

高等学校教学用书

计算方法 导引

陈公宁
沈嘉骥
编

北京师范大学出版社

高等学校教学用书

计算方法导引

陈公宁 沈嘉骥 编

北京师范大学出版社

内 容 简 介

本书是作者根据大学本科计算方法教学大纲, 中学教师进修高等师范数学专业本科计算方法教学大纲, 以及总结教学经验基础上编写的。本书包括数值代数、非线性方程解法、插值法、数值逼近、数值积分、常微分方程数值解等计算方法的主要的基本内容。

本书所讲的内容, 理论上较为完整, 也注意到实际应用, 许多例题是计算机上计算的结果, 还给出了具体的算法, 算法是用接近高级算法语言的语言描述的, 有助于编写计算机程序。

本书可供大学本科生(或专科)、函授(数学专业)、在职中学教师进修等使用。

高等学校教学用书 计 算 方 法 导 引

陈公宁 沈嘉骥 编

*

北京师范大学出版社出版
新华书店北京发行所发行
重庆新华印刷厂印刷

开本: 850×1168 1/32 印张: 11.25 字数: 274千

1988年12月第1版

1988年12月第1次印刷

印数: 1—5 000

ISBN7-303-00277-4/O·62

定价: 2.70元

出版说明

北京师范大学是一所具有八十多年历史的老学校，在学科建设和教学实践中积累了一定的经验，将它贯彻到教材中去无疑是有益的。为了加强教材建设，加强与兄弟院校的交流，我社约请北京师范大学数学和数学教育研究所所长严士健教授等组成教材编委会，编写研究出版一套教材。编委会在研究当前教学改革的新情况和过去的教学经验的基础上，同时参照原教育部1984年颁发的中学教师进修大纲，对教材的编写宗旨和要求进行认真地讨论。组织数学系有教学经验的教师进行编写，并且由编委等分工负责对书稿进行审订。

这套教材包括数学分析、解析几何、高等代数、概率论与数理统计、常微分方程、复变函数论、抽象代数基础、高等几何、微分几何、实变函数论与泛函分析、计算方法、理论力学以及高等数学(物理、天文、无线电等专业用)。

这套教材文字通俗易懂、内容由浅入深、循序渐进，便于自学，科学系统性较强。每章有小结，每节(或几节)后配有习题。每章有总复习题，习题安排由易而难，层次清楚。书后附有习题答案或提示，以利于读者自学时检查自己的作业。

为了适应不同层次学校和人员的需要，书中有些内容加了“*”号，它相对独立，如因学时较少，可以删去。

这套教材可供高等师范院校本科生(或专科)、教育学院数学系、函授(数学专业)、在职中学教师进修等使用。

前 言

随着电子计算机的广泛应用, 计算数学近三十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、教学与科学研究诸部门得以广泛应用。本教材是根据大学本科计算方法教学大纲, 中学教师进修高等师范数学专业本科的计算方法教学大纲, 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与现状, 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。自学者则约需花费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, 以便体会有关的数值方法的实际应用价值并初步掌握

算题的技巧。

本教材在编写过程中，袁兆鼎教授与刘贵贤副教授提出许多宝贵的意见与建议，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	1
§1 计算方法的主要内容	1
习题	5
§2 电子计算机中数的浮点表示	5
习题	11
§3 误差的基本概念	11
习题	20
§4 算法稳定性问题	21
习题	29
第二章 求解线性代数方程组的直接方法	31
§1 高斯(Gauss)顺序消去法与矩阵分解	32
习题	46
§2 紧凑格式和平方根法	47
习题	56
§3 主元消去法	57
习题	68
§4 三对角方程组	69
习题	72
§5 行列式与逆矩阵的计算	73
习题	78
§6 向量范数与矩阵范数	79
习题	88
§7 基本误差估计与条件数	90
习题	95

