贵的意见和建议，在此表示衷心的感谢．

编者

一九九一年二月

目　录

第一章　引　　论

近40年来，计算已发展成为和理论、实验相并列的第三种科学方法，它广泛应用于科学研究与工程设计的各个领域，起着理论与实验不可替代的作用．许多大规模复杂的物理过程无法用实验来实现，或者虽然可以实验，但代价十分昂贵，这些问题的解决必须采用数值模拟方法．例如在核武器的研制中要用实验方法测出爆炸过程中核武器内部细致的反应过程非常困难，而用计算机模拟核爆炸，则可以给出核爆炸各个细节的图象、定量数据及运动的全过程，从而帮助人们选择最优方案．国民经济建设中许多重大项目，如水坝、飞机、船舶、桥梁建筑的设计，油田勘探、气象预报以及人口预测、宏观经济管理等都离不开科学计算．科学计算不仅推动了研究与设计工作本身，而且可以带来巨大的经济效益和社会效益，影响一个国家和民族的长远利益．在当代，对科学计算的掌握程度已成为衡量一个国家科技实力的重要标志之一．

人类计算能力的提高有赖于计算方法和计算工具两个方面的进步，来自计算方法的进步和来自计算机硬件的进步是同等重要的．我们必须高度重视科学与工程计算（简称科学计算），重视计算方法的研究与应用．

§1　计算方法研究的对象与特点，数值问题与算法

计算方法（数值计算方法、数值方法）或计算数学（数值数学、数值分析）是数学的一个分支．什么叫计算方法？研究用计

算工具得出数学问题数值解的方法与算法的学问，就称为计算方法．从有数学的时候就有了计算方法，只是各个时代所用的计算工具不同而已．在现代，计算工具主要指电子数字计算机．

算法是指一个确定的有限的操作序列，在它们作用于一类问题给定参数之后，便产生问题的解答．操作可以理解为加、减、乘、除等基本运算和“若……，则……；否则……”等等的规定计算次序的逻辑运算．参数和解答一般地说是由有限位数字构成的大小在某个范围内的有理数，例如在 -10^{+99}到 $+10^{+99}$范围内的有 8 位或12位数字的有理数．

方法是一个抽象的基于准确计算的运算序列，它可能是无限的，它所考虑的运算数域一般是连续的无界的实(或复)数域．

我们知道许多数学问题的解，要经过无限次算术运算、或积分之类的连续变量的运算，才能计算出结果来．如计算任意角的三角函数值、求一般方程的根、计算任意函数的定积分、求一般微分方程的解等等．但我们在计算机上只能进行有限次运算，而且一般只能进行算术运算，所以必须把无限次的运算过程截断成有限次求解，把连续变量的问题（如微分方程初值问题）转化为离散变量的问题（如差分方程）求解．截断和离散化实质都是近似替代．

例如，求非线性方程 $f(x)=0$ 的根，一般是很难的，但如已知根的粗略近似值的 x_0，根据Taylor级数

$$f(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\cdots$$

取等式右边前二项近似代替 $f(x)$(所谓线性化)就会得到很容易求解的线性方程

$$f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)=0,$$

解之得

$$x_1=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)},$$

虽然x_1不一定是根，但往往比x_0更接近于根．用x_1代替x_0，进行类似计算，即可得x_2，如此继续下去，往往可得一系列越来越接近根的近似值x_1，x_2，x_3，…，其中

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

这种求根方法称为Newton迭代法．这里的问题是：线性化后问题的解作为原问题的近似解误差有多大？能否通过增大n使误差逐渐减小？这就是误差估计和收敛性问题．我们自然需要收敛的方法．

例1.1.1　令$f(x)=x^2-2=0$则得求$\sqrt{2}$的Newton 迭代法

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n^2-2}{2x_n}=\frac{1}{2}\left(x_n-\frac{2}{x_n}\right).$$

若加上迭代终止规定，例如$|x_{m+1}-x_m|\leqslant 2\varepsilon$，就是截取序列$x_1$，$x_2$，…的有限项，从而得到Newton迭代算法．取$x_0=1.4$，$\varepsilon=\frac{1}{2}10^{-4}$，得$x_1=1.4148$，$x_2=1.41421$.可以证明,算法是收敛的．

