計算方法講义

中国科学院計算技术研究所編

科学出版社

計算方法講义

中国科学院
計算技术研究所編

*

科学出版社出版（北京朝陽門大街117号）
北京市書刊出版業营業許可証出字第 061 号
北京西四印刷厂印刷　　新华書店总經售

*

1958 年 10 月第一版　　書号：1456　字数：239,000
1958 年 10 月第一次印刷　　开本：850×1168 1/32
（京）0001—515　　印張：8 7/8

定价：(10) 1.30 元

序　言

这本講义不是經过講授修改的定稿，而是发动羣众，以集体力量在短短二十天內鼓足干勁突击編成，以备卽將在国庆节开学的計算技术研究所計算数学訓練班使用的。因为很多單位常向我們要材料，所以就把它出版以供各方面参考。

本書的对象是計算数学工作者，特别是卽將在电子計算机上进行工作的計算工作者，也可以供高等学校計算数学專業以及一般科技工作者参考。內容着重于电子計算机上实用的主要計算方法，而不拘泥于計算数学的旧傳統；强調与电子計算机实踐有关的方法、概念和問題；抓基本的、首要的，而不去追求理論的謹严、完整和內容方面的包罗万象。尽量避免繁瑣的推导論証。我們力求这样作，但由于我們自己实踐經驗不足，理論水平低，而且还有旧思想有形无形的束縛，是否眞的这样作到了还是有問題的。本書中的例題大部分还是取自一般旧教材，特别是外国的教材。我們自己看来有許多是并不适宜的，但我們一时提不出适当的教材来代替，希望讀者注意到这点。使用本書时必須結合計算实踐，解决从生产实踐中提出的具体計算問題。

希望各方面同志对本書提出批評意見，以便將来改正。

編　者

1958年9月13日

目　录

第一章 誤 差

§1. 引言

在我們的日常生活中所接触到的量都是不准确的，或者說都是近似的。例如物体的質量、長度、温度等等。我們不可以想象有絕对准确的度量，但是可以知道度量的准确程度。例如一只米尺可以准确到一毫米；一只天秤可以准确到一毫克等等。

此外在数值計算中，参与計算的数据本身可能就不准确，或者准确的数据不能用計算机完全准确地表示出来。例如$\frac{1}{3}=0.333\cdots$是循环小数，計算机只有有限个数位，所以在計算机上表示$\frac{1}{3}$一定有誤差。由此可見，即使計算公式完全准确，而得到的結果，一般来說，都是有誤差的，更不要說計算公式一般都是近似公式了。

但是，对于实际問題，可以采用明知是不准确的公式或方法来計算，只要有把握使得計算結果中的誤差，不超过我們所容許的界限。

近似計算方法中所研究的問題，就是如何寻求近似公式和如何用近似值作計算，而要求以最簡單的步驟，最少的时間，获得具有足够的准确度的数值結果。

§2. 誤差的来源

使数值計算結果产生誤差的原因不外以下五种：

1. 过失誤差

由于書写时的笔誤，或者运算的錯誤而造成的誤差。这种誤差，我們不加以研究。

2. 数学描述和实际現象間的誤差

各种計算方案，实际上只是研究对象的一种数学描述的某种近似計算方案，而这种描述本身也只是实际現象的理想化了的模型，也还是近似的，也会有誤差。

3. 观測誤差

在計算公式中，必然包含一些参量。如長度、質量、时間等等，而这些都是由观测和实驗得到的。它們和实际的大小之間有誤差，这种誤差称“观測誤差”。

4. 截断誤差

在計算問題中常常遇到超越运算，它們是要求用极限或无穷的过程来求得的；但是实际上，人們只能进行有穷的算术运算，只能用有穷的步驟来求其近似値。例如，問題的数学描述为微分方程，我們用有限差分格式来进行近似計算，又如求三角函数和对数函数时，这些問題是可以用无穷級数求得的，但是实际上，我們只能用求有限和等有限的計算来求其近似値。这样产生的誤差，卽截断誤差。

