计算方法

诸梅芳 屈兴华 邓乃惠 耿美英 编

JISUAN FANGFA

化学工业出版社

计 算 方 法

诸梅芳　屈兴华
邓乃惠　耿美英　编

化学[illegible]社

内 容 简 介

本书着重介绍最常用、最基本的数值计算方法，内容包括非线性方程、线性方程组、多项式插值与多项式拟合、数值微积分以及常微分方程初值问题。各方法均列有算法步骤和 BASIC 通用程序。书中配有适量习题，并附有答案。本书还包含计算实习的内容，它运用图象形象地展示各种方法的计算过程以及计算中可能出现的问题，并提示解决办法。计算实习内容已在IBM-PC机上编制成软件，对于不熟悉计算机的读者，根据操作说明即可使用。计算实习也可通过计算器来完成。

本书叙述由浅入深，尽量利用几何图象和具体例子阐明概念和方法的实质，易于阅读。

本书可作为高等院校理、工、管理和师范各类专业的教材或教学参考书，也可供科技工作者和工程技术人员学习和参考。

计 算 方 法

诸梅芳 屈兴华 邓乃惠 耿美英 编

责任编辑：任文斗

封面设计：任 辉

*

化学工业出版社出版发行

（北京和平里七区十六号楼）

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所经销

*

开本787×1092 1/32 印张11 1/8 字数258千字

1988年9月第1版 1988年9月北京第1次印刷

印 数 1--15,200

ISBN 7-5025-0245-9/TP·2

定 价2.80元

前　　言

随着计算机的普及应用，计算方法已经成为广大科技人员必不可少的一种工具，我国不少高等院校已经或即将普遍开设该课程．我们在多年教学实践的基础上，编写了这本理工、管理和师范各类专业通用的计算方法教材．

本书着重介绍最基本、应用最广泛的数值计算方法，取材少而精，不带“*”号的内容适用于30学时左右课程的教学；讲授全部内容约需46学时（不包括计算实习）．书中各方法均列有算法流程图，并配有BASIC通用程序，每章末配有适量的习题，书末给出了答案．

由于本书的对象是非数学专业的学生，我们认为，教材的直观性对他们是至关重要的．因此，本书始终强调从具体到一般、从直观到抽象的教学原则，尽量从具体例题、几何图象或特殊情形引出一般的方法．

本书包含计算实习的内容，计算实习可以在计算机上进行，我们已经在IBM-PC微机上编制了BASICA（汉字）语言程序，读者通过微机的屏幕显示，逐步完成例题的计算和分析，这样可以进一步理解教材内容，了解实际计算中可能出现的问题，并对此加以分析和解决．在没有上机条件时，也可以通过计算器完成计算实习内容，并能达到上述教学要求．

在本书出版之际，谨向曾经给予我们帮助的李庆扬、王德人、陈祖荫、李宗元、马国瑜和陈志、高旅端、史明仁、薛毅表示衷心的谢意．

目　录

第一章　误　　差

第一节　误差的来源

在运用数值计算方法解决实际问题的过程中，会出现各种各样的误差，这些误差主要表现为下列四种形式．

一、模型误差

运用数值方法解决某一实际问题时，首先要建立它的数学模型．例如用

$$s=\frac{1}{2}gt^2 \tag{1.1.1}$$

（其中 g 是一个物理参数即重力加速度）描述地球上某一质点自由下落时的规律．这就是一个数学模型．

实际问题往往是十分复杂的，在建立数学模型时，总要做某些简化，即抓住其主要因素，略去其次要因素．因此数学模型与真正的实际情况之间，总会有一定的差别，由此而引起的误差称为模型误差．

在建立自由落体运动方程（1.1.1)时，忽略了空气阻力等因素．如果用 $f=f(t)$ 表示真正的运动规律，那么 $f(t)-\frac{1}{2}gt^2$ 就是数学模型（1.1.1）的模型误差．

二、参数误差

数学模型中物理参数的具体数值，一般是通过实验测定或观测得到的，因此与其真值之间也有误差，这种误差称为参数

误差或观测误差.

例如，自由落体运动方程(1.1.1) 中若取重力加速度 g 为 $9.8\mathrm{m/s^2}$，则 $g-9.8$ 就是参数误差.

