# 计 算 方 法

李学春　吴爱弟　曹建胜　苟列红　编

石油大学出版社

# 计 算 方 法

李学春　吴爱弟
曹建胜　荀列红　编

石油大学出版社

**计 算 方 法**

李学春　吴爱弟
　　　　　　　　编
曾建胜　苟列红

石油大学出版社出版发行

（山东省东营市）

石油大学印刷厂印刷

*

开本 850×1168　1/32　7.5 印张　195 千字

1998 年 2 月第 1 版　　1998 年 2 月第 1 次印刷

印数 1－4000 册

ISBN 7-5636-1054-5/O·59

定价：9.80 元

# 前　言

本书是在我们通过多年教学实践的基础上为我校本科各专业学生学习“计算方法”课程而编写的。根据新教学大纲的要求，我们在原《计算方法》一书的基础上做了较大的修改。本书可作为工科本科各专业计算方法课的教材。讲授完全部内容大约需 48 学时，时间不足时，可根据需要作适当的删减。

在编写本书过程中，我们力求贯彻少而精和理论联系实际的原则，在内容的叙述上，采用由简单到复杂，由特殊到一般的叙述方法，在具体分析的基础上再上升到一般的方法和理论，力求准确、简明、通俗易懂、重点突出。着重介绍一些在计算机上常用于解决各类数学问题的计算方法，对一些重要的算法都配有 N-S 图和 FORTRAN 程序。

本书共分七章，第一章由荀列红编写，第二、三章由曹建胜编写，第四、六、七章由吴爱弟编写，第五章由李学春编写，并由李学春统编、定稿。

本书的编写得到了黄金奎副教授的大力支持与帮助，王子亭副教授仔细审阅了全书，在此一并致谢。

限于我们的水平，本书难免有不妥之处，恳请读者和同行给予批评指正。

编　者

1998.1

# 目　录

# 第一章 绪　论

## §1 计算方法的任务与特点

在工程技术和自然科学领域中，对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。一般来说，要想找出各种数学问题的精确解是很困难的；即使有些问题能求出它们的精确解，但是计算过程繁琐，工作量大。因此我们有必要讨论求解各种数学问题近似解的方法。近似解又称为数值解。计算方法就是研究数学问题的数值解及其理论的一个数学分支，它又称为计算数学、数值数学。

数值计算的运算量很大，在电子计算机出现以前，人们往往回避复杂的计算，致使计算方法发展缓慢，实际中许多问题无法解决。自从电子计算机诞生以来，计算数学迅速发展，为解决各种工程实际中的科学计算问题开辟了广阔的前景。众所周知，计算机具有极高的运算速度，但它只能根据人们给定的指令，完成加、减、乘、除等算术运算和一些逻辑运算。因此，要使用计算机来求解数值解，必须把求解过程归结为按一定规则进行一系列四则运算和逻辑运算。把对数学问题的解法归结为加、减、乘、除等基本运算，并规定明确的运算顺序和完整的计算方案，称为数值算法或简称算法。计算方法的主要任务就是以数学问题为对象，研究各种数值算法及有关理论知识。

求解一个数学问题可以采用不同的算法，每种算法都有自己的特点及适用范围。衡量一个算法的优劣可以根据运算量、存贮量、收敛速度及误差大小等因素来确定。通常还要根据数学问题的实际背景来考虑。数学问题的数值解与精确解之间一般会有误差，

研究数值解必须先讨论有关误差的知识，下面就给予介绍。

## §2 误差知识

### 一、误差的来源

引起误差的原因是多方面的，但主要来源有以下几个方面。

1. 模型误差

描述实际问题的数学模型，总是在一定条件下忽略了次要因素而抓住主要因素并加以描述而建立的模型，它是一种理想化了的数学描述，数学模型与实际问题之间存在的误差，称为模型误差。

2. 观测误差

在给出的数学模型中一般包含若干个参数，它们的值往往通过观测得到，而观测难免有误差，这种误差称为观测误差。

3. 截断误差

在计算中常常遇到只有通过无限过程才能得到精确解的情况，但在实际计算中人们只能进行有限次的运算，用有限次运算求得的结果来近似代替通过无限次运算得到的结果，由此产生的误差称为截断误差或方法误差。例如用收敛的无穷级数的部分和来替代无穷级数，由此产生的误差就是截断误差。

4. 舍入误差

在计算过程中的数据可能位数很多，也可能是无穷小数，计算时只能对较少位的有限位数进行计算，因而常用位数较少的有限小数代替位数较多的有限小数。例如用 3.141 6 代替 $\pi$，用 1.414 代替 $\sqrt{2}$ 等等，由此产生的误差称为舍入误差。

