电算方法基础

陆美君 编

纺织工业出版社

电算方法基础

陆美君　编

纺织工业出版社

内 容 提 要

本书着重介绍各种电算方法，并结合算法简述了一些数值计算中常用的基本概念与基础理论。全书共分七章，内容涉及多项式插值、曲线拟合的最小二乘法、数值微分与积分、常微分方程初值问题数值解、非线性方程求根与线性方程组求解等。各章自成体系，可根据需要选读。

本书可供广大工程技术人员自学计算方法时使用，也可作为大专院校（包括夜大、电大）开设计算方法课程的教材。

电算方法基础

陆美君 编

*

纺织工业出版社出版

（北京东长安街12号）

纺织工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

各地新华书店经售

*

787×1092毫米 1/32 印张：5 字数：110千字

1989年9月 第一版第一次印刷

印数：1— 2,000 定价：1.90元

ISBN 7-5064-0304-8/TS·0298

前　　言

电子计算机的出现，有力地推动了科学技术的发展。在迈步进入电子计算机时代的今天，面对一个数值计算课题，怎样合理地选取或构造适当的计算方法，以便编出高质量的程序，利用电子计算机算出达到精度要求的结果，已经成为广大科技工作者迫切需要解决的问题。为使广大科技工作者能以较少时间，系统、清晰地掌握电子计算机上常用的算法，编者在多年教学与科研实践的基础上编写了此书。

为了便于阅读与实践，在编写此书时，充分考虑到广大科技工作者的数学基础和上机能力，力求做到叙述简明准确，内容安排由浅入深，对主要方法给出计算框图，并配有一定数量的数值例子、习题和上机实习题。因此本书可供广大工程技术人员自学计算方法时使用，也可作为大专院校（包括夜大、电大）教材。讲授本书全部内容，仅需32～36学时，经作者多次试用，都取得了很好的教学效果。

本书经浙江大学易大义副教授和浙江丝绸工学院郦定一副教授审阅与推荐，他们对原稿提出了不少宝贵意见，谨此向他们表示深切的谢意。

限于水平，书中缺点和错误一定不少，欢迎读者批评指正。

编　者

1988.9.

目　　录

第一章 引 论

第一节 研究数值计算方法的必要性

在科学研究和工程技术中，有许多问题可以归结为数学问题。例如，求函数值f(x)、计算定积分$\int_a^b f(x)dx$、解各种类型的方程以及建立经验公式等等。在这些数学问题中，有很大一部分很难得到精确解，而且其工作量之大也不是人工手算（即使利用计算器）所能胜任的。因此，必须依靠电子计算机来求取各种数学问题的数值解。

用电子计算机进行这种科学技术计算的工作，称为科学计算，或简称电算。

要正确、合理地进行科学计算，就必须对各种数学模型研究适合于电子计算机上采用的数值计算方法。

例如，在学习微积分时，常用牛顿-莱布尼兹公式

$$\int_a^b f(x)dx = F(x)\Big|_a^b = F(b) - F(a)$$

〔其中F(x)是f(x)的一个原函数〕来计算连续函数f(x)在区间〔a,b〕上的积分。但在计算机上就不能用这种方法，而必须运用适宜于电算的求积方法——复合梯形法、复合辛甫生法以及龙贝格算法等来计算积分值。

又如，从原则上讲，克莱姆（Cramer）法则可用来求解线性方程组。但是，用这种方法解一个n阶方程组，要算$n+1$个n阶行列式，若按定义计算这些行列式，那么总共需要$n!\times(n-1)(n+1)$次乘法。当n较大时，计算量相当惊人。譬如，一个20阶小型的方程组，大约要做10^{21}次乘法，即使用高速电子计算机进行计算，也要连续工作许多年才能完成。而采用在第七章中介绍的解线性方程组的一些实用算法进行计算，一个20阶方程组即使用微型电子计算机也能很快得到满意的结果。随着电子计算机应用的日益扩大，使数值计算方法在现代科学研究与工程技术中的地位与作用不断提高。因此掌握计算机上常用的数值计算方法是十分必要的。