又如求解常微分方程的初值问题

$$\begin{cases}y'=f(x,y), & a\leqslant x\leqslant b\\ y(a)=y_0\end{cases}$$

通常无法求出$[a,b]$上的解$y(x)$的解析表达式,但许多问题往往只需算出它在某些点上的近似值，如点$x_n=a+nh$($n=0,1,2,\cdots,N$，步长$h=\frac{b-a}{N}$)上的近似值$y_n\approx y(x_n)$，在这些点上有

$$y'(x_n)=f(x_n,y(x_n)),\qquad n=0,1,2,\cdots,N,$$

由于

$$y'(x_n)=\lim_{h\to 0}\frac{y(x_{n+1})-y(x_n)}{h},$$

我们用均差$\frac{y(x_{n+1})-y(x_n)}{h}$近似代替微商$y'(x_n)$，用$y_n$近似代替$y(x_n)$(所谓离散化)，得到

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{h}=f(x_n, y_n),\ n=0,\ 1,\ 2,\cdots,\ N-1,$$

从而有

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n, y_n),\ n=0,1,2,\cdots,\ N-1.$$

这样，由已知值y_0出发，便可逐步求出$y_1, y_2, \cdots, y_N$. 这种求常微分方程初值问题解的近似方法称为Euler折线法．这里的问题是离散化问题的解作为原问题的近似数值解，其误差有多大?能否通过缩小h使误差无限减小？同样是误差估计和收敛性的问题．

例 1.1.2 令

$$\begin{cases} y'=-y, & 0\leqslant x\leqslant 1, \\ y(0)=1, \end{cases}$$

则得Euler折线法

$$y_{n+1}=y_n-hy_n=(1-h)y_n,\ y_0=1.$$

取不同步长h（例如$h=0.1, x_n=nh, n=0,1,\cdots,10$)，由$y_0=1$出发算出，

当$h=0.1$时，$y_{10}=0.3487$;

当$h=0.01$时，$y_{100}=0.3660$;

当$h=0.001$时，$y_{1000}=0.3677$;

当$h=0.0001$时，$y_{10000}=0.3678$;

而准确值为0.3679;

可以看出，算法是收敛的．

有些数学问题的解，可以经过有限次算术运算计算出结果来。例如，求线性代数方程组的解．但计算机只能用有限位数字表示

的数进行运算，其余位的数字必须舍入，从而产生舍入误差．这里的问题是舍入误差对解有多大的影响？计算出的解是否可靠？这就是数值稳定性问题．在计算机上自然要采用数值稳定的算法．

例 1.1.3 $\begin{cases}1.00\times10^{-4}x+1.00y=1.00,\\1.00x\qquad\qquad+1.00y=2.00.\end{cases}$

用Gauss消元法求解（取三位有效数字）：

$$\begin{cases}1.00\times10^{-4}x+1.00y=1.00,\\(1.00-1.00\times10^{4})y=2.00-1.00\times10^{4}\end{cases}$$

或

$$\begin{cases}1.00\times10^{-4}x+1.00y=1.00,\\-1.00\times10^{4}y=-1.00\times10^{4}.\end{cases}$$

由此

$$y=1.00,\qquad x=0.$$

而准确解是

$$y=0.99990\cdots,\quad x=1.00010\cdots$$

于是算得的 x 是不可靠的，舍入误差影响很大，算法不是数值稳定的．

但是如果我们在消元过程中先交换第一和第二个方程，选用系数绝对值大的元（主元）消去系数绝对值小的元，则有

$$\begin{cases}1.00x+1.00y=2.00,\\(1.00-1.00\times10^{-4})y=1.00-2.00\times10^{-4}.\end{cases}$$

或

$$\begin{cases}1.00x+1.00y=2.00,\\\qquad\quad 1.00y=1.00.\end{cases}$$

因此

$$y=1.00,\qquad x=1.00.$$

它们是准确解的极好近似值．选主元的消元法（主元消元法）是

数值稳定的.

不过对有些问题即使采用数值稳定的算法，也不一定能算出可靠的解.

