JISUAN FANGFA DAOYIN (XIUDINGBAN)

计算方法导引

(修订版)

高等学校教学用书

陈公宁 沈嘉骥 编

北京师范大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

计算方法导引/陈公宁,沈嘉骥编.—修订版.—北京:北师大出版社,2000.1
高等学校教学法用书
ISBN 7-303-00277-4

Ⅰ.计… Ⅱ.①陈…②沈… Ⅲ.数值计算-计算方法-高等学校-教材 Ⅳ.0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2000)第 00836 号

北京师范大学出版社出版发行
(北京新街口外大街 19 号 邮政编码:100875)
出版人:常汝吉
丰润县印刷有限公司印刷 全国新华书店经销
开本:850 mm×1 168 mm 1/32 印张:12.5 字数:306 千字
1988 年 12 月第 1 版 2000 年 1 月第 2 次印刷
印数:1~5 000 定价:16.00 元

修订版前言

本书自初版问世至今已有11年整. 作者了解，除了北京师范大学数学系以外，北京、河北、内蒙古、山东、湖北、福建、河南等地部分综合大学、师范院校以及部队院校曾采用过此教材，普遍反映其难易程度比较适合我国目前非计算数学专业的不同水平读者的需要. 此外，整个内容通俗易懂，很有可读性.

此次修订适当地调整了各章节的结构和内容，补充了一些例题和习题，并修正了初版本错谬；力求保持原书的框架与特点. 希望能被更多的兄弟院校认可与选用.

杨淳等同志先后讲授过这本教材，他们提出过十分宝贵的意见；北京师范大学计算数学教研室同仁也经常给予我们鼓励与支持. 我们在此表示衷心的感谢. 我们也感谢北京师范大学出版社王文湧、潘淑琴与吕建生同志在本书出版过程中给予的大力帮助. 胡永建博士为本书编辑、排印工作付出巨大的劳动，使本书修订后增色不少. 在此谨致谢忱.

编　者

1999年8月于北京师范大学数学系

第一版前言

随着电子计算机的广泛应用，计算数学近30年来有了很大的发展，它的理论与基本方法已经影响到许多学科，并在生产、管理、教学与科学研究部门得以广泛应用．本教材是根据大学本科计算方法教学大纲，并结合函授及业余进修的特点编写的．它的目的是：通过学习本课程内所介绍的一些常用的基本数值方法，读者能够了解计算数学的特点，并初步掌握数值计算的基本理论与算法，培养应用电子计算机解决实际问题的能力．

本教材考虑到各种层次的读者的需要，坚持少而精的原则，在整个内容安排上强调重点，略去一些较难的内容，如矩阵的特征值与特征向量的计算、数值微分、高斯求积公式、函数的一致逼近等．在处理每一个问题时，尽量讲明基本原理，并辅以相应的算法，必要的例题与练习题，力求在保证一定的理论严格性前提下，突出计算方法课程本身的应用价值．

本教材只要求数学分析与线性代数的初步知识作为背景材料(一些常用的结论罗列在正文后面的附录内)，因而它可以用做非计算数学专业的大学本科生以及各类工程技术人员的计算方法参考书与自学或函授教材．

本教材要求讲授60学时，业余进修讲课76学时．自学者则约需140学时．

虽然本教材中的练习题基本上都可借助于小型计算器解题，但我们强调指出，凡有条件使用电子计算机者，应该尽量使用计算

机算题，以便体会有关数值方法的实际应用价值，并初步掌握算题的技巧.

本教材编写过程中，袁兆鼎教授与刘贵贤副教授提出许多宝贵的意见和建议，在此谨致谢意.

编　者

1987年2月于北京师范大学数学系

目　录

第一章 概　论

本章简单地介绍计算方法课程的主要内容、计算机数系和误差基本概念，为学好本课程的后面内容打下必要的基础.

§1 计算方法的主要内容

在工程技术与自然科学里，许多现象的定量分析往往可以抽象地归纳为求解特定的数学问题. 一般说来，这些数学问题不容易甚至无法求得它们的精确解，需要求助于近似方法得到问题的近似的数值解. 让我们考虑下面三个实例.

