计算方法

上册

清华大学
北京大学 《计算方法》编写组

科学出

计 算 方 法

上 册

清华大学
北京大学《计算方法》编写组

科 学 出 版 社

内 容 简 介

本书介绍电子计算机上常用的数值计算方法，内容包括误差、插值法、曲线拟合、函数计算、数值积分、高次代数方程求根、常微分方程初值问题数值解法等.

本书可供计算数学专业师生阅读，工程技术人员也可参考.

计 算 方 法

上 册

清华大学
北京大学 《计算方法》编写组

*

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

*

1974 年 2 月第 一 版 开本：850×1168 1/32

1974 年 2 月第一次印刷 印张：7 3/4

印数：0001—31,820 字数：201,000

统一书号：13031·178

本社书号：308·13-1

定价： 0.76 元

前　　言

随着工农业生产发展和国防建设的需要，提出了大量的数学计算问题．“计算方法”就是研究计算这些数学问题的方法．由于电子计算机的使用日益广泛，学习和研究“计算方法”更为重要．只有掌握了各类数学问题的计算方法，才能更好地使用计算机，解决生产和科学实验提出的各种计算问题．

我们在编写本书时，力求贯彻“少而精”和“理论联系实际”的原则，内容以介绍一些计算机上常用的方法为主．在叙述上力求做到由浅入深，便于自学．但由于我们实践经验少，水平低，难免有错误，希望读者提出批评意见，帮助我们改进工作．

本书分上、下两册出版，下册的主要内容是线代数计算方法及微分方程数值解．

编　者

1973年9月

目　　录

第一章　误　差

第二章　插 值 法

第三章　曲线拟合法

第四章 函数值的计算

第五章 数值积分

第六章 高次代数方程解法

第七章　常微分方程初值问题

第一章 误 差

§1. 误差的来源

用数值计算方法解决科学技术中的具体问题，首先必须建立这个具体问题的数学模型．数学模型总是简化了的，总是近似的，所以数学模型本身包含着误差．数学模型通常包含观测数据．观测的结果是不可能绝对准确的，它们的误差叫做“量测误差”．

其次，在计算过程中，我们常用收敛无穷级数的前几项代替无穷级数，这等于抛弃了无穷级数的后段，这种误差叫做“截断误差”．例如当 x 很小时，我们常用 x 代替 $\sin x$，它的截断误差差不多是 $\frac{1}{6}x^3$；用 x 代替 $\ln(1+x)$，它的截断误差差不多是 $\frac{1}{2}x^2$．

最后，π，$\sqrt{2}$ 以及只能用循环小数表示的有理数，例如 1/3，1/7，在计算机上只能用有穷多位小数来计算．乘除所得的积和商，以及其它无理运算的结果也只能保留有穷多位．这样引起的误差叫做“凑整误差”．有时也叫“舍入误差”．

§2. 误差和误差限，有效数字

设 x^* 代表准确值 x 的一个近似值，则此近似值的“误差”e^*如下表示：

$$e^* = x^* - x.$$

这样定义后，有 $x^* - e^* = x$，即近似值去掉（减法）它的误差即为准确值．误差的负数 $-e^*$ 是近似值的“修正值”，近似值加上（加法）它的修正值即为准确值．

误差可正可负．当误差为正时，近似值偏大，叫做“强近似值”或“盈近似值”；当误差为负时，近似值偏小，叫做“弱近似值”或“亏

近似值".

由于一般不能算出准确值 x，误差 e^* 的准确值也不能求出. 但根据具体测量或计算的情况，可以事先估计出误差的绝对值不能超过的正数 ϵ^*，叫做误差绝对值的"上界"，也叫做"误差限".

定义. 如果

$$|e^*| = |x^* - x| \leqslant \epsilon^*,$$

那么 ϵ^* 就叫做近似值 x^* 的误差限(注意，误差限一定是正数).

例如用有毫米刻度的米尺测量不超过一米的长度 x. 读数法如下：如果长度接近于毫米刻度 x^*，就读出那一个刻度数 x^* 作为长度的近似值. 这个近似值的误差限是半个毫米，我们有

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \text{毫米}.$$

例如，设读出的长度是 765 毫米，则有

$$|765 - x| \leqslant 0.5.$$

但我们仍不知准确长度 x 是多少，不过不等式

$$764.5 \leqslant x \leqslant 765.5$$

成立，这说明 x 在 $[764.5, 765.5]$ 区间内.