由于计算方法是研究数学问题的数值解法，所以不讨论前两种误差，只讨论截断误差和舍入误差。

### 二、绝对误差与相对误差

1. 绝对误差与绝对误差限

**定义 1** 设 $x$ 是一个准确值，$x^*$ 是它的近似值。称

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

为近似值 $x^*$ 的绝对误差，简称误差。

实际上准确值 $x$ 常常无法得到，因而无法求出绝对误差，一般只能估计出 $e^*$ 的范围，即

$$|e^*| = |x^* - x| \leqslant \varepsilon^*$$

我们称 $\varepsilon^*$ 是近似值 $x^*$ 的绝对误差限，简称为误差限。有了误差限 $\varepsilon^*$，就能知道准确值 $x$ 的范围。

$$x^* - \varepsilon^* \leqslant x \leqslant x^* + \varepsilon^*$$

在工程上常用

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

表示这个范围。

误差限 $\varepsilon^*$ 越小，表示 $x^*$ 越靠近 $x$，计算结果越准确。但是误差限的大小不能完全刻画近似值的准确程度。例如有甲乙两人测量不同地方的水深。甲所在处水深 100 米，他测得 99.8 米，乙所在处水深 10 米，他测得 9.9 米，绝对误差分别为 0.2 米和 0.1 米，就绝对误差而言，甲是乙的两倍，但是这并不意味着乙测量得准确。因为甲测量 100 米有 0.2 米的误差，误差所占比例为 0.2%，而乙误差所占比例为 1%，显然应该说甲测量得要准确些。因此刻画近似值的准确程度，不仅要看绝对误差的大小，还要看近似数本身的大小。为此我们引入相对误差的概念。

2. 相对误差与相对误差限

**定义 2** 设 $x^*$ 为准确值 $x$ 的一个近似值，称

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

为近似值 $x^*$ 的相对误差。

在实际计算时，由于准确值 $x$ 无法求得，常将相对误差取作

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

相对误差常常无法得到，只能估计出它的大小范围。如果有正数 $\varepsilon_r^*$，使

$$|e_r^*| = |\frac{e^*}{x^*}| \leqslant \varepsilon_r^*$$

则称 $\varepsilon_r^*$ 为近似值 $x^*$ 的相对误差限。

### 三、有效数字

在工程上把数 $x$ 表示为 $x^* \pm \varepsilon^*$，由此可以知道近似值 $\varepsilon^*$ 的准确程度。可是这种表示方法太麻烦，我们希望能由近似值 $x^*$ 本身看出其误差的大小，为此引入有效数字的概念。采用有效数字表示近似数时，根据 $x^*$ 的有效数位就能知道近似值 $x^*$ 的准确程度。

1．有效数字的定义

**定义 3** 设 $x^*$ 为 $x$ 的近似值，$x^*$ 的标准形式为

$$x^* = \pm 10^m \times 0.x_1x_2\cdots x_n\cdots x_l$$

其中 $m$ 为整数，$x_1 \neq 0$，$x_1, x_2, \cdots, x_l$ 为 0 到 9 之间的某一整数。如果

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

则称 $x^*$ 具有 $n$ 位有效数字，$x_1, x_2, \cdots, x_n$ 为 $x^*$ 的有效数字。

例如用 $x^* = 10^1 \times 0.142\ 85$ 近似表示 $x = 10^1 \times 0.142\ 857\ 14$ 时，由于 $|x^* - x| < 0.000\ 08 < \frac{1}{2} \times 10^{-3} = \frac{1}{2} \times 10^{1-4}$，所以 $n=4$，$x^*$ 有四位有效数字，它们是 1，4，2，8。

根据有效数字的定义，如果

$$x^* = \pm x_1x_2\cdots x_m.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_k\cdots\alpha_l \quad (x_1 \neq 0)$$

并且 $|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-k}$，则 $x^*$ 有 $m+k$ 位有效数字，它们是 $x_1$，$x_2, \cdots, x_m, \alpha_1, \cdots, \alpha_k$，即小数点后第 $k$ 位直到这个数的最左边的非零数字之间的所有数字都是有效数字，这时又称 $x^*$ 准确到小数点

后第 $k$ 位。

如果

$$x^* = \pm 0.00\cdots 0\ \alpha_{s+1}\cdots\alpha_k\cdots\alpha_l \quad (\alpha_{s+1}\neq 0)$$

并且 $|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-k}$,则 $x^*$ 有 $k-s$ 位有效数字,它们是 $\alpha_{s+1}$, $\cdots$, $\alpha_k$。$x^*$ 准确到小数点后第 $k$ 位。