例 1.1 求解定积分

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x. \tag{1.1}$$

这是一个十分基本的计算问题. 但是，众所周知，除了很有限的几种类型以外，对于一般的被积函数 $f(x)$，往往无法求得定积分 (1.1) 的精确结果. 为此，我们可以求助于所谓 **数值积分**(详见第六章) 的技巧，求得定积分的近似值. 这种办法的基本思想是用合适的有限和近似代替 (1.1) 中的定积分，即

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{m} a_k f(x_k),$$

这里， $x_0, x_1, \cdots, x_m$ 是区间 $[a,b]$ 上的某些点， $a_0, a_1, \cdots, a_m$ 是与 $f(x)$ 无关的常数系数.

特别地，如果选取 $x_0, x_1, \cdots, x_m$ 是区间 $[a,b]$ 的等分点：$x_k = a + kh\ (k = 0,1,\cdots,m)$，$h = (b-a)/m$，并且，在每一小区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上 (当 $f(x) \geqslant 0$ 时) 用梯形面积 $2^{-1}h[f(x_k)+f(x_{k+1})]$ 近似表示相应区间上的定积分 (见图 1.1)，那么，我们便得到一种简

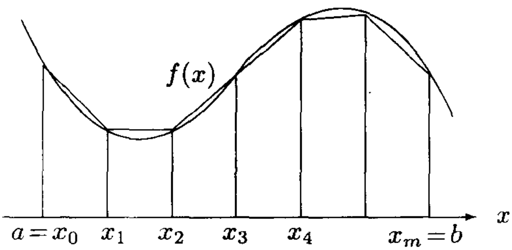

图 1.1

单的数值积分方法 ——**复合梯形法则 (梯形公式)**

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \sum_{k=0}^{m-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{m-1}\frac{1}{2}h[f(x_k)+f(x_{k+1})]\\ &= \frac{1}{2}h[f(x_0)+2f(x_1)+\cdots+2f(x_{m-1})+f(x_m)].\end{aligned} \tag{1.2}$$

并且，可以证明 (见第六章 2.3 节)，假如 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上二阶连续可微，则定积分 (1.1) 与由 (1.2) 式得到的近似结果之差等于

$$-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi), \quad 这里\ \xi \in (a,b), \tag{1.3}$$

因而它的绝对值不超过 $\dfrac{b-a}{12}h^2 \max\limits_{x\in[a,b]}|f''(x)|$. 这个结果说明，只要选取 h 足够小，便能保证 (1.3) 式的数值足够小，从而我们可以得出十分满意的近似答案.

例 1.2 求解非线性方程

$$f(x)=\mathrm{e}^{-x}-x=0. \tag{1.4}$$

这虽是一个简单的超越方程 (因为它含有指数函数 e^{-x}), 但是却无法通过有限步算术运算求其准确解. 为此, 我们可以借助 **迭代** 计算的技巧. 给出初值 x_0 后, 应用下面的计算过程 (或格式):

$$x_{k+1}=\mathrm{e}^{-x_k}, \tag{1.5}$$

令 $k=0,1,2,\cdots$ 求得一串近似解 $\{x_k\}$, 并希望这个数列 $\{x_k\}$ 收敛于方程 (1.4) 的准确解. 具体步骤如下. 先分析一下方程 (1.4) 准确解的大致情况. 由于 $f'(x)=-\mathrm{e}^{-x}-1<0$ 对所有实数 x 成立, 于是连续函数 $f(x)$ 在实轴上严格下降. 又由于 $f(0.4)>0$ 与 $f(0.7)<0$, 故按介值定理 (见附录) 方程 (1.4) 只有唯一的实根, 并且, 此根介于 0.4 与 0.7 之间. 然后取区间 (0.4, 0.7) 中某个数, 譬如 $x_0=0.5$ 作为初始近似解, 由 (1.5) 式 (令 $k=0$) 求得 $x_1=0.606\ 531$(约定取六位小数, 下同), 接着, 由 (1.5) 式 (令 $k=1$) 求得 $x_2=0.545\ 239$, 照此"迭代"下去, 我们可求得 $x_{22}=x_{23}=x_{24}=\cdots=0.567\ 143$. 因此, 有理由认为 $x=0.567\ 143$ 是方程 (1.4) 的一个相当不错的近似解 (有关讨论请见第三章 §1 例 1.8).