在任何情形都有

$$|x^* - x| \leqslant \epsilon^*,$$

即

$$x^* - \epsilon^* \leqslant x \leqslant x^* + \epsilon^*.$$

有时也可用

$$x = x^* \pm \epsilon^*$$

表示近似值 x^* 的精确度或准确值的所在范围. 例如真空中光速 c 的最好的近似值是

$$c^* = 2.997902 \times 10^{10} \text{厘米/秒},$$

误差限是

$$\epsilon^* = 0.000009 \times 10^{10} \text{厘米/秒}.$$

通常记成

$$c = (2.997902 \pm 0.000009) \times 10^{10} \text{厘米/秒}.$$

我们通常用四舍五入的方法取 x 的前几位数 x^* 作为 x 的近似值.

例如设

$$x = \pi = 3.14159265\cdots.$$

取 1 位，　$x_1^* = 3$,　　$e_1^* \approx -0.14$,

取 3 位，　$x_3^* = 3.14$,　　$e_3^* \approx -0.0016$,

取 5 位，　$x_5^* = 3.1416$,　　$e_5^* \approx +0.000007$,

取 6 位，　$x_6^* = 3.14159$,　　$e_6^* \approx -0.000003$.

如果近似值 x^* 的误差限是某一位上的半个单位，该位到 x^* 的第一位非零数字一共有 n 位，我们就说 x^* 有“n 位有效数字”或是说 x^* 准确到该位. 用四舍五入法取准确值的前 n 位 x^* 作为近似值，则 x^* 有 n 位有效数字，其中每一位数字都叫做 x^* 的“有效数字”. 例如上例的 x_k^* 有 k 位有效数字，而且写出的每一位数都是 x_k^* 的有效数字. 应该注意，如果 x^* 准确到某位数字，把这位数字以后的数字进行四舍五入，则不一定得到有效数字，因为四舍五入的过程可能带来了新的半个单位的误差. 例如 3.145 当作 π 的近似值准确到百分位，四舍五入后得 3.15，最后一位不是有效数字. 3.15 只有两位有效数字.

如果近似值 x^* 的误差限是它保留的最后位上的一个单位，我们就说 x^* 的首位非零数字到保留的最后一位都是“可靠数字”. 例如 3.15 当作 π 的近似值有三位可靠数字.

设 x^* 是 x 的近似值，y^* 是 y 的近似值，则 $x^* \pm y^*$ 是 $x \pm y$ 的近似值，它的误差是

$$(x^* \pm y^*) - (x \pm y) = (x^* - x) \pm (y^* - y).$$

所以和的误差是误差的和；差的误差是误差的差.

另一方面，有

$$|(x^* \pm y^*) - (x \pm y)| \leqslant |x^* - x| + |y^* - y|.$$

所以误差限之和是和或差的误差限. 以上的结论适用于任何多个近似数的和. 任何多个近似数的和的误差限等于各数的误差限之和.

§ 3. 相对误差和相对误差限

误差限的大小不能完全表示近似值的好坏，例如设

$$x = 10 \pm 1,$$

$$y = 1000 \pm 5.$$

近似值 $y^* = 1000$ 的误差限比 $x^* = 10$ 的误差限大四倍，不过在一千之内差 5 比在十之内差 1 按误差与近似数的比值说，差得更少一些. 我们把近似数的误差与准确值的比值定义作“相对误差”，记作 e_r^*

$$e_r^* = \frac{e^*}{x} = \frac{x^* - x}{x}. \tag{1.1}$$

在实际计算中，由于准确值 x 总是不知道的，所以取

$$e_r^* = \frac{e^*}{x^*}, \tag{1.2}$$

条件是 e_r^* 比较小.

相对误差可正可负. 相对误差的绝对值的上界叫做“相对误差限”，记作 ϵ_r^*:

$$\epsilon_r^* = \frac{\epsilon^*}{|x^*|}, \tag{1.3}$$

其中 ϵ^* 是 x^* 的误差限.