例 1.1.4 对

$$\begin{cases} x+\dfrac{1}{2}y+\dfrac{1}{3}z=\dfrac{11}{6}, \\ \dfrac{1}{2}x+\dfrac{1}{3}y+\dfrac{1}{4}z=\dfrac{13}{12}, \\ \dfrac{1}{3}x+\dfrac{1}{4}y+\dfrac{1}{5}z=\dfrac{47}{60} \end{cases}$$

求解时，先把系数舍入成两位有效数字的数，变成

$$\begin{cases} x+0.50y+0.33z=1.8, \\ 0.50x+0.33y+0.25z=1.1, \\ 0.33x+0.25y+0.20z=0.78. \end{cases}$$

用主元消元法解之，从后二方程消去 x，得

$$0.080y+0.080z=0.20,$$

$$0.080y+0.090z=0.19,$$

从前一方程消去 y，得

$$0.010z=-0.010,$$

于是

$$z=-1.0,$$

回代得

$$y=3.5, \quad x=0.38,$$

与原方程精确解 $x=y=z=1$ 比较，计算出的近似解完全不可靠.

显然，这是问题参数的舍入产生的微小变化引起的解的剧烈变化.这样的问题就是所谓的病态问题.我们必须把问题的病态与算法的数值不稳定性严格区分开来，这样才能真正鉴别出算法

的好坏．

对于一个可用计算机求解的问题，可能不只有一个算法，例如上述方程组还可用Cramer法则求解．这里的问题是哪个算法占用计算机的时间少？或运算量小？占用内存也少？这就是算法的有效性问题．我们自然需要有效的算法．

例如主元消元法需$\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3}$次乘除法，是有效的算法．Cramer法则需$(n+1)!(n-1)+n$次乘除法，不是有效的算法．

例 1.1.5 计算n次多项式值的两个算法，当$n=5$时有形式：

$$a_5+a_4x+a_3x\cdot x+a_2x\cdot x^2+a_1x\cdot x^3+a_0x\cdot x^4,$$

$$((((a_0x+a_1)x+a_2)x+a_3)x+a_4)x+a_5,$$

前者要用$2n-1$次乘法，n次加法，后者即秦九韶算法，只用n次乘法，n次加法．它们都是有效的，而秦九韶算法更好．

最后，还有一个如何描述算法的问题．计算方法中通常采用自然语言与数学语言，有时也采用更直观的流程图．例如求$\sqrt{a}$ $\left(\frac{1}{4}<a<1\right)$的近似值$x$，使其相邻两近似值之差的绝对值不超过$2\varepsilon$，我们采用Newton法，取$x_0=\frac{2}{3}a+\frac{17}{48}$，其流程图如下：

总之，计算方法学科研究的对象是用计算机求解数学、物理、工程等领域中各类数学问题的数值方法与算法的构造、分析与描述．构造或推导求解方法与算法应以计算机所能执行的基本运算为依据，在结构上应具有简单性，争取具有递推性（如Newton法、Euler折线法、秦九韶法等）以方便程序设计，并应考虑运算量和内存占用量尽可能小．问题求解方法与算法的基本的构造手段是近似代替．用简单的函数，如多项式、有理函数、分段（片）多

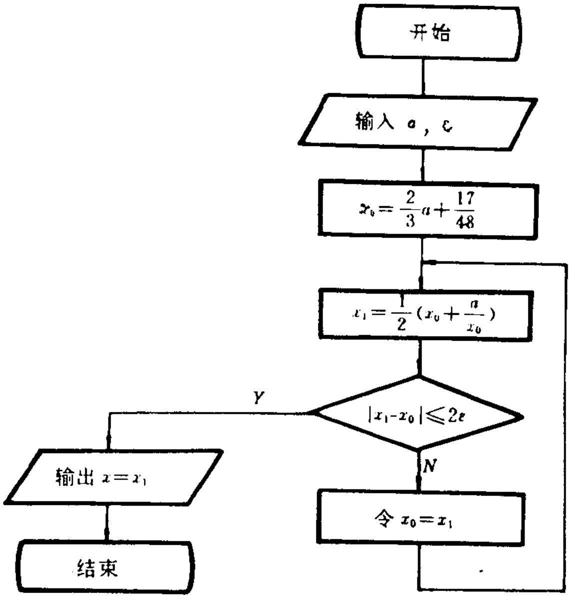


图 1.1.1 求平方根的Newton法（分数取有限位小数）

项式等近似替代较复杂或只知在若干点上值的函数，就是所谓函数逼近．利用函数逼近可以较容易的计算函数的零点（根）、导数和积分等．利用导数的近似公式，又可把微分方程化成代数（差分）方程（如Euler折线法）.分析求解方法与算法，包括分析其收敛性与数值稳定性，估计收敛性误差、离散化误差与舍入误差．求解方法与算法的描述，我们采用自然语言与数学语言或流程图．这些问题的论述，也就是计算方法课程的主要内容．