第二节 误 差

有人错误的认为，利用先进计算工具（例如计算器或电子计算机）进行计算，所得结果的精度必然很高，没有必要对误差进行分析，实际不然。现举例如下。

例1 考虑算式

$$S=10^6\times(\sqrt{8976553}-\sqrt{8976552})$$

其准确值为166.88…。如果利用八位计算器按下面方法进行计算

$$S=10^6\times(2996.0896-2996.0895)=100$$

这个结果显然不能令人满意。

例2 考虑方程

$$x^2+(\alpha+\beta)x+10^9=0 \qquad (\text{其中}\alpha=-10^9,\ \beta=-1)$$

它的两个根分别为$x_1 = 10^9$，$x_2 = 1$。但是，如果应用求根公式

$$x_{1,2} = (-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac})/2a$$

编制程序，在能将规格化的数表达到小数后八位的电子计算机上进行计算，就会得到$x_1 = 10^9$，$x_2 = 0$的结果。显然，第二个根x_2是错误的。

以上两例说明，如果计算过程不合理，即使使用了先进的计算工具，仍不能得到满意的结果。因此，分析原因，采取有效措施，以保证结果的可靠性，对误差进行分析研究是十分必要的。

一、误差的来源

利用电子计算机解决科学计算问题大致可以归结为如下过程：

实际问题 → 建立数学模型 → 确定计算方法 → 编制程序上机算出结果

其中每一步都可能产生误差。

首先，由于所建立起来的模型往往是通过对实际问题进行抽象、简化得到的，它与实际现象之间不可避免地存在着误差，这种误差称为“模型误差”；同时，在数学模型中常常还含有一些参量，例如距离、时间、温度、浓度、电流、电压等，这些参量通常由观测和实验得到，也会有误差，这种误差称为“观测误差”或“参量误差”。

其次，根据实际问题建立起来的数学模型，在很多情况下很难得到准确解，因而常用数值方法求出它的近似解(例如，用泰勒（Taylor）展开式前面n项之和求函数值的近似

值〕。这样，又产生了一种误差，这种误差称为“截断误差”或“方法误差”。

最后，由于计算机字长有限，只能用有限位进行计算，对超过位数的数字就要进行舍入，于是又产生了一种误差，这种误差称为“舍入误差”。

除了上面各种误差外，初始数据有时也有误差，这种误差称为“初值误差”。

本书将着重研究截断误差，有时也涉及舍入误差。

二、绝对误差、相对误差与有效数字

1.绝对误差　设x^*为准确值x的一个近似值，现定义

$$e^* = x^* - x \tag{1-1}$$

为近似值x^*的绝对误差。在通常情况下，无法得到准确值x，从而也无法准确地算出绝对误差的真值，只能根据具体情况估计它的绝对值的取值范围。若

$$|e^*| = |x^* - x| \leqslant \varepsilon^* \tag{1-2}$$

则称ε^*为近似值x^*的绝对误差限。只要知道了近似值x^*的绝对误差限ε^*，就可以知道准确值x的取值范围：

$$x^* - \varepsilon^* \leqslant x \leqslant x^* + \varepsilon^* \tag{1-3}$$

在工程技术上，常将不等式（1-2）或式（1-3）写成

$$x = x^* \pm \varepsilon^* \tag{1-4}$$

例如，用一支钢皮尺量一段材料的长度（用l表示），读得l的近似值为l^*，若根据尺子的刻度和测量情况，有把握使（绝对）误差不超过0.5mm，那么0.5mm就是近似值l^*的一个绝对误差限，即有

$$|l^* - l| \leqslant 0.5\text{mm}$$

亦即　$l = l^* \pm 0.5\text{mm}$

2.相对误差　在许多情况下，只用绝对误差还不能说明

一个数的近似程度。例如，设$x_1=5\pm1$，$x_2=50\pm2$,则近似值$x_2^*=50$的绝对误差限$\varepsilon^*(x_2)=2$是$x_1^*=5$绝对误差限$\varepsilon^*(x_1)=1$的二倍。但若考虑到近似值本身的大小，在50内差2显然比在5内差1更精确些。这表明对于一个近似值来说，除了要看它绝对误差的大小外，还应考虑它本身的大小。这样，就要引入相对误差的概念。