为了区别相对误差与以前讲的误差，我们有时把以前讲的误差叫做“绝对误差”，注意绝对误差不是误差的绝对值.

例如，$c = (2.997902 \pm 0.000009) \times 10^{10}$ 厘米/秒，$c^* = 2.997902 \times 10^{10}$ 厘米/秒的相对误差限是

$$\epsilon_r^* = \frac{0.000009}{2.997902} = 0.000003.$$

所以 c^* 是 c 的很好的近似值. 如果我们取 $c^{**} = 3 \times 10^{10}$ 厘米/秒作为光速的近似值，则有

$$\epsilon_r^{**} = \frac{0.0021}{3} = 0.0007,$$

相对误差限不到千分之一. $c^{**}=3.00\times10^{10}$ 厘米/秒是从 c 用四舍五入法取前三位数的近似值,它有三位有效数字.

现在研究相对误差限和有效数字位数或可靠数字位数间的关系. 任何正数 A 可以写成下列标准形式:

$$A=a\times10^{\alpha},\qquad 0.1\leqslant a<1,$$

其中 a 叫做 A 的"模", α 是整数,叫做 A 的"位数". 例如 $0.0007=0.7\times10^{-3}$, 它是 -3 位数. $358=0.358\times10^{3}$, 它是 3 位数.

相对误差限 ϵ_r^* 与绝对误差限 ϵ^* 间的关系是

$$\epsilon^*=|x|\epsilon_r^*, \tag{1.4}$$

其中 x 是准确值. 把任何数乘以准确数 $10^k(k=0,\pm1,\pm2,\cdots)$ 等于移动该数的小数点, 并不影响它的有效数字位数或可靠数字位数.

设 ϵ_r^* 为 $-m$ 位数,移动小数点使 x 或 x^* 为 m 位数,我们有

$$\epsilon_r^*=a\times10^{-m},\quad 0.1\leqslant a<1,$$
$$|x|=b\times10^{m},\qquad 0.1\leqslant b<1.$$

根据(1.4),

$$\epsilon^*=|x|\epsilon_r^*=ab.$$

注意

$$0.01\leqslant ab<1,$$

当 $0.5<ab<1$ 时, x^* 有 m 位可靠数字;
当 $0.1<ab\leqslant0.5$ 时, x^* 有 m 位有效数字;
当 $0.05<ab\leqslant0.1$ 时, x^* 有 $(m+1)$ 位可靠数字;
当 $0.01\leqslant ab\leqslant0.05$ 时, x^* 有 $(m+1)$ 位有效数字.

由此可见,设 ϵ_r^* 为 $-m$ 位数, 则 x^* 至少有 m 位可靠数字或有效数字,有时有 $m+1$ 位可靠数字或有效数字.

§4. 和差积商的误差和相对误差

两个数 a 和 b 之差 $a-b$, 可以看作是 a 和 $-b$ 之和 $a+(-b)$. 任何两个数之和的误差等于两个数的误差之和. 任何多个数之和的误差也等于各数的误差之和. 任意多个数之和的误差限等于各数的误差限之和.

x^* 的误差 $e^* = x^* - x$ 可以看作是在 x 的微分：

$$dx = x^* - x;$$

x^* 的相对误差是

$$e_r^* = \frac{x^* - x}{x} = \frac{dx}{x} = d\ln x.$$

它是对数函数的微分.

设

$$u = xy,$$

则

$$\ln u = \ln x + \ln y$$

$$d\ln u = d\ln x + d\ln y.$$

这就是说，乘积的相对误差是各乘数的相对误差之和. 同法可证商的相对误差是被除数与除数的相对误差之差：

$$d\ln\frac{x}{y} = d\ln x - d\ln y.$$

任意多次连乘连除所得结果的相对误差限等于各乘数和除数的相对误差限之和.

例如设

$$u = \frac{xy}{zw},$$

则

$$\ln u = \ln x + \ln y - \ln z - \ln w,$$

$$d\ln u = d\ln x + d\ln y - d\ln z - d\ln w.$$

所以

$$|d\ln u| \leqslant |d\ln x| + |d\ln y| + |d\ln z| + |d\ln w|.$$

u 的相对误差限等于乘数 x, y 和除数 z, w 的相对误差限之和.