例 1.3 求解一阶常微分方程初值问题:

$$\begin{aligned} &y'(x)=2xy(x)-2x^2+1, \quad 0\leqslant x\leqslant 1,\\ &y(0)=1. \end{aligned} \tag{1.6}$$

它的准确解为 $y(x)=\mathrm{e}^{x^2}+x$ (但对一般情形, 我们往往无法求得问题的准确解). 我们用所谓的 **欧拉方法** (见第七章 §2) 求其近似解. 具体地说, 求出 $y(x_0),y(x_1),\cdots,y(x_n)$ 的近似值 $y_0,y_1,\cdots,y_n$, 这里, $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 是区间 $[0,1]$ 上的某些特定的点, 通常可取为等距的. 用差商近似代替微商:

$$y'(x_k)\approx(y_{k+1}-y_k)/(x_{k+1}-x_k), \quad k=0,1,\cdots,n-1,$$

于是，初值问题 (1.6) 就被“离散化”为如下易于求解的近似问题：

$$\frac{y_{k+1}-y_k}{x_{k+1}-x_k}=2x_ky_k-2x_k^2+1,$$
$$y_0=1,$$

或者

$$\begin{aligned}&y_{k+1}=y_k(1+2x_k(x_{k+1}-x_k))+(1-2x_k^2)(x_{k+1}-x_k),\\&y_0=1,\end{aligned}\tag{1.7}$$

这里， $k=0,1,\cdots,n-1$. 由 (1.7) 式取 $k=0$, 可得 y_1, 再取 $k=1$, 应用刚求出的 y_1 可得 y_2, $\cdots\cdots$, 最后取 $k=n-1$, 可得 y_n. 这些 $y_0,y_1,\cdots,y_n$ 便组成准确解 $y(x)$ 的近似解.

举个例子来说，如果 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 为区间 $[0,1]$ 上的五等分点 $(n=5)$: $x_k=0.2k$, $k=0,1,\cdots,5$, 即有 $x_0=0,x_5=1$, 且 $x_{k+1}-x_k=0.2$, $k=0,1,\cdots,4$, 那么， (1.7) 式变为

$$y_{k+1}=y_k\big(1+0.08k\big)+0.2\big(1-0.08k^2\big),\quad k=0,1,\cdots,4,$$
$$y_0=1.$$

容易得出， $y_0=1.000\,000\,00$, $y_1=1.200\,000\,00$, $y_2=1.480\,000\,00$, $y_3=1.852\,800\,00$, $y_4=2.353\,472\,00$, $y_5=3.050\,583\,04$. 而在相应点上准确解 $y(x)$ 的值分别为 $y(0)=1.000\,000\,00$, $y(0.2)=1.240\,810\,77$, $y(0.4)=1.573\,510\,87$, $y(0.6)=2.033\,329\,42$, $y(0.8)=2.696\,480\,88$, $y(1.0)=3.718\,181\,83$ (取小数点后八位).

上述三个例子中提到的数值积分，迭代求解非线性方程与求常微分方程初值问题的近似数值解都属于计算方法的研究内容. 一般地说， **计算方法的主要内容是研究在电子数字计算机上用于求得数学问题的数值近似解的方法与过程**.