三、截断误差

数学模型（包括其中的参数值）确定之后，就需要考虑选用某种数值方法进行计算. 许多数值方法都是近似方法，也就是说，即使所进行的计算都是绝对准确的，计算的最终结果与数学模型的真解之间还可能有误差，由数值方法本身引起的误差，称为截断误差或方法误差.

例如，考虑运用泰勒级数计算定积分 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$ 的近似值. 易知

$$\frac{\sin x}{x}=\frac{1}{x}\left(x-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^5}{5!}-\frac{x^7}{7!}+\cdots\right)$$

若从第二项后"截断"，则有

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x \approx \int_0^1 \frac{1}{x}\left(x-\frac{x^3}{3!}\right)\mathrm{d}x = \int_0^1\left(1-\frac{x^2}{6}\right)\mathrm{d}x$$

$$=1-\frac{1}{18}=\frac{17}{18}$$

这时截断误差为 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x-\frac{17}{18}$.

四、舍入误差

在使用计算机或计算器进行数值计算时，每个数据都是用有限位的数字表示的，把一个数表示成具有一定位数的近似数也可能引起误差，这种误差称为舍入误差.

在具有 t 位字长的计算机上表示某个数 x，一般采用如下的规格化浮点数的形式

$$x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_t \times 10^m$$

其中$a_i(i=1, 2, \cdots, t)$为0与9之间的整数，且$a_1 \neq 0$．我们称$0.a_1 a_2 \cdots a_t$为尾数；m是整数，称为阶码．例如在五位字长的计算机上，数$x = 654.321$应表示为

$$x \approx 0.65432 \times 10^3$$

此时的舍入误差为

$$654.321 - 0.65432 \times 10^3 = 0.001$$

综上所述，若采用下列记号：

S——实际问题的真解；

S_1——数学模型（假定参数是准确的）的真解；

S_2——具有参数误差的数学模型的准确解；

S_3——数学模型（含有参数误差）确定后，运用某种数值方法求解，在计算都是精确的条件下得到的数值解；

S_4——实际计算所得到的数值解．

则最后所得的数值解与实际问题的真解之间的误差可表示为

$$S - S_4 = (S - S_1) + (S_1 - S_2) + (S_2 - S_3) + (S_3 - S_4)$$

其中$S - S_1$是模型误差，$S_1 - S_2$是由参数误差引起的误差，$S_2 - S_3$是所用数值方法的截断误差，$S_3 - S_4$是舍入误差，如果我们运用某种物理或数学手段得到了每种误差的估计：

$$|S - S_1| \leqslant \varepsilon_1, |S_1 - S_2| \leqslant \varepsilon_2, |S_2 - S_3| \leqslant \varepsilon_3, |S_3 - S_4| \leqslant \varepsilon_4$$

那么就有

$$|S - S_4| \leqslant |S - S_1| + |S_1 - S_2| + |S_2 - S_3| + |S_3 - S_4|$$
$$\leqslant \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4$$

第二节　绝对误差、相对误差和有效数字

一、绝对误差与绝对误差限

定义1.1　设x^*为准确值x的一个近似值，则称$x - x^*$为

x^* 的绝对误差，简称误差，并用e^*表示，即

$$e^* = x - x^* \tag{1.2.1}$$

例如，$\sqrt{2}$的近似值1.414的绝对误差为

$$\begin{aligned}\sqrt{2} - 1.414 &= 1.414213\cdots - 1.414\\ &= 0.000213\cdots\end{aligned}$$

π的近似值3.1416的绝对误差为

$$\begin{aligned}\pi - 3.1416 &= 3.14159265\cdots - 3.1416\\ &= -0.00000734\cdots\end{aligned}$$

有许多情形我们无法知道准确值x，因而也就不可能得到x^*的绝对误差e^*的准确值，然而e^*的取值范围却是比较容易估计的．例如，用1.414作为$\sqrt{2}$的近似值时，绝对误差不会超过0.0003；用3.1416作为π的近似值时，绝对误差的绝对值不会超过10^{-5}．又如，用毫米刻度的米尺测量长度不超过1 m的长度l(准确值)时，测量值l^*(l的近似值)的绝对误差介于-0.5 mm与0.5mm之间，即$|l-l^*|\leqslant 0.5$mm．这里0.0003，10^{-5}和0.5 mm分别是相应绝对误差的绝对值$|\sqrt{2}-1.414|$，$|\pi-3.1416|$和$|l-l^*|$的上界．