设 $y = f(x)$, $y^* = f(x^*)$, 则 y^* 的相对误差是

$$d\ln y = \frac{f'(x)}{f(x)}dx.$$

例如设 $y = x^n$, 则 $\ln y = n\ln x$, $d\ln y = nd\ln x$.

x^n 的相对误差是 x 的相对误差的 n 倍. $\sqrt{x}$ 的相对误差是 x 的相对误差之半.

两个正数之差 $u=x-y$ 的相对误差是

$$d\ln u=\frac{dx-dy}{x-y}.$$

如果两个数 x 和 y 很接近,它们的差的相对误差就很大,这是由于 x^* 和 y^* 的前几位相同的有效数字在它们的差 x^*-y^* 内全被减掉了. 所以,遇到这种情形,在 x^* 和 y^* 内应当多保留几位有效数字,或变换计算公式防止这种情形的出现.

例如,为了算出 π 的近似值,需要计算单位圆内接正 n 边形的边长 S_n. 设 $t_n=S_n^2$, 则

$$t_{2n}=2-\sqrt{4-t_n} \tag{1.5}$$

或写成如下形式:

$$t_{2n}^*=\frac{t_n}{2+\sqrt{4-t_n}}. \tag{1.6}$$

公式(1.6)比(1.5)难算一些. 不过当 t_n 很小时, 用(1.5)计算由于相近的数相减要损失几位有效数字, 必须多保留几位有效数字才能保证计算结果的准确度,用(1.6)就没有这种困难.

例如设 $t_n=0.01$. 用(1.5)计算,平方根取九位有效数字,则有

$$t_{2n}=2-\sqrt{3.99}=2-1.99749844=0.00250156.$$

注意 t_{2n} 仅有六位有效数字. 如果平方根取六位有效数字, 则 $t_{2n}=2-1.99750=0.00250$, 仅有三位有效数字. 用(1.6)计算则得

$$t_{2n}^*=\frac{0.01}{3.99750}=0.00250156,$$

仍有六位有效数字.

前面介绍的误差和有效数字等, 都是进行计算时应当注意的问题. 一方面可以减少计算工作量, 提高计算速度. 例如要将两个数相乘,而这两个数都是通过计算得到的,并且不是所有的数字都是有效数字, 那么在相乘时, 就不应当简单地进行乘法,而应先将这两个数的非有效数字都去掉,只保留有效数字,或者除了保留有效数字外,还多保留一位数字,在这样处理后再相乘. 这样做是

考虑到那些多余的数字没有意义，保留着反而使乘法更加复杂．另一方面，对计算结果的可靠程度大体上有个了解．但是，在用数字计算机进行计算时，情况有点不同．

首先，计算机要求输入的数有一定多位数字．在实际问题里的数若无这么多位数字或超过这么多位时，就要进行处理．前者要多补几个零以凑满位数，这些补上去的零并非有效数字．后者有两种处理方式，或者用某种舍入的办法将位数减少，这样做在计算开始前便放大了误差；或者用一个以上的单元存放一个数，这样做就给计算程序带来了某些复杂性．

其次，计算机都是对于固定多位数字进行算术运算的，即使有半字长，双倍位指令，也是不多的几种个别情形，不能简单地任意要求这个运算用 n 位数字，下一个运算用 m 位数字，随意变化．根据指令，计算的结果也只保留一定多位数字．因此，每次计算的结果，所保留下来的就不一定都是有效数字；同时，也不是所有有效数字都保留下来．

由于上述这些原因，不能把输出数的数字都看成是有效数字．这些数字中有些是有效数字，有些则不是，甚至有可能一个有效数字也没有，尽管计算机正确地执行了全部事先设计好的指令，而且程序也无差错．

还有，在计算过程中严重损失有效数字时，计算机并不提供这种情况发生与否的讯息．计算机不专门考察这种情况，而是对于严重损失有效数字，损失有效数字不严重或者根本不损失三种情况同等看待．因此，在设计程序前应就数据和公式尽可能地进行仔细周密的分析，判断这种严重损失有效数字的情况是否会发生．在有可能发生时，应采取挽救措施．

这方面应当注意的问题很多，其中一部分结合计算过程才能说清；而另一部分则要在实际计算中体会．

§5. 多个近似数的和的误差估计

在实际工作中，常常需要做大量的加减法或乘除法．我们知

道，和的误差限是各加数的误差限之和，乘积的相对误差限是各乘数的相对误差限之和. 这些定理虽然正确，其结果是按最坏情况得出的，因而据此而得出的结论通常是很保守的. 保守地估计误差限，会引起在计算中保留过多的数字，从而增加了许多不必要的工作.