即使从这个粗略的观点出发，我们也可以体会到计算方法确实涉及到相当广泛的研究范围. 首先，与科学计算有关的数学问

题是多种多样的，其最基本的类型有：求解线性代数方程组 (见第二章与第四章)，求解非线性方程 (见第三章)，代数特征值问题的计算，插值与逼近 (见第五章)，数值微分，数值积分 (见第六章)，常微分方程的数值解法 (见第七章)，以及偏微分方程的数值解法等．各种类型的问题需要有特定的且往往是一组 (而不是一个) 数值方法．例如，例 1.1 中对数值积分方法只介绍了梯形法则，其实尚有抛物线法则与龙贝格求积算法等等．对各种方法除了讲明它的基本原理与基本公式以外，还要研究具体的算法以及近似解与准确解之间的"近似程度"，即所谓**误差分析问题**．在这里传统数学，如微积分、代数与几何等的许多基本定理起着重要的作用，它们保证计算方法中许多定理在一定假设条件下是完全严格的．例如，例 1.1 中关于复合梯形法则的误差估计，在被积函数 $f(x)$ 二阶连续可微假设之下，如果计算都是精确进行的，那么，我们便严格地得到估计式 (1.3)．

其次，为了在计算机上具体实现各种算法，我们必须将计算方法与计算机软件以及计算实践密切联系在一起．在这点上，计算方法带有一些实验科学的特点，强调实践，强调各种技巧．例如，我们在求解问题之前总要尽力选择有效的算法，希望既节省计算机算题的费用，计算结果又能达到我们预期的精确度．但是，一般来说，在同一类型的各种算法之中，很难简单地断定哪一个是最好的，因为它们无一不受各种前提条件的制约，而这些条件往往难于简单地验明．此外，一个精确度较高的算法往往伴随着程序工作量与计算工作量较大，因而计算费用较多等问题．在这里，经验与直觉等因素经常起着重要的作用．

在本书中，我们除了介绍几类典型数学问题的数值解法的原理、公式推导以及误差估计等较为理论性的内容以外，还尽可能地将同类型的几种算法加以比较，并辅以一些实例来增强读者应用计算方法的实际能力．

最后我们还要强调指出，随着计算机的迅速发展与科学技术对本课程的推进，计算方法的具体内容在近二、三十年以来有了许多变化，这主要表现在许多算法得到改进，新的有效的方法也不断地推出，并且有了多种关于数值算法的软件包可供用户方便使用．面对这种情况，读者应该在本书介绍的最基本的内容基础之上，不断地扩大知识面，并努力增加应用计算方法求解问题的实际训练，以适应变化发展的形势．

习　题

1．试按本节例 1.1 中的复合梯形法则，取 $n=10$，计算定积分

$$\int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x$$

的近似值，并按 (1.3) 式估计近似值的“近似程度”．

2．仿照例 1.2 的迭代方法求解非线性方程

$$\operatorname{tg} x = 2x \quad (0<x<\pi/2).$$

可取 $x_0=\pi/4$，并迭代计算五次．

3．仿照例 1.3 的欧拉方法求解下列一阶常微分方程初值问题的近似解：

$$\begin{aligned} y'(x) &= y(x)-2\sin x,\ 0\leqslant x\leqslant 1,\\ y(0) &= 1. \end{aligned}$$

可取 $n=5$，$h=x_{k+1}-x_k=0.2$，$k=0,1,\cdots,4$．试将计算结果与初值问题的准确解 $y(x)=\sin x+\cos x$ 相比较．

§2 电子计算机中数的浮点表示

2.1 以 β 为基的数系

我们平常一般用十进制数，即以 $\beta=10$ 为基的数系，它共有 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 十个不同的数字. 任何一个实数都可以由这些数字的序列表示. 例如，十进制实数 -563 与 8 861.75 的值分别由下列两式给定：

$$\begin{aligned}-563 &= -(5\times 10^2+6\times 10^1+3\times 10^0),\\ 8\ 861.75 &= 8\times 10^3+8\times 10^2+6\times 10^1+\\ &\quad\ 1\times 10^0+7\times 10^{-1}+5\times 10^{-2}.\end{aligned}$$