定义1.2 设x^*为准确值x的一个近似值，则称x^*的绝对误差的绝对值的上界ε^*为x^*的绝对误差限，简称误差限，即

$$|e^*| = |x - x^*| \leqslant \varepsilon^* \tag{1.2.2}$$

例如1.414是$\sqrt{2}$的近似值，0.0003是其绝对误差限，而10^{-5}是π的近似值3.1416的绝对误差限．

显然，如果ε^*是x的近似值x^*的绝对误差限，那么x必位于区间$[x^*-\varepsilon^*, x^*+\varepsilon^*]$上，在工程技术上常用

$$x = x^* \pm \varepsilon^*$$

表示。例如用毫米刻度的直尺量得某线段的长度为52mm，可以写成$l = 52 \pm 0.5$mm．这表明该线段长度的近似值为52mm，

绝对误差限为0.5mm．该线段的真正长度介于51.5mm与52.5mm之间．

二、相对误差与相对误差限

有许多情形绝对误差的大小还不能完全刻划一个数的近似值的精确程度．例如比较$x=10\pm 1$和$y=10000\pm 10$两种情形，我们应该承认，x的近似值$x^*=10$的精度较低，而y的近似值$y^*=10000$的精度较高，虽然y^*的绝对误差限是x^*的绝对误差限的10倍．上述例子表明，一个近似值的精确程度除了与其绝对误差有关外，还与准确值本身的大小有关．因此可以考虑用绝对误差与准确值之比e^*/x来描述另一种意义下的误差的大小．但是由于准确值x是未知的，使用起来不方便，不妨用其近似值x^*代替其中的x，这便导至如下的定义．

定义1.3 设x^*为准确值x的一个近似值，e^*为它的绝对误差，则称比值e^*/x^*为近似值x^*的相对误差，记作e_r^*，即

$$e_r^*=\frac{e^*}{x^*}=\frac{x-x^*}{x^*} \tag{1.2.3}$$

与绝对误差限的概念类似，我们引入相对误差限的概念．

定义1.4 设x^*为准确值x的一个近似值，称x^*的相对误差e_r^*的绝对值的上界ε_r^*为x^*的相对误差限，即

$$|e_r^*|\leqslant\varepsilon_r^* \tag{1.2.4}$$

相对误差和相对误差限都是无量纲的数，常用百分数表示．例如，$x=10\pm 1$与$y=10000\pm 10$的近似值$x^*=10$和$y^*=10000$的相对误差限分别为

$$\varepsilon_r^*(x)=\frac{1}{10}=10\%,\qquad \varepsilon_r^*(y)=\frac{10}{10000}=0.1\%$$

x^*的相对误差限是y^*的相对误差限的100倍．在这个意义上说，y^*的精度比x^*的精度高得多．

容易看出，同一个近似值x^*的绝对误差限ε^*与相对误差限ε_r^*满足关系

$$\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon^*}{|x^*|} \tag{1.2.5}$$

三、有效数字

在实际计算中，经常按四舍五入原则取近似数．显然，这样得到的近似值的绝对误差不会超过末位数的半个单位．

例1 按四舍五入原则取$\sqrt{200}$，lg2和e^{-5}的具有三位数字（从左边第一个非零数字算起）的近似数．

解 按四舍五入原则得到

$$\sqrt{200} = 14.142\cdots \approx 14.1$$

$$\lg 2 = 0.30102\cdots \approx 0.301$$

$$e^{-5} = 0.0067379\cdots \approx 0.00674$$

易见，它们的绝对误差分别满足下列不等式：

$$|\sqrt{200} - 14.1| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-1}$$

$$|\lg 2 - 0.301| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

$$|e^{-5} - 0.00674| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-5}$$

粗略地说，按四舍五入原则得到的近似值中的各位数字都是有意义的，称这些数字为“有效数字”．有效数字的确切意义由下列定义给出．

定义1.5 设x^*为准确值x的一个近似值，并且x^*的左边第一个非零数字到末位数字共有n位数，即x^*可表示为

$$x^* = \pm 10^m(\alpha_1 + \alpha_2 \times 10^{-1} + \alpha_3 \times 10^{-2} + \cdots + \alpha_n \times 10^{-(n-1)} \tag{1.2.6}$$