第三章 非线性方程的数值解法	97
§1 逐次代换法的一般原理	98
习题	110
§2 牛顿(Newton)方法	112
习题	124
§3 弦位法	125
习题	133
§4 对分法	135
习题	140
第四章 求解线性代数方程组的迭代方法	141
§1 简单迭代法	143
习题	152
§2 赛德尔迭代法与一般迭代法	153
习题	162
§3 一般迭代法的收敛条件	163
习题	174
第五章 插值与逼近	176
§1 多项式插值	176
习题	194
§2 埃尔米特(Hermite)插值与分段插值	196
习题	208
§3 三次样条插值	210
习题	220
§4 切比谢夫(Чебышев)多项式及其性质	221
习题	230
§5 均方逼近	231
习题	239
§6 曲线拟合	239
习题	249
第六章 数值积分	251

§1 引言	251
习题	258
§2 梯形公式、抛物线公式及其复合求积公式	259
习题	271
§3 龙贝格(Romberg)求积法	273
习题	282
第七章 常微分方程的数值解法	283
§1 引言	283
习题	291
§2 欧拉(Euler)方法	292
习题	305
§3 龙格—库塔(Runge—Kutta)方法	307
习题	317
§4 线性多步法	319
习题	320
§5 数值稳定性问题	331
习题	340
附录	343
参考文献	346
索引	347

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结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答，需要求助于近似方法得到问题的近似的数值解答。让我们考虑下面两个实例。

例1.1 求解定积分

$$\int_a^b f(x) dx. \quad (1.1)$$

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

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{k=0}^m \alpha_k f(x_k),$$

这里， $x_0, x_1, \dots, x_m$ 是区间 $[a, b]$ 上的某些点； $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_m$ 是与 $f(x)$ 无关的常数系数。

特别地，如果选取 $x_0, x_1, \dots, x_m$ 是区间 $[a, b]$ 的等分点： $x_k = a + kh$ ($k = 0, 1, \dots, m$)， $h = \frac{b-a}{m}$ ，并且，在每一小区间

$[x_k, x_{k+1}]$ 上用梯形面积 $\frac{1}{2}h[f(x_k) + f(x_{k+1})]$ 近似表示相应区间上的定积分(见图1.1), 那么, 我们便得到一种简单的数值积

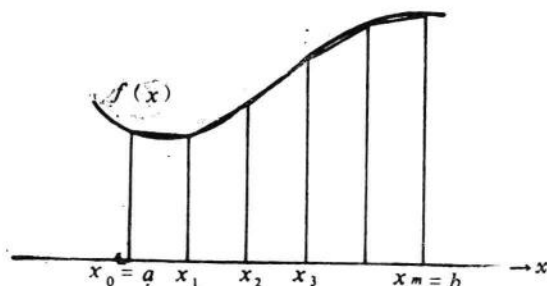


图1.1

分方法——复合梯形法则(梯形公式)

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

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

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

因而它的绝对值不超过 $\frac{b-a}{12} h^2 \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|$. 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

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

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,应用下面计算过程(或格式):

$$x_{k+1} = e^{-x_k}, \quad (1.5)$$

令 $k = 0, 1, 2, \dots$ 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 $f'(x) = -e^{-x} - 1 < 0$ 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 $x_1 = 0.606531$ (约定取六位小数,下同),接着,由(1.5)式(令 $k = 1$)求得 $x_2 = 0.545239$,照此“迭代”下去,我们可求得 $x_{22} = x_{23} = x_{24} = \dots = 0.567143$ 。因此,有理由认为 $x = 0.567143$ 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§2例2.7)。

上述两个例子中提到的数值积分与迭代求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),矩阵的特征问题的计算,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本身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，一般说来，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推出。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

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx$$

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.

§2 电子计算机中数的浮点表示

本节主要介绍计算机的数系.

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来表示. 例如, 十进制实数-563与8861.75的值分别由下列两式给定:

$$-563 = -(5 \times 10^2 + 6 \times 10^1 + 3 \times 10^0)$$

$$8861.75 = 8 \times 10^3 + 8 \times 10^2 + 6 \times 10^1 + 1 \times 10^0 + 7 \times 10^{-1} + 5 \times 10^{-2}.$$