现定义比值

$$e_r^*=\frac{e^*}{x^*}=\frac{x^*-x}{x^*} \tag{1-5}$$

为近似值x^*的相对误差。在通常情况下无法算出绝对误差的准确值，当然也不可能得到相对误差的真值，只能根据实际情况估计它的绝对值的取值范围。若

$$|e_r^*|\leqslant\varepsilon_r^* \tag{1-6}$$

则称ε_r^*为近似值x^*的相对误差限。相对误差与相对误差限都是无名数，常用百分数来表示。

根据上述定义知，$x_1=5\pm1$的近似值$x_1^*=5$的相对误差

$$|e_r^*(x_1)|\leqslant\frac{1}{5}=20\%$$

$x_2=50\pm2$近似值$x_2^*=50$的相对误差

$$|e_r^*(x_2)|\leqslant\frac{2}{50}=4\%$$

可见，从相对误差这个角度看，x_2^*比x_1^*更精确。

3.有效数字　表示一个近似值时，为了同时反映它的准确程度，常常用到“有效数字”的概念。如果近似值x^*绝对

误差的绝对值不超过某一位数的半个单位，而且从该位数字到x^*的第一位非零数字一共有n位，那么就说近似值x^*具有n位有效数字。

例如，对于$x=\pi=3.14159265\cdots$，若取近似值$x_1^*=3.14$（第一位非零数字为“3”），由于

$$|x_1^*-x|=0.00159265\cdots<\frac{1}{2}\times10^{-2}$$

根据定义可知x_1^*具有三位有效数字。但是，若取近似值$x_2^*=3.141$，由于

$$|x_2^*-x|=0.00059265\cdots>\frac{1}{2}\times10^{-3}$$

就不能说近似值x_2^*具有四位有效数字。同样，在例1中

$$10^6\times(\sqrt{8976553}-\sqrt{8976552})$$

的近似值100连一位有效数字也没有。

显然，对于同一个准确值的近似值来说，有效数字位数越多，其绝对误差与相对误差都越小；反之亦然。

引入有效数字概念后，应注意近似值30.5与30.500的精确程度不同：前者只有三位有效数字，后者却有五位有效数字。

4.*估计误差的一个基本方法*　估计误差的方法很多，利用函数的泰勒展开式估计误差是常用的基本方法之一。现以二元函数为例加以介绍。

设x^*、y^*分别为x、y的近似值。在实际计算中，常用$z^*=f(x^*,y^*)$作为函数值$z=f(x,y)$的一个近似值。利用

函数$z=f(x,y)$在点(x^*, y^*)处的泰勒展开式，可以方便地估计近似值z^*的绝对误差与相对误差。因为

$$e^*(z)=z^*-z=f(x^*,y^*)-f(x,y)$$

若将$f(x,y)$在点(x^*,y^*)处泰勒展开，并取线性部分，则得绝对误差估计式

$$e^*(z)\approx\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^*(x^*-x)+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^*(y^*-y)$$

即

$$e^*(z)\approx\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^*e^*(x)+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^*e^*(y) \qquad (1\text{-}7)$$

其中$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^*$、$\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^*$分别表示偏导数$\frac{\partial f}{\partial x}$、$\frac{\partial f}{\partial y}$在点$(x^*, y^*)$处的值。

由近似值z^*的绝对误差估计式（1-7），便可得相对误差估计式

$$e_r^*(z)=\frac{e^*(z)}{z^*}\approx\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^*\frac{e^*(x)}{z^*}+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^*\frac{e^*(y)}{z^*}$$

即

$$e_r^*(z)\approx\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^*\frac{x^*e_r^*(x)}{z^*}+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^*\frac{y^*e_r^*(y)}{z^*} \qquad (1\text{-}8)$$

例3 测得矩形的长、宽数据如图1-1所示，则其对角线AC长度$l=\sqrt{x^2+y^2}$的近似值为

$$l^* = \sqrt{(x^*)^2 + (y^*)^2}$$

$$= \sqrt{80^2 + 60^2}$$

$$= 100\text{cm}$$

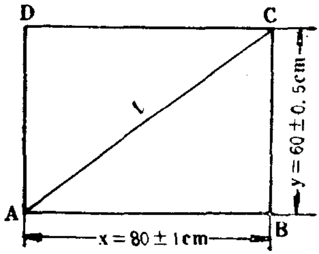

图1-1

由式（1-7）知，l^*的绝对误差

$$e^*(l) \approx \frac{x^*}{\sqrt{(x^*)^2 + (y^*)^2}} e^*(x) + \frac{y^*}{\sqrt{(x^*)^2 + (y^*)^2}} e^*(y)$$

现在已知$x^* = 80\text{cm}$，$y^* = 60\text{cm}$，$|e^*(x)| \leqslant 1\text{cm}$，$|e^*(y)| \leqslant 0.5\text{cm}$。故

$$|e^*(l)| \leqslant \frac{x^*}{\sqrt{(x^*)^2 + (y^*)^2}} |e^*(x)| +$$

$$+ \frac{y^*}{\sqrt{(x^*)^2 + (y^*)^2}} |e^*(y)|$$

$$\leqslant \frac{80}{100} \times 1 + \frac{60}{100} \times 0.5 = 1.1\text{cm}$$

l^*的相对误差

$$|e_r^*(l)|=\left|\frac{e^*(l)}{l^*}\right|\leqslant\frac{1.1}{100}=1.1\%$$

例4 **和、差、积、商的误差估计**

设x^*、y^*分别为准确值x、y的近似值，则$z_1^*=x^*+y^*$，$z_2^*=x^*-y^*$，$z_3^*=x^*\cdot y^*$，$z_4^*=\dfrac{x^*}{y^*}\ (y^*\neq 0)$ 分别为$z_1=x+y$，$z_2=x-y$，$z_3=x\cdot y$，$z_4=\dfrac{x}{y}\ (y\neq 0)$ 的近似值。利用误差估计式（1-7）与式（1-8），可以方便地导出下列误差估计式：