例如：設函数 $f(x)$ 在区間$[a, x]$上連續，且有 $n+1$ 阶連續导数，則按泰勒級数展开得

$$f(x)=f(a)+\frac{f'(a)}{1!}(x-a)+\frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-a)^{n+1},$$

$$a\leqslant\xi\leqslant x.$$

如果当$(x-a)$充分小时，我們用前 $n+1$ 項作近似公式，則截断誤差为

$$E_T=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-a)^{n+1}.$$

对于 $f(x)=e^x$，我們有

$$e^x=1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}+E_T(x),$$

$$E_T(x)=\frac{1}{24}e^{\xi}x^4,\qquad 0\leqslant\xi\leqslant x.$$

特别

$$e^{\frac{1}{3}}\approx1+\frac{1}{3}+\frac{1}{18}+\frac{1}{162}=\frac{226}{162},$$

$$\frac{1}{24}e^{\xi}\left(\frac{1}{3}\right)^4<\frac{1.5}{2.4}\left(\frac{1}{3}\right)^4\doteq0.00077,$$

$$0\leqslant\xi\leqslant\frac{1}{3}.$$

故截断誤差小于 7.7×10^{-4}。

在近似計算过程中，我們所注意的，主要是舍入誤差和截断誤差。至于数学描述与实际現象間的誤差和观測誤差及其糾正，往往不是計算工作者所能独立解决的。但了解这些問題对于具体計算工作是有帮助的。

在进行数值計算时，由于近似公式本身的截断誤差和运算舍入，使計算过程中每一步都可能产生新的誤差，这个誤差与上一步傳播来的誤差联合起来，又傳播到下一步去。

由此可見，在計算工作中，为了保証計算結果达到預定范圍內的准确度，在原則上，应該先根据近似方案的截差估計和舍入誤差的可能发展来决定适当的近似計算方案和参与运算的数字的位数，然后进行計算。例如：用下列公式計算 $\frac{\pi}{4}$ 的值，要求准确到 10^{-6}。問近似公式中应取多少項，参与計算的数应准到多少位？

$$\begin{aligned}\frac{\pi}{4}&=4\,\mathrm{tg}^{-1}\frac{1}{5}-\mathrm{tg}^{-1}\frac{1}{239}\\&=4\left[\frac{1}{5}-\frac{1}{3}\,\frac{1}{5^3}+\frac{1}{5}\,\frac{1}{5^5}-\frac{1}{7}\,\frac{1}{5^7}+\cdots\right]-\left[\frac{1}{239}+\cdots\right].\end{aligned}$$

兩个方括号的級数都是交錯級数，根据交錯級数的余項估計。設

$$\begin{aligned}S&=u_1-u_2+\cdots,\\S_n&=u_1-u_2+\cdots\pm u_n;\end{aligned}$$

則

$$|S-S_n|\leqslant|u_{n+1}|.$$

可知，这兩个級数取到写出的項为止，截断誤差不大于

$$\frac{4}{9\times5^9}+\frac{1}{3\times(239)^3}<0.5\times10^{-6}.$$

为了計算 $\frac{\pi}{4}$，准确到五位小数，我們假設每一項要准确到 n 位小数，这时，确定的 $\frac{\pi}{4}$，誤差不大于

$$4\times4\times0.5\times10^{-n}+0.5\times10^{-n}+0.5\times10^{-6}<5\times10^{-6}.$$

可以看出 $n=7$ 时，我們有

$$4\times4\times0.5\times10^{-7}+0.5\times10^{-7}+0.5\times10^{-6}<2\times10^{-6}.$$

这时所确定的$\frac{\pi}{4}$的誤差就不大于 2×10^{-6}，所确定的 π 的誤差就不大于 8×10^{-6}，計算的結果应为 $\pi=3.1415916$（π 的眞值为 $3.14159265\cdots$）。