例如，设有一百个正整数，它们都是以 $\frac{1}{2}$ 为误差限的近似数. 这一百个数的和的误差限是 $\frac{1}{2}\times 100=50$，那么，和的最后两位上的数字可能没有意义. 事实上，把和的误差限估计为 50 是十分保守的. 假设各数的可正可负误差比较平均地分配在 $\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ 区间内，则大部分误差互相抵消，因此和的误差限，在通常情况下，比 50 小得很多. 比较深入地研究这个问题，必须作出合理的假设，并且用到一些概率和统计知识.

现在近似数的误差限是 $\frac{1}{2}$，它的变化范围是 $\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ 区间. 假设近似数的误差 e 落在此区间内各部分的机会均等，也就是说，e 的概率密度函数是

$$f(e)=1,\ -\frac{1}{2}\leqslant e\leqslant\frac{1}{2},$$

则这个概率分布的平均值是 $\bar{e}=0$，标准差是 $\sigma=\sqrt{\frac{1}{12}}=0.288675$. 假设用重复抽样的方法抽出一个 n 件样本：

$$e_1,\ e_2,\ \cdots,\ e_n,$$

则其和

$$s_n=e_1+e_2+\cdots+e_n$$

的概率分布，当 n 很大时，例如当 $n=100$ 时，十分接近于一个叫做“正态分布”的钟形分布，其平均值仍为零，标准差为 $\sigma_n=\sqrt{n}\,\sigma=\sqrt{\frac{n}{12}}$.

根据正态分布的性质，和的误差限大于 σ_n 的概率是 0.3173，它

小于 $\frac{1}{3}$; 大于 $2\sigma_n$ 的概率是 0.04550,它小于 $\frac{1}{20}$; 大于 $3.3\sigma_n$ 的概率是 0.0009668,它小于 $\frac{1}{1000}$. 在这个题中, $n = 100$, $\sigma_n=\sqrt{100}\sigma=10\sigma = 2.88675$, $2\sigma_n = 5.7735$, $3.3\sigma_n = 9.5263$.

我们把一百个近似数的误差

$$e_1, e_2, \cdots, e_{100}$$

看做这种随机变量 e 的 100 件重复抽样样本，那么有 2/3 的把握（在很多次之内平均每三次对两次错一次）肯定和的误差限小于 2.89; 有 19/20 的把握肯定和的误差限小于 5.77; 有 999/1000 的把握肯定和的误差限小于 9.53,也就是说有 999/1000 的把握肯定这 100 个正整数的和可靠到十位数.

注意, σ_n 与 $\sqrt{n}$ 成正比. 因此,如果 n 增加一百倍, σ_n 只增加十倍. 如果要求一万个这种近似数的和,我们有 999/1000 的把握肯定这一万个近似数的和可靠到百位数.

这种法则的理论基础是把误差 e 看作是等概率的随机变量. 如果 e 不能看作是这种随机变量，就不能用这种法则. 例如一百个同一个数的和 $100x$, 它的误差限就是这个数 x 的误差限的一百倍. 另一方面, $100x$ 的相对误差限等于 x 的相对误差限.

例如, $\ln x = 0.69315$ 是下列定积分之值:

$$\ln 2 = \int_1^2 \frac{dx}{x}.$$

等分(1, 2)为 100 个子区间,则子区间之长为 1/100. 用右端矩形法计算 ln 2 的近似值,得

$$R = \frac{1}{100}\sum_{k=1}^{100}\frac{1}{1+\frac{k}{100}} = \sum_{k=1}^{100}\frac{1}{100+k}.$$

把巴罗表上从 101 到 200 的倒数加起来,即得

$$R = 0.690653432,$$

准确到倒数第三位.

现在取倒数表上的前三位有效数字,则每个倒数的误差限是