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, $\dots$, $\beta-1$. 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:

$$\pm d_1 d_2 \dots d_n . d_{n+1} d_{n+2} \dots d_{n+m} \dots \quad (2.1)$$

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

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

例如，在二进制($\beta=2$)中，只有0与1两个不同数字。这时，二进制实数10101与 -10.101 的值分别为

$$\begin{aligned} 10101 &= 1 \times 2^4 + 0 \times 2^3 + 1 \times 2^2 + 0 \times 2^1 + 1 \times 2^0, \\ -10.101 &= -(1 \times 2^1 + 0 \times 2^0 + 1 \times 2^{-1} + 0 \times 2^{-2} + 1 \times 2^{-3}). \end{aligned}$$

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，近年来也用十六进制数，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 $()_\beta$ 表示一个 β 进制数，例如， $(101.1)_2$ 与 $(101.1)_{10}$ 分别代表二进制与十进制数，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, ..., 9, A, B, C, D, E, F表示它们，其中，A, B, C, D, E, F分别表示10, 11, 12, 13, 14, 15。这样， $(15F.A04)_{16}$ 可以看作

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

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

$$k = \alpha_2 \times 16^2 + \alpha_1 \times 16^1 + \alpha_0 \times 16^0.$$

现在来确定系数 α_2 , α_1 与 α_0 ，容易看出，

$$k = 1 \times 16^2 + 20 = 1 \times 16^2 + 1 \times 16 + 4.$$

因此， $\alpha_2 = \alpha_1 = 1$, $\alpha_0 = 4$ ，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 $(5C4)_{16}$ 变换为十进制数，可以按下面方法进行：

$$\begin{aligned}(5C4)_{16} &= 5 \times 16^2 + C \times 16^1 + 4 \times 16^0 \cdot \\ &= 1280 + 192 + 4 = (1476)_{10}.\end{aligned}$$

我们指出，任何数制中的整数经换算后仍为换算后的数制中的整数。（见习题5.）

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

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

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

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

于是，比较得 $a_1 = 1$ ，并且，

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

仿照前面做法，用16乘上式两端得出，

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

于是， $a_2 = 9$ ，并且

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

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

$$(0.1)_{10} = (0.1999\dots)_{16}. \quad (2.3)$$

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， $0 = (0000)_2$ ， $8 = (1000)_2$ ， $9 = (1001)_2$ ， $A = (1010)_2$ ， $E = (1110)_2$ 等等。于是 $(0.A8)_{16} = (0.10101000)_2$ ， $(0.101011)_2 = (0.10101100)_2 = (0.AC)_{16}$ ， $(CD3.5B6)_{16} = (110011010011.010110110110)_2$ 。同理，由(2.3)式，我们得到

$$(0.1)_{10} = (0.0001100110011001\dots)_2.$$

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，

$$\begin{aligned}(0.2A7)_{16} &= 2 \times 16^{-1} + A \times 16^{-2} + 7 \times 16^{-3} \\ &= (2 \times 16^2 + 10 \times 16 + 7) \times 16^{-3} \\ &= 679/4096 = (0.165771484\cdots)_{10}.\end{aligned}$$

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 $(0.1999\cdots)_{10}$)，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， $(0.0625)_{10} = (0.1)_{16}$ 。

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，

$$\begin{aligned}-12347800 &= -0.123478 \times 10^8, \\ 0.00001986 &= 0.1986 \times 10^{-4}.\end{aligned}$$

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

$$x = \pm 0.a_1a_2a_3\cdots \times 10^c, \quad (2.4)$$

这里， $0 \leq a_1, a_2, a_3, \cdots \leq 9$ ； 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， $0.1986 \times 10^{-3} = 0.0001986$ ， $0.1986 \times 10^1 = 1.986$ ，也就是说，当指数 c 变化时，小数点的位置随之浮动，故称这种表示为数的十进制浮点表示。并且，在(2.4)中 $a = \pm 0.a_1a_2a_3\cdots$ 称为浮点表示的小数部分或尾数，后边的 10^c 称为定位部分，指数 c 称为阶码。

除了 $x=0$ 的情形，如果限定(2.4)中 $a_1 \neq 0$ ，即小数部分满足 $1 > |a| \geq 0.1$ ，那么我们便得到数的十进制规格化浮点表示。这时，数零的浮点表示规定为 $0 = 0. \times 10^0$ 。