但是对于較复杂的問題，截断誤差，特别是累积的截断誤差的理論估計往往是很难的，或即使可以作出某种值，也是往往偏高。至于舍入誤差的积累，由于它有随机的性質，更难估計，因此在实踐上，多采用事后的实驗估值，即重复演算，逐次精密化（例如逐次增多項数，或縮短步長等）。直到在所要求的数位范圍内达到稳定的值为止（詳見以后各章）。

5. 舍入誤差

对于参与計算的数中无穷小数用有穷小数代替，或以位数較少的有穷小数代替位数較多的有穷小数时，所产生的誤差，叫“舍入誤差”。四舍五入所产生的誤差，就是舍入誤差。

在进行計算时，应該注意安排好計算的次序，否則，舍入誤差就会严重影响結果的准确度。常常我們对同一公式，用同样多的位数，而采用不同的計算次序，得出的結果却大不相同。

例如：計算

$$D=\frac{0.0005\times0.0143\times0.0012}{0.0003\times0.0125\times0.0135}$$

第一种算法：分子，分母分别計算，各取九位小数，然后相除。

$$\begin{aligned}A&=0.0005\times0.0143\times0.0012\\&=0.00000715\times0.0012\\&=0.000000009\ (\text{有舍入}),\\B&=0.0003\times0.0125\times0.0135\\&=0.00000375\times0.0135\\&=0.000000051\ (\text{有舍入}).\end{aligned}$$

$D=\frac{A}{B}=0.17647$，只准到小数后一位（眞值为 $0.16948148\cdots$）。

第二种算法：分成三个因子，每个只取六位小数(若取九位小数，則結果准确度更高)。

$$a=\frac{0.0005}{0.0003}=1.666667\ (\text{有舍入}).$$

$$b=\frac{0.0143}{0.0125}=1.144000.$$

$$c=\frac{0.0012}{0.0135}=0.088889\ (\text{有舍入}).$$

$$\begin{aligned}D=a\times b\times c&=0.088889\times1.144\times1.666667\\&=0.101689\times1.666667\\&=0.16948,\end{aligned}$$

准确到小数后五位。

§3 絕对誤差和相对誤差

設 x 是某量的眞値，x^* 是它的近似値，我們称

$$E_a=|x-x^*|$$

为 x^* 的絕对誤差。

因为一般的我們并不知道某量的眞値，所以絕对誤差不能准确地算出来，而只能估計其范圍，确定出絕对誤差不超过某个数値。这个数値，我們便称为“最大絕对誤差”。例如，一个經緯仪所測量的角度，准确度不超过 5″，則被測量到的角度的最大絕对誤差为 5″。

通常我們說的絕对誤差，就是最大絕对誤差。

最大絕对誤差不能充分表达度量的准确程度。例如，長度各为 100m 和 1m 的鋼梁，若有相同的最大絕对誤差，显然前者比后者有更高的精确度，因此，为了表达数量的准确度，就要引入所謂“相对誤差”。

我們称

$$E_r=\frac{|x-x^*|}{|x^*|}$$

为 x^* 的相对誤差。

关于絕对誤差的一切困难，現在又遇到了，因此在实用上，不

用相对誤差，而用最大相对誤差。它是保証下面不等式成立的最小的量 δ：

$$\frac{|x-x^*|}{|x^*|}=E_r\leqslant\delta,$$

但是，为了方便起見，以后我們把最大絕对誤差和最大相对誤差，簡称为絕对誤差和相对誤差，而且也分別以符号 E_a, E_r 表示之。

显然，相对誤差是无名数。例如，在量 100 公里長的公路，絕对誤差是 1 公里，則相对誤差为 $\frac{1}{100}=0.01$。

在实际工作中，我們常常用到"有效数字"的概念。

任一近似数 x^*，可表示成

$$x^*=\pm(x_1\alpha^m+x_2\alpha^{m-1}+\cdots+x_n\alpha^{m-n+1}), \tag{1}$$

其中 $x_1,x_2,\cdots x_n$ 都是 $0,1,\cdots,\alpha-1$ 中的一数；m,n,α 都是整数。特別，对于十进位的数，有 $\alpha=10$。