一般地，以 β 为基的数系 (简称 β 进制数) 中，共有 β 个不同数字： $0, 1, \cdots, \beta-1$. 由数论知道，只要 $\beta\neq 1$ 是正整数，那么，每一个实数都可以表示为这些 β 个不同数字的有限或无限的序列：

$$\pm d_1 d_2 \cdots d_n . d_{n+1} d_{n+2} \cdots d_{n+m} \cdots \tag{2.1}$$

这里， $0\leqslant d_1, d_2, \cdots, d_{n+m}, \cdots \leqslant \beta-1$. 这个数的值由下列式子给定：

$$\begin{aligned}&\pm(d_1\beta^{n-1}+d_2\beta^{n-2}+\cdots+d_{n-1}\beta^1+d_n\beta^0+\\ &\quad d_{n+1}\beta^{-1}+d_{n+2}\beta^{-2}+\cdots+d_{n+m}\beta^{-m}+\cdots).\end{aligned} \tag{2.2}$$

例如，在二进制 ($\beta=2$) 中，只有 0 与 1 两个不同的数字. 这时，二进制实数 10 101 与 -10.101 的值分别为

$$\begin{aligned}10\ 101 &= 1\times 2^4+0\times 2^3+1\times 2^2+0\times 2^1+1\times 2^0,\\ -10.101 &= -(1\times 2^1+0\times 2^0+1\times 2^{-1}+0\times 2^{-2}+1\times 2^{-3}).\end{aligned}$$

考虑到设计方便与节省费用等原因，计算机常用二进制数与八进制数，并且也用十六进制数，即 β 为 2, 8 或 16 的情形. 今后，当需要强调数系的基 β 时，我们用 $(\cdot)_\beta$ 表示一个 β 进制数，例如， $(101.1)_2$ 与 $(101.1)_{10}$ 分别表示二进制数与十进制数，它们有着不同的数值.

注意，当 $\beta=16$ 时，十六进制数中共有十六个不同数字，我们用 $0,1,\cdots,9,\mathrm{A},\mathrm{B},\mathrm{C},\mathrm{D},\mathrm{E},\mathrm{F}$ 表示它们，其中， $\mathrm{A},\mathrm{B},\mathrm{C},\mathrm{D},\mathrm{E},\mathrm{F}$ 分别表示 $10,11,12,13,14,15$. 这样， $(15\mathrm{F.A04})_{16}$ 可以看为

$$
\begin{aligned}
(15\mathrm{F.A04})_{16}=&1\times16^2+5\times16^1+\mathrm{F}\times16^0+\mathrm{A}\times16^{-1}+\\
&0\times16^{-2}+4\times16^{-3}.
\end{aligned}
$$

一个十进制实数可以表示为二进制数或八进制数等，反之亦然，这是所谓 **数制换算** 问题. 我们这里只用实例简单地说明一下这种换算的方法.

首先考虑 **整数** 情形. 例如，我们要将十进制整数 $k=(276)_{10}$ 换算为十六进制数. 由简单计算看出，$k/16^2>1$, 但是，$k/16^3<1$, 于是，在十六进制中， k 可以表示为

$$
k=a_2\times16^2+a_1\times16^1+a_0\times16^0.
$$

现在来确定系数 a_2,a_1 与 a_0. 容易看出，

$$
k=1\times16^2+20=1\times16^2+1\times16+4.
$$

因此， $a_2=a_1=1,a_0=4$, 亦即

$$
(276)_{10}=(114)_{16}.
$$

这个相反换算过程也是简单的. 例如，我们要将 $(5\mathrm{C}4)_{16}$ 变换为十进制数，可以按下面方法进行：

$$
\begin{aligned}
(5\mathrm{C}4)_{16}&=5\times16^2+\mathrm{C}\times16^1+4\times16^0\\
&=1\,280+192+4=(1\,476)_{10}.
\end{aligned}
$$

我们指出，任何数制中的整数经换算后仍为换算后数制中的整数.（见本节习题题 4)