近似数 $x^*$ 的有效数位与它的绝对误差密切相关。有效数位越多,误差越小;误差越小,有效数位越多。$x^*$ 的所有数位上的数不一定都是有效数字。

**例 1** 下面各式中,$x^*$ 作为 $x$ 的近似值,有几位有效数字?

(1)$x=0.986\ 32$,$x^*=0.98$;

(2)$x=\pi=3.141\ 592\ 65\cdots$,$x^*=3.141\ 6$;

(3)$x=10^{-2}\times 0.546\ 8$,$x^*=10^{-2}\times 0.546$。

**解** (1) $|x^*-x|=0.006\ 32<\frac{1}{2}\times 10^{-1}$

$k=1$,$x^*$ 准确到小数点后第一位,有一位有效数字 9;

(2) $|x^*-x|<\frac{1}{2}\times 10^{-4}$

$k=4$,$x^*$ 准确到小数点后第四位,有五位有效数字 3,1,4,1,6;

(3) $|x^*-x|=10^{-2}\times 0.000\ 8<\frac{1}{2}\times 10^{-4}$ $(m=-2)$

$n=2$,则 $x^*$ 具有两位有效数字 5,4。

近似值 $x^*$ 的所有数位上的数不一定都是有效数字,但是如果 $x^*$ 是 $x$ 经过"四舍五入"的方式得到的近似值,可以证明:从 $x^*$ 被保留的最后一位起直到 $x^*$ 最左边的非零数字之间的所有数字都是有效数字。

**例 2** 对下面各数写出具有 5 位有效数字的近似值。

236.478,0.002 347 11,9.000 024,9.000 034$\times 10^3$

**解** 按照"四舍五入"的原则,可以得到上面各数据有 5 位有效数字的近似值,分别是

236.48，0.002 347 1，9.000 0，9.000 0×$10^3$

注意：$x^*=9.0000$ 与 9 不同，9.000 0 具有五位有效数字，误差 $|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4}$；而 9 具有一位有效数字，若取 $x^*=9$，则 $|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}$。

如果 $x^*$ 是经过"四舍五入"得到的，则从 $x^*$ 本身就能知道它有几位有效数字，从而也可以确定出它的误差限。若

$$x^*=\pm10^m\times0.x_1x_2\cdots x_n\quad(x_1\neq0)$$

则 $x^*$ 具有 $n$ 位有效数字，且绝对误差限 $|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n}$；若

$$x^*=\pm x_1x_2\cdots x_m.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_k\quad(x_1\neq0)$$

则 $x^*$ 具有 $m+k$ 位有效数字，准确到小数点后第 $k$ 位，且绝对误差限为 $|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-k}$；若

$$x^*=\pm0.00\cdots0\,\alpha_{s+1}\cdots\alpha_k\quad(\alpha_{s+1}\neq0)$$

则 $x^*$ 具有 $k-s$ 位有效数字，准确到小数点后第 $k$ 位，绝对误差限为 $|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-k}$。

**例 3** 下面各数是经过"四舍五入"得到的近似值，试问它们各有几位有效数字？误差限是多少？

$-3.1433$，0.010 05，$6\times10^3$，$2\times10^{-3}$

**解** $-3.1433$ 具有五位有效数字，它们为 3，1，4，3，3；误差限为 $\frac{1}{2}\times10^{-4}$。

0.010 05 具有四位有效数字，它们为 1，0，0，5；误差限为 $\frac{1}{2}\times10^{-5}$。

$6\times10^3$ 具有一位有效数字，误差限为 $\frac{1}{2}\times10^3$。

$2\times10^{-3}$ 也具有一位有效数字，误差限为 $\frac{1}{2}\times10^{-3}$。

2. 有效数字与相对误差的关系

设近似数 $x^*=\pm 10^m\times 0.x_1x_2\cdots x_n\cdots x_l$ $(x_1\neq 0)$具有 $n$ 位有效数字,绝对误差限 $|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{m-n}$,

$$|x^*|=10^m\times 0.x_1x_2\cdots x_n\cdots x_l=10^{m-1}\times x_1.x_2\cdots x_n\cdots x_l$$

由于

$$x_1\leqslant x_1.x_2\cdots x_n\cdots x_l\leqslant x_1+1$$

$$x_1\times 10^{m-1}\leqslant|x^*|\leqslant(x_1+1)\times 10^{m-1}$$

所以相对误差限为

$$|e_r^*|=\left|\frac{x^*-x}{x^*}\right|\leqslant\frac{1}{2x_1}\times 10^{-(n-1)}$$