$$x^*=\pm(x_1 10^m+x_2 10^{m-1}+\cdots+x_n 10^{m-n+1}).$$

在 α 进位制中

$$E_a=|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\alpha^{m-n+1}.$$

若 $x_1\neq0$ 就說 x^* 有 n 位有效数字，其中 $x_1,x_2,x_3,\cdots,x_n$ 都是"有效数字"。

例如，0.00203 的有效数字为 2,0,3。3.14 的有效数字为 3,1,4。近似数 0.00260 的 2,6 当然是有效数字，最后一位的 0 是否为有效数字，就决定于它的絕对誤差是否不大于 $\frac{1}{2}\cdot10^{-5}$。若是，則最后一位的 0 卽为有效数字，否則，就不是有效数字。

我們在書写任一个数字时，应該保証由左起第一个不为零的数一直到最后一个数为止，都是有效数字。例如，对于近似数 0.0023 不应任意写成 0.002300 等。因为我們識为 0.002300 的絕对誤差不大于 $\frac{1}{2}\cdot10^{-6}$。

由(1)式，知

$$x_1\alpha^m\leqslant|x^*|\leqslant(x_1+1)\alpha^m.$$

故用 x^* 近似表示 x 时，若有 n 位有效数字其相对誤差为

$$E_r=\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{\frac{1}{2}\alpha^{m-n+1}}{x_1\alpha^m}=\frac{1}{2x_1}\frac{1}{\alpha^{n-1}}. \tag{2}$$

反之，我們不能从不等式(2)推出 x^* 具有 n 位有效数字。

例如，$A=\sin(29°20')=0.4900$ 有近似值 $a=0.484$，

$$\delta=\frac{0.006}{0.484}=0.01239<0.0125=\frac{1}{2\times4\times10}.$$

但不能从此推出 a 有两位有效数字，因为

$$A-a=0.4900-0.484=0.0060\cdots,$$

所以知道它并不以二位有效数字表示 A。

§4. 四則运算的誤差

1. 加法

設数 x_i 的近似値为 x_i^* $(i=1,2,\cdots,n)$，$x_i^*\geqslant0$.

求

$$\sum_{i=1}^{n}x_i^*$$

的相对誤差。

因为

$$E_r=\frac{\left|\sum_{i=1}^{n}x_i-\sum_{i=1}^{n}x_i^*\right|}{\left|\sum_{i=1}^{n}x_i^*\right|}$$

$$=\left|\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i^*}{\sum_{j=1}^{n}x_j^*}\frac{x_i-x_i^*}{x_i^*}\right|,$$

所以

$$\min_n\left|\frac{x_i-x_i^*}{x_i^*}\right|\leqslant E_r\leqslant\max_n\left|\frac{x_i-x_i^*}{x_i^*}\right|,$$

即諸数和的相对誤差介于諸数的相对誤差中最大者与最小者之間。

2. 减法

設 x 与 y 的近似值为 x^*, y^*。令

$$x=x^*+\varepsilon_1, \qquad y=y^*+\varepsilon_2.$$

因为

$$\frac{(x-y)-(x^*-y^*)}{x^*-y^*}=\frac{\varepsilon_1-\varepsilon_2}{x^*-y^*}=\frac{\varepsilon_1}{x^*}\cdot\frac{x^*}{x^*-y^*}-\frac{\varepsilon_2}{y^*}\cdot\frac{y^*}{x^*-y^*},$$

所以当 $x\gg y$ 时，相对誤差

$$\left|\frac{(x-y)-(x^*-y^*)}{x^*-y^*}\right|\approx\left|\frac{\varepsilon_1}{x^*}\right|,$$