再考虑**小数**情形. 例如，我们要将 $(0.1)_{10}$ 变换为十六进制与二进制数. 这时，存在数列 $\{a_k\}$(每一个 a_k 是某个十六进制数字)，使得

$$(0.1)_{10} = a_1 \times 16^{-1} + a_2 \times 16^{-2} + a_3 \times 16^{-3} + a_4 \times 16^{-4} + \cdots$$

现在来确定系数 $a_1, a_2, \cdots$. 先用 16 乘上式两端得出，

$$1.6 = a_1 + a_2 \times 16^{-1} + a_3 \times 16^{-2} + a_4 \times 16^{-3} + \cdots$$

于是，比较得 $a_1 = 1$, 并且，

$$1.6 - a_1 = 0.6 = a_2 \times 16^{-1} + a_3 \times 16^{-2} + a_4 \times 16^{-3} + \cdots$$

仿照前面的做法，用 16 乘上式两端得出，

$$9.6 = a_2 + a_3 \times 16^{-1} + a_4 \times 16^{-2} + \cdots$$

于是， $a_2 = 9$, 并且

$$9.6 - 9 = 0.6 = a_3 \times 16^{-1} + a_4 \times 16^{-2} + \cdots$$

继续这个过程，可以算出 $a_3 = a_4 = \cdots = 9$. 因此，

$$(0.1)_{10} = (0.199\ 9\cdots)_{16}. \tag{2.3}$$

将十六进制数换算为二进制数十分简便. 因为 $2^4 = 16$, 所以十六进制是二进制的自然推广. 按此，每四位二进制数确切地对应一个十六进制数，反之亦然. 例如， $0 = (0\ 000)_2$, $8 = (1\ 000)_2$, $9 = (1\ 001)_2$, $A = (1\ 010)_2$, $E = (1\ 110)_2$ 等. 于是，

$$(0.A8)_{16} = (0.101\ 010\ 00)_2,$$

$$(0.101\ 011)_2 = (0.101\ 011\ 00)_2 = (0.AC)_{16},$$

$$(CD3.5B6)_{16} = (110\ 011\ 010\ 011.010\ 110\ 110\ 110)_2.$$

同理，由 (2.3) 式，我们得到

$$(0.1)_{10}=(0.000\ 110\ 011\ 001\ 100\ 1\cdots)_2.$$

反之，假如我们要将十六进制小数变换为十进制数，可以采用直接运算办法. 例如，

$$\begin{aligned}(0.2\mathrm{A}7)_{16}&=2\times16^{-1}+\mathrm{A}\times16^{-2}+7\times16^{-3}\\&=(2\times16^2+10\times16+7)\times16^{-3}\\&=679/4096=(0.165\ 771\ 484\cdots)_{10}.\end{aligned}$$

这些例子告诉我们，某个数制中的有限小数 (如 $(0.1)_{10}$)，在另一个数制中可能为无限小数 (如 $(0.199\ 9\cdots)_{16}$)，反之亦然. 当然，同一个数在两种数制中可能同时为有限小数或无限小数. 例如，$(0.062\ 5)_{10}=(0.1)_{16}$.

2.2 计算机中数的浮点表示

在科学计算中，人们常把数值很大或很小的非零十进制数写成某个介于 0.1 与 1 之间的小数乘上以 10 为底的幂的形式，例如，

$$-12\ 347\ 800=-0.123\ 478\times10^8,$$
$$0.000\ 019\ 86=0.198\ 6\times10^{-4}.$$

这种表达方式使得一个数的量级一目了然. 受这种做法的启发，我们可以将每一个非零十进制实数 x 表示为

$$x=\pm0.a_1a_2a_3\cdots\times10^c, \tag{2.4}$$

这里，$0\leqslant a_1, a_2, a_3, \cdots\leqslant9$; c 是整数.

在表达式 (2.4) 中，x 的小数点位置实际上取决于后边那个幂指数 c. 例如，$0.198\ 6\times10^{-3}=0.000\ 198\ 6$, $0.198\ 6\times10^1=1.986$. 也就是说，当指数 c 变化时，小数点的位置随之浮动，故称这种表