因此,有效数位 $n$ 越大,相对误差就越小。为了减小误差,我们保留的数位应该多一些。但数位太多,给计算带来困难,所以我们应该根据实际问题的需要,选择合适的有效位数。

## 四、数据误差的影响

数值运算中由于原始数据有误差,必然引起函数值的误差,要对这种数据误差进行准确的估计是很困难的。一般采用泰勒展开的方法来估计误差。以二元函数 $y=f(x_1,x_2)$为例加以说明。

设 $x_1^*$、$x_2^*$ 分别为 $x_1$、$x_2$ 的近似值,则 $y=f(x_1,x_2)$的近似值为 $y^*=f(x_1^*,x_2^*)$,误差

$$e^*(y)=y^*-y=f(x_1^*,x_2^*)-f(x_1,x_2)$$

假设 $y=f(x_1,x_2)$在点$(x_1^*,x_2^*)$可微,将 $y=f(x_1,x_2)$在点$(x_1^*,x_2^*)$处展开,并取一次项,得:

$$f(x_1,x_2)\approx f(x_1^*,x_2^*)+\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)_{(x_1^*,x_2^*)}\cdot(x_1-x_1^*)$$
$$+\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)_{(x_1^*,x_2^*)}\cdot(x_2-x_2^*)$$

从而数据误差

$$e^*(y)=y^*-y$$

$$\approx\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)_{(x_1^*,x_2^*)}(x_1^*-x_1)+\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)_{(x_1^*,x_2^*)}(x_2^*-x_2)$$

$$=\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)_{(x_1^*,x_2^*)}e_1^*+\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)_{(x_1^*,x_2^*)}e_2^*$$

其中 $e_1^*=x_1^*-x_1$，$e_2^*=x_2^*-x_2$。

$y^*$ 的相对误差为

$$e_r^*(y)=\frac{e^*(y)}{y^*}$$

$$\approx\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)_{(x_1^*,x_2^*)}\frac{x_1^*e_r^*(x_1)}{y^*}+\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)_{(x_1^*,x_2^*)}\frac{x_2^*e_r^*(x_2)}{y^*}$$

其中 $e_r^*(x_i)$ 为 $x_i^*(i=1,2)$ 的相对误差。

给出 $f$ 的具体形式，利用上面两个公式就可以估计二元函数的误差；多元函数可以类似地估计。特别地，利用函数值的误差估计，可以得到两数和、积、商的误差估计。

**例 4** 要计算一个圆柱形水槽的体积，测得底半径为 4.35 米，高为 6.28 米。若已知误差限都为 0.005 米，试求体积的绝对误差和相对误差限。

**解** 设水槽底半径为 $r$，高为 $h$，则体积

$$V=\pi r^2h$$

已知 $r^*=4.35$，$h^*=6.28$，$|r^*-r|=|h^*-h|\leqslant 0.005$，则体积的绝对误差

$$\begin{aligned}|V^*-V|&=\left|\left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_{(r^*,h^*)}(r^*-r)+\left(\frac{\partial V}{\partial h}\right)_{(r^*,h^*)}(h^*-h)\right|\\&\leqslant\left|\left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_{(r^*,h^*)}\right||r^*-r|+\left|\left(\frac{\partial V}{\partial h}\right)_{(r^*,h^*)}\right||h^*-h|\\&=2\pi r^*h^*\cdot|r^*-r|+\pi(r^*)^2|h^*-h|\\&=\pi r^*(2h^*+r^*)|h^*-h|\\&\leqslant 1.155\end{aligned}$$

相对误差限为

$$|e_r^*(V)|=\left|\frac{e^*(V)}{V^*}\right|\leqslant\frac{1.155}{373.326}\approx 0.003$$

## §3 数值计算中应注意的几个问题

求解一个数学问题往往有多种算法。用不同的算法计算的结果其精度不同，运算量也不同。人们自然希望选用一种运算量少且精度高的算法，但是在一般情况下无法确定哪种算法更优，我们只能指出选用算法的若干注意事项。

1. 尽量避免两个相近的数相减

设 $y=a-x$，$x$ 的近似值为 $x^*$，$a$ 为准确值，$y^*=a-x^*$，$y^*$ 的相对误差

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

当 $x^*$ 与 $a$ 很接近时，$|x^*-a|$ 很小，从而相对误差很大，有效数字将大为减少。为了提高精度，应当避免两个相近的数相减。通常的做法是通过改变原来算式的方法来改善精度。例如：