即被减数和减数相差很大时，其中的大数的相对誤差起决定性的作用。

例如，求 $2542.23-20.1143=?$

$$\begin{array}{r} 2542.23 \\ -\quad 20.11(43) \\ \hline 2522.12 \end{array}$$

减数只用四位有效数字就不会影响結果的准确度。在所得的数中，六个数位都是有效的。

我們必須注意，两个彼此接近的数相减时，相对誤差可能是很大的，亦即，有效数字可能大大减少。

例如，$13.5846-13.5839=0.0007$。因为 13.5846 和 13.5839 每一个数的相对誤差不大于 0.5×10^{-4}，所以它們的差的相对誤差可能不小于 0.5×10^{-4}，也就是說，在这个小的差数中可能連一个有效数字都沒有。因此，在計算中应儘量設法避免两个相差很小的数相减。比方說，若我們沒有足够的位数的表，而要計算 $1-\cos\theta$，当 θ 很小时，可以用 $2\sin^2\frac{1}{2}\theta$ 代替，有时也可以用下面公式計算

$$1-\cos x=1-\left(1-\frac{x^2}{2}+\frac{x^4}{4!}-\cdots\right)=\frac{x^2}{2}-\frac{x^4}{24}+\cdots.$$

3. 乘法

設 $x=x^*+\varepsilon_1,\ y=y^*+\varepsilon_2$

$$xy-x^*y^*=\varepsilon_1 y^*+\varepsilon_2 x^*+\varepsilon_1\cdot\varepsilon_2$$

若 $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ 很小，$\varepsilon_1\cdot\varepsilon_2$ 忽略不計，則得

$$\frac{xy-x^*y^*}{x^*y^*}=\frac{\varepsilon_1}{x^*}+\frac{\varepsilon_2}{y^*},$$

卽乘积的相对誤差約等于相乘諸因子的相对誤差之和。

4. 除法

設 $|x-x^*|=E_1$，$|y-y^*|=E_2$.

則 $\qquad x=x^*\pm E_1,\qquad y=y^*\pm E_2.$

$$\frac{x}{y}-\frac{x^*}{y^*}=\frac{x^*\pm E_1}{y^*\pm E_2}-\frac{x^*}{y^*}=\frac{\pm y^*E_1\pm x^*E_2}{y^*(y^*\pm E_2)}.$$

因为 $\qquad |\pm y^*E_1\pm x^*E_2|\leqslant y^*E_1+x^*E_2\qquad$（不妨設 $x, y\geqslant 0$）

和 $\qquad |y^*(y^*\pm E_2)|=y^*(y^*\pm E_2)\geqslant y^*(y^*-E_2),$

所以

$$\left|\frac{x}{y}-\frac{x^*}{y^*}\right|\leqslant\frac{y^*E_1+x^*E_2}{y^*(y^*-E_2)},$$

$$\left|\frac{\frac{x}{y}-\frac{x^*}{y^*}}{\frac{x^*}{y^*}}\right|\leqslant\frac{y^{*2}\frac{E_1}{x^*}+y^*E_2}{y^*(y^*-E_2)}=\frac{1}{1-\frac{E_2}{y^*}}\left(\frac{E_1}{x^*}+\frac{E_2}{y^*}\right).$$

与 1 比較，不計 $\frac{E_2}{y^*}$ 就有

$$\left|\frac{\frac{x}{y}-\frac{x^*}{y^*}}{\frac{x^*}{y^*}}\right|\leqslant\left|\frac{E_1}{x^*}\right|+\left|\frac{E_2}{y^*}\right|.$$

卽商的相对誤差約等于相除二数的相对誤差之和（在除数的相对誤差很小时）。

参 考 文 献

[1] Hildebrand F. B., Introduction to numerical analysis.

[2] Scarborough J. B., Numerical mathematical analysis（数值分析，科学出版社將出版）。

[3] Безикович Я. С. Приближенные вычисления（近似計算法，高教出版社已出版）。

[4] Крылов А. Н., Лекции о приближенных вычислениях.