z_1^*的绝对误差与相对误差

$$e^*(z_1)\approx e^*(x)+e^*(y) \tag{1-9}$$

$$e_r^*(z_1)\approx\frac{x^*}{x^*+y^*}e_r^*(x)+\frac{y^*}{x^*+y^*}e_r^*(y) \tag{1-10}$$

z_2^*的绝对误差与相对误差

$$e^*(z_2)\approx e^*(x)-e^*(y) \tag{1-11}$$

$$e_r^*(z_2)\approx\frac{x^*}{x^*-y^*}e_r^*(x)-\frac{y^*}{x^*-y^*}e_r^*(y) \tag{1-12}$$

z_3^*的绝对误差与相对误差

$$e^*(z_3)\approx y^*e^*(x)+x^*e^*(y) \tag{1-13}$$

$$e_r^*(z_3)\approx e_r^*(x)+e_r^*(y) \tag{1-14}$$

z_4^*的绝对误差与相对误差

$$e^*(z_4)\approx\frac{1}{y^*}e^*(x)-\frac{x^*}{(y^*)^2}e^*(y) \tag{1-15}$$

$$e_r^*(z_4) \approx e_r^*(x) - e_r^*(y) \qquad (1\text{-}16)$$

第三节 数值计算中应注意的几个问题

数值计算中，每步都可以产生误差，而一个问题的解决，往往要经过成千上万次运算，不可能也不必要逐步加以分析。下面通过对误差某些传播规律的分析，指出在数值计算中应该注意的几个问题。

1.相近两数应避免相减　由式（1-12）可得

$$|e_r^*(z_2)| \leqslant \frac{|x^*|}{|x^*-y^*|}|e_r^*(x)| + \frac{|y^*|}{|x^*-y^*|}|e_r^*(y)|$$

容易看出，当x^*与y^*充分接近时，不等式右端可能很大。即近似值z_2^*的相对误差有可能很大，从而严重影响它的准确性（参见例1）。因此，在实际计算中，应尽量避免对相近两数进行减法运算。例如，对于例1中的算式，若采用下面过程（仍用八位计算器），就可获得满意的结果

$$10^6 \times (\sqrt{8976553} - \sqrt{8976552})$$

$$= \frac{10^6}{\sqrt{8976553} + \sqrt{8976552}}$$

$$= \frac{10^6}{2996.0896 + 2996.0895} = 166.9$$

此近似值具有四位有效数字。对于有些算式，如一时找不出避免相近两数相减的办法，可以把参加运算的数的有效数字

多取几位，这样也可取得较好的结果。

2.绝对值太小的数不宜作除数　由式（1-15）可得

$$|e^*(z_4)| \leqslant \frac{1}{|y^*|}|e^*(x)| + \frac{|x^*|}{(y^*)^2}|e^*(y)|$$

容易看出，当 $|y^*|$ 很小时，$z_4^* = x^*/y^*$ 的绝对误差可能变得很大。因此，在实际计算中，应尽量避免用绝对值太小的数作除数。例如，同样利用四位数学用表，通过下面过程计算 $\frac{1-\cos 2^\circ}{\sin 2^\circ}$（准确值为0.017455…）可以获得好的结果

$$\frac{1-\cos 2^\circ}{\sin 2^\circ} = \frac{(1-\cos 2^\circ)(1+\cos 2^\circ)}{\sin 2^\circ(1+\cos 2^\circ)} = \frac{\sin 2^\circ}{1+\cos 2^\circ}$$

$$\underline{\underline{\text{(查表)}}} \frac{0.03490}{1.9994} = 0.01746$$

如果一开始就进行查表计算，必然得到一个很坏的结果。

在编制程序时，应注意机器字长有限等特点　由于机器字长有限，绝对值相差很大的两个数进行加、减法运算，绝对值较小的那个数往往不起作用，有时严重影响到计算结果的准确性。在例 2 中，第二个根 x_2 发生错误的主要原因就在这里。事实上

$$\begin{aligned} -b &= -(\alpha+\beta) = 10^9 + 1 \\ &= 0.1 \times 10^{10} + 0.0000000001 \times 10^{10} \end{aligned}$$

由于所用计算机只能将规格化的数表示到小数后八位，第二项最后两位数“01”就消失了，故在机上运算（用“△”表