当 $x$ 很大时，改变算式 $\frac{1}{x}-\frac{1}{x+1}=\frac{1}{x(x+1)}$；

当 $x$ 很大时，改变算式 $\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{1+x}+\sqrt{x}}$；

当 $x_1,x_2$ 很接近时，改变 $\lg x_1-\lg x_2=\lg\frac{x_1}{x_2}$ 等等。

2. 简化运算步骤，减少运算次数

简化运算步骤，减少运算次数，既可以提高运算速度，又可以降低运算中的积累误差。

例如计算多项式函数

$$p_n(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0$$

在点 $x$ 的值，如果先计算 $a_kx^k$ 然后再相加，共需要 $\frac{n(n+1)}{2}$ 次乘法和 $n$ 次加法。如果将 $p_n(x)$ 写成

$$p_n(x)=(\cdots((a_nx+a_{n-1})x+a_{n-2})x+\cdots+a_1)x+a_0$$

的形式，先计算 $a_n x+a_{n-1}$，然后再计算 $(a_n x+a_{n-1})x+a_{n-2}$，如此下去，只要 $n$ 次乘法和 $n$ 次加法就可以计算出 $p_n(x)$ 的值。即计算 $p_n(x)$ 可以按照下列递推算法（称为秦九韶算法）来计算。

$$\begin{cases} u_n=a_n \\ u_k=xu_{k+1}+a_k \quad (k=n-1,n-2,\cdots,1,0) \\ p_n(x)=u_0 \end{cases}$$

3. 要防止大数“吃掉”小数

在数值运算中参加运算的数有时数量级相差很大，而计算机的数位有限，如不注意运算次序就可能发生大数“吃掉”小数的现象，从而使舍入误差很大，计算结果严重失真。

例如要在尾数为 5 位的浮点计算机上计算：

$A=10^5\times 0.342\,15+10^5\times 0.000\,01+10^5\times 0.000\,01+\cdots$
$+10^5\times 0.000\,01$（共 101 项）

若不注意计算方式，直接计算，计算机把后面的 $10^5\times 0.000\,01$ 全取成 $10^5\times 0.000\,0$（机器零），计算结果为 $A=10^5\times 0.342\,15$，显然结果不可靠。为了避免这种情况发生，我们可以先算后面 100 个小的数之和。为了防止出现“机器零”，也可以给每个数乘以一个大的因子，例如乘以 10，然后求出

$B=10^5\times 0.000\,1+10^5\times 0.000\,1+\cdots+10^5\times 0.000\,1$（100 项）$=10^5\times 0.010\,0$

最后计算 $A$

$A=10^5\times 0.342\,15+B/10=10^5\times 0.343\,15$

4. 选用数值稳定性好的算法

例如要计算积分

$$I_n=\int_0^1 x^n e^{x-1}dx \quad (n=0,1,2,\cdots)$$

一般我们采用下面的递推算法（Ⅰ）：

$$\begin{cases} I_0=1-e^{-1} \\ I_n=1-nI_{n-1} \end{cases}$$

在计算时，若取初始值 $I_0$ 的近似值 $I_0^*=0.6321$ 代替 $I_0$，得到 $I_n$ 的近似值 $I_n^*$，如表 1-1 中所示。记

$$|I_0^*-I_0|=\delta$$

计算 $I_n^*$ 采用的公式是 $I_n^*=1-nI_{n-1}^*$，则

$$|I_n^*-I_n|=|-n(I_{n-1}^*-I_{n-1})|=n!\ |I_0^*-I_0|=n!\ \delta$$

由此可见，当初始值有误差 $\delta$ 时，计算 $I_n$ 时产生的误差为 $n!\,\delta$。当 $n$ 较大时，$n!\,\delta$ 很大，从而 $|I_n^*-I_n|$ 很大，计算结果严重失真。我们把这种初始值有小的舍入误差而引起计算结果有大的误差的算法称为是数值不稳定的，否则称为是数值稳定的。

在计算过程中，我们总希望计算结果误差小，因此要采用数值稳定性好的算法。

上面的例题，可以用下面算法（Ⅱ）：

$$I_{n-1}=\frac{1}{n}(1-I_n)$$

给定 $I_n$ 的一个粗略估计值 $I_n^*$，设

$$|I_n^*-I_n|=\delta_1$$

则

$$|I_{n-1}^*-I_{n-1}|=\frac{1}{n}\delta_1$$

$$\vdots$$

$$|I_1^*-I_1|=\frac{1}{n!}\delta_1$$

随着计算次数的增加，误差越来越小，算法（Ⅱ）是数值稳定的。两种算法计算结果如表 1-1。