计算方法学科的突出特点是面向计算机，特别强调算法的数值稳定性、有效性和数值试验．

我们的追求之一是理论与实践并重：既讨论算法推导与收敛性，又讨论误差分析、数值稳定性与有效性，并给出不少用

BASIC语言编写的常用数值算法程序.我们的追求之二是常用、基本算法与新型算法兼顾：除常用、基本算法外，增加并行算法等新型算法，这些可以说是本教材的明显特色.

§ 2 浮 点 数

当在数字计算机上执行算法时，由于计算机的有限字长（手算也一样），我们只能考虑部分有理数集合. 一般来说，计算机只对如下形式的有理数进行操作：

$$fl(x)=(a)10^{s},$$

其中指数或称阶码 s 为整数：$|s|\leqslant p$，而 a 为小数部分或称尾数，它是满足 $|a|<1$ 的 t 位十进制小数. 上述表示法不是唯一的. 若 $|a|\geqslant 0.1$，则 $fl(x)$ 称为规格化浮点数，简称浮点数. 这种表示法是唯一的. t 称为浮点数的精度.

一般有

$$fl_{\beta}(x)=(a)\beta^{s},$$

$0.1\leqslant|a|<1$，是 t 位 β 进制小数. 通常 $\beta=2,8,10,16$；$p=99$；$t=8$ 至12. 当 $\beta=10$时，记 $fl_{10}(x)=fl(x)$.

一个实数 x 用它最接近的浮点数 $fl_{\beta}(x)$ 来近似表示时，称为舍入. 对 $fl(x)$ 我们用四舍五入.

例 1.2.1 最接近 $e=2.718282\cdots$ 的浮点数，当 $t=4$ 时是 $fl(e)=(0.2718)10$，当 $t=5$ 时是 $fl(e)=(0.27183)10$.

假设计算机有 $2t$ 位的累加器，两个浮点数 $fl(x)$ 和 $fl(y)$ 进行加法是先对阶（码），即使绝对值小的数的指数与绝对值大的数的指数相同，相应的调整尾数，然后形成 $z=fl(x)+fl(y)$（设 $|z|\leqslant 10^{p}$），再调整尾数和阶码，并四舍五入成规格化浮点数 $fl(z)$.

例 1.2.2 $(-0.1002)10^{9}+(0.9995)10^{8}$

$$
\begin{array}{r}
-(0.10020000)10^9 \\
+(0.09995000)10^9 \\
\hline
-(0.00025000)10^9
\end{array}
$$

其它算术运算有相应的过程，它们一起构成所谓的浮点算术．这种算术一般不是封闭的，即可能发生“溢出”($|z|>10^p$)，结合律和分配律也都不成立。

例 1.2.3

$$
\begin{aligned}
&[(0.9276)10^{-2}+(0.8497)10^{-2}] \\
&+(0.6342)10^{-2} \\
&=(0.2411)10^{-1}. \\
&(0.9276)10^{-2}+[(0.8497)10^{-2} \\
&+(0.6342)10^{-2}] \\
&=(0.2412)10^{-1}.
\end{aligned}
$$

例 1.2.4

$$
\begin{aligned}
&(0.6849)10^5\times(0.5833)10^4 \\
&+(0.6849)10^5\times(0.5869)10^7 \\
&=(0.3995)10^9+(0.4020)10^{12} \\
&=(0.4024)10^{12}. \\
&(0.6849)10^5\times[(0.5833)10^4 \\
&+(0.5869)10^7] \\
&=(0.6849)10^5\times(0.5874)10^7 \\
&=(0.4023)10^{12}.
\end{aligned}
$$

这些情况表明，在理论研究中直接应用浮点数是很不方便的．

§ 3 误差的基本概念，简单运算的误差分析

当研究算法时，我们离不开数值解的精确度，所以必须分析数值解的误差．

一、误差的来源与分类