其中 m 为某个整数，α_1 为介于 1 与 9 之间的某个整数，$\alpha_2, \cdots, \alpha_n$ 都是介于 0 与 9 之间的整数．如果 x^* 的绝对误差不超过其末位数的半个单位，即

$$|x - x^*| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-(n-1)} \tag{1.2.7}$$

则称 x^* 的这 n 位数字都是有效数字，并称 x^* 具有 n 位有效数字．

例 1 中 e^{-5} 的近似值可表示为式(1.2.6)的形式：

$$0.00674 = 6.74 \times 10^{-3} = 10^{-3}(6 + 7 \times 10^{-1} + 4 \times 10^{-2})$$

这里从左边第一个非零数字 6 到末位数字 4 共有 $n = 3$ 位数字，$m = -3$，且绝对误差满足

$$|e^{-5} - 0.00674| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-5} = \frac{1}{2} \times 10^{-3-(3-1)}$$

即满足式(1.2.7)，故0.00674具有三位有效数字．类似地分析可知，14.1，0.301也都具有三位有效数字．由此还可以看出，有效数字的个数与小数点的位置无关．

例 2 写出 $\frac{1}{27}$ 的具有一位、两位、三位和四位有效数字的近似值．

解 $\frac{1}{27}$ 是无限循环小数

$$\frac{1}{27} = 0.037037037\cdots$$

按照有效数字的定义1.5，$\frac{1}{27}$ 的具有一位、两位、三位和四位有效数字的近似值分别为

$$0.04, \quad 0.037, \quad 0.0370, \quad 0.03704$$

要注意，0.037与0.0370是两个不同的近似值，前者有两

位有效数字，而后者有三位有效数字．根据前者只能知道其绝对误差不超过$\frac{1}{2}\times 10^{-3}$，而后者的绝对误差限可以取为$\frac{1}{2}\times 10^{-4}$，可见有效数字 0 不能丢掉．

四、有效数字与误差的关系

从有效数字的定义1.5可以直接看出有效数字的位数与绝对误差的关系，有效数字的位数越多，绝对误差限越小．下列定理对此进行了具体的讨论．

定理1.1 设形如式(1.2.6)的近似值x^*具有 n位有效数字，则其相对误差满足下列不等式

$$|e_r^*|\leqslant\frac{1}{2\alpha_1}\times 10^{-(n-1)} \tag{1.2.8}$$

其中α_1是x^*的第一位有效数字．

证明　由式（1.2.6）知

$$|x^*| = 10^m(\alpha_1+\alpha_2\times 10^{-1}+\cdots+\alpha_n\times 10^{-(n-1)})\geqslant\alpha_1\times 10^m$$

因此x^*的相对误差满足

$$|e_r^*| = \frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{\frac{1}{2}\times 10^{m-(n-1)}}{\alpha_1\times 10^m}=\frac{1}{2\alpha_1}\times 10^{-(n-1)}$$