第二章　插值法和數值微分

§1. 插值的目的

設 $y=f(x)$ 为实变量 x 的單值函数，已知它在有限区間 $[a,b]$ 上連續，在不同的点 $a\leqslant x_0,x_1,\cdots,x_n\leqslant b$ 上分别取值 $y_0,y_1,\cdots,y_n$。

插值的目的就是求一簡單的連續函数 $\varphi(x)$，使它在給定的 $n+1$ 个点 $a\leqslant x_0,x_1,\cdots,x_n\leqslant b$ 上，取給定的值 $\varphi(x_i)=y_i$。而在其它的点上，近似的表示 $f(x)$。

給定的点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 叫插值点或节点。函数 $\varphi(x)$ 叫做函数 $f(x)$ 对于点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 的插值函数。兩端的节点所界定的区間，叫插值区間。

插值問題就是：对于在分散的諸点 x_i 上給定对应的 y_i，求 x 和 y 間的近似函数关系。如果对于插值区間的任一个 x，都有

$$|f(x)-\varphi(x)|<\varepsilon,$$

其中 ε 是可允許的絕对誤差，則所求出的函數关系就应該認为是合于要求的。

以 $R(x)$ 表示 $f(x)$ 与其插值函数 $\varphi(x)$ 之間的差

$$f(x)-\varphi(x)=R(x).$$

此差叫作插值的"余項"，它表示函数 $\varphi(x)$ 逼近 $f(x)$ 的程度。

一般，我們多采用多項式作插值函数，在特殊情形下。例如，用三角插值，逼近以 2π 为周期的周期函数比較方便。

§2. 拉格朗日(Lagrange)公式

用 n 次多項式

$$c_0x^n+c_1x^{n-1}+\cdots+c_{n-1}x+c_n=\varphi(x) \qquad (1)$$

作为函数 $f(x)$ 的插值函数，使在 $n+1$ 个不同的节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 上，有

$$\varphi(x_i)=y_m=f(x_i) \quad (i=0,1,\cdots,n), \qquad (2)$$

即

$$c_0x_i^n+c_1x_i^{n-1}+\cdots+c_{n-1}x_i+c_n=y_i \quad (i=0,1,\cdots,n). \tag{3}$$

这方程組的系数行列式，即范德孟德(Vandermonde)行列式

$$\begin{vmatrix} x_0^n & x_0^{n-1}\cdots x_0 & 1 \\ x_1^n & x_1^{n-1}\cdots x_1 & 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ x_n^n & x_n^{n-1}\cdots x_n & 1 \end{vmatrix} = \prod_{k<j}^{0\cdots n}(x_k-x_j).$$

因为 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 互異，故上式不等于零，所以系数 $c_0,c_1,\cdots,c_n$ 由(3)式唯一确定。为了求函数 $\varphi(x)$，我們把方程組(1)，(3)写成

$$c_0x^n+c_1x^{n-1}+\cdots+c_{n-1}x+c_n-\varphi(x)=0,$$
$$c_0x_i^n+c_1x_i^{n-1}+\cdots+c_{n-1}x_i+c_n-f(x_i)=0$$
$$(i=0,1,2,\cdots,n).$$

把它看作未知数为 $c_0,c_1,\cdots,c_n$，1 的联立方程組，故这組方程因为有一組不全为零的解，所以其系数行列式必为零。

$$\begin{vmatrix} x^n & x^{n-1}\cdots x & 1 & \varphi(x) \\ x_0^n & x_0^{n-1}\cdots x_0 & 1 & f(x_0) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_n^n & x_n^{n-1}\cdots x_n & 1 & f(x_n) \end{vmatrix}=0.$$

展开即得

$$\begin{aligned}\varphi(x)\equiv L_n(x)=&\frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\cdots(x_0-x_n)}y_0\\&+\frac{(x-x_0)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\cdots(x_1-x_n)}y_1\\&+\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)\cdots(x-x_n)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)\cdots(x_2-x_n)}y_2\\&+\cdots\\&+\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\cdots(x_n-x_{n-1})}y_n.\end{aligned} \tag{4}$$

这个公式称为拉格朗日公式。也可以写成

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}\frac{\pi_n(x)}{(x-x_i)\,\pi_n'(x_i)}y_i,$$

其中 $$\pi_n(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n),$$