定理证毕．

从定理1.1可以看出，有效数字位数越多，相对误差限越小．

例3　求例 2 中各近似值的相对误差限．

解　0.04的第一位有效数字为$\alpha_1 = 4$，有效数字位数$n=1$．于是由定理1.1可知，0.04的相对误差限为

$$\varepsilon_r^*=\frac{1}{2\times 4}\times 10^{-(1-1)}=\frac{1}{8}=12.5\%$$

类似地，0.037，0.0370和0.03704的相对误差限分别为

$$\frac{1}{2\times 3}\times 10^{-(2-1)}=1.7\%$$

$$\frac{1}{2\times 3}\times 10^{-(3-1)}=0.17\%$$

$$\frac{1}{2\times 3}\times 10^{-(4-1)}=0.017\%$$

例4 为使$\sqrt{200}$的近似值的相对误差不超过0.1%，问要取几位有效数字．

解 根据式（1.2.8），只需求出满足

$$\frac{1}{2\alpha_1}\times 10^{-(n-1)}\leqslant 0.1\%$$

的 n．易知，所求近似值的第一位有效数字$\alpha_1=1$．解不等式

$$\frac{1}{2}\times 10^{-(n-1)}\leqslant 0.1\%$$

可得 $n=4$．于是$\sqrt{200}\approx 14.14$

依据定理1.1，已知有效数字的位数以及第一位有效数字，可以求出相对误差限；反之，根据相对误差限和第一位有效数字，也可以估计出相应有效数字的位数．

第三节 数值计算中需要注意的两个问题

一、避免相近两数相减

当相近两数相减时将会严重损失有效数字，因而导致很大的相对误差．

例1 取四位有效数字计算$x-y$的近似值，并估计其相对误差：

（1） $x=18.496$， $y=17.208$

（2） $x=18.496$， $y=18.493$

解

（1）取四位有效数字，得到x,y的近似值分别为$x^*=18.50$，$y^*=17.21$．于是

$$x^*-y^*=18.50-17.21=1.29$$

但
$$x-y=18.496-17.208=1.288$$

可见x^*-y^*仅具有三位有效数字．

x^*-y^*的相对误差限为

$$|e_r^*|=\frac{|(x-y)-(x^*-y^*)|}{|x^*-y^*|}=\frac{|1.288-1.29|}{1.29}$$

$$\leqslant 0.16\%=\varepsilon_r^*$$

而x^*和y^*的相对误差限分别为

$$|e_r^*(x)|=\frac{|x-x^*|}{|x^*|}=\frac{|18.496-18.50|}{18.50}$$

$$\leqslant 0.022\%=\varepsilon_r^*(x)$$

$$|e_r^*(y)|=\frac{|y-y^*|}{|y^*|}=\frac{|17.208-17.21|}{17.21}$$

$$\leqslant 0.012\%=\varepsilon_r^*(y)$$

（2）x，y的具有四位有效数字的近似值分别为$x^*=18.50$，$y^*=18.49$．于是

$$x^*-y^*=18.50-18.49=0.01$$

但
$$x-y=18.496-18.493=0.003$$

可见x^*-y^*连一位有效数字都没有，其相对误差达到

$$|e_r^*|=\frac{|(x-y)-(x^*-y^*)|}{|x^*-y^*|}=\frac{|0.003-0.01|}{0.01}=70\%$$

现在从理论上分析一下两数之差的相对误差．设x^*和y^*分别为x和y的近似值，因而x^*-y^*是$x-y$的近似值．显然，近似值x^*-y^*的相对误差应满足

$$|e_r^*| = \frac{|(x-y)-(x^*-y^*)|}{|x^*-y^*|} \leqslant \frac{|x-x^*|}{|x^*-y^*|} + \frac{|y-y^*|}{|x^*-y^*|}$$

$$= \frac{|x^*|}{|x^*-y^*|}|e_r^*(x)| + \frac{|y^*|}{|x^*-y^*|}|e_r^*(y)|$$

当x^*与y^*非常接近时，$|x^*-y^*|$很小，相对误差$|e_r^*|$就可能很大．这一点与上述例子中的结果是一致的．

根据上述分析可知，在实际计算时应尽量避免相近两数相减．当算式中出现两个相近的数相减时，需设法把它改写成另外的等价形式．例如要对接近于零的x计算$1-\cos x$和e^x-1，可把它们分别改写为

$$1-\cos x = 2\sin^2\frac{x}{2}$$

和

$$e^x - 1 = \left(1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots\right) - 1$$

$$= x\left(1 + \frac{x}{2} + \frac{x^2}{6} + \cdots\right)$$

而要对两个很接近的正数x和y，计算$\ln x - \ln y$时，可把它改写为

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

在难以找出避免相近两数相减的方法时，可以对参加运算的各数多取几位有效数字，以保证必须的精度．

二、防止大数“吃掉”小数引起的失真

当两个绝对值相差很大的数进行加法或减法运算时，绝对值小的数有被“吃掉”的可能，从而导至计算结果严重失真．我们先用一个例子予以说明．