● 姜佩仁 王新民 主编

地学中的近代计算方法

吉林大学出版社

前　　　言

随着现代科学技术的蓬勃发展和我国“四化”建设的突飞猛进，属于高精尖的计算机科学技术在各科技领域的应用中，愈加不断地普及和深入。地质科学作为自然科学的一个重要分支，对计算机技术的应用，已成为它现代化的一个重要标志。

随着地质科学对计算机技术的广泛而深入地应用，对计算机软件所使用的数学方法，提出了更高、更迫切的要求。作为培养高级地质人才的高等学府，当然要开设这门课程。我们编写本书的目的，就是要为高等地质院校各专业的本科生提供一本教材，同时，本书也可供研究生和地质工程技术人员作参考书使用。

本书是在长春地质学院有关课程多年教学实践的基础上编写而成的。内容选材既注意基础知识，又注意了跟踪本学科发展的“前沿”；既注意了普遍性，又注意了针对性。内容编排合理，便于教学，适于自学。

本书第一章、第二章、第三章后五节、第七章后二节由姜佩仁主笔。第三章前五节、第六章和第七章前三节由王新民主笔。第四章由李淑芹主笔。第五章由韩生主笔。本书各章插图由姜志强用计算机绘制。韩生对全稿的文字、符号等作了统一加工。

本书由杨天行教授主审，田树槐副教授、姜立芝副教授任副主审。本书在编写过程中，得到了长春地质学院教务处、教材科和基础科学系等有关部门领导的大力支持。在此，谨对上述各位领导和同事，致以诚挚的谢意。

书中如有不当之处，恳请读者批评指正。

编著者

1993年5月10日

于地质宫

目　　录

第一章　误差的基本知识

任何一门科学技术，不仅需要定性描述，而且更需要定量计算。定量计算，是现代科学技术中不可缺少的一大方面。要计算，就涉及到两个问题：一要有好的计算机；二要有好的计算方法。后者正是本课程所要研究的课题。

所谓好的计算方法，应该具备以下条件：

1．公式的精确度高，数值稳定性好，即计算的结果误差要小。

2．算法的逻辑结构简单，容易编制计算程序。

3．计算量小，省机时。用计算机作四则运算时，加减操作所花的机时，比相同次数的乘除操作所花的机时少得多，故一般情况下，只用乘除法的次数来估计机时。

4．所需要的存贮量小。

由此看来，误差问题是计算方法的首要问题，是衡量计算方法好坏的重要依据。没有误差估计的算法，人们是不敢用的。因此，作为本书的第一章，我们要介绍一些关于误差的基本知识。

§1　误差的来源

在数值计算过程中，误差是不可避免的。它主要来自以下几个方面：

1．　描述误差　我们在解决实际问题时，总是先建立一个数学模型，而数学模型的建立，往往总要附加许多限制条件，忽略一些次要因素。这样建立的“理想化”的数学模型，与实际问题之间存在着一定的误差。这种误差就称为描述误差或模型误差。

2. 观测误差 在各种计算公式中，往往要包含一些参数，例如时间、距离等等。这些参数一般都是由实验或观测得到的，而由于仪器、方法或读数等方面存在误差，因此测得的参数值必然存在误差。这种误差称为观测误差。

3. 截断误差 许多数学运算，如微分、积分、无穷级数求和等，是通过极限过程来定义的，然而计算机只能完成有限次的算术运算及逻辑运算，因此，就需要将某种无限过程加以"截断"。这样产生的误差，称为截断误差，又称为构造误差、方法误差或公式误差。

4. 舍入误差 在计算过程中，由于电子计算机的位数（称为字长）是一定的，因此，往往要将无限小数变为有限小数，将位数较多的数变为位数较少的数，即要进行四舍五入。这样产生的误差，称为舍入误差。

由上所述，在计算过程中，总要产生这样或那样的误差，因此，误差是不可避免的，绝对精确的数是不存在的，关键是要注意构造或选择较好的计算公式，有效地控制误差的"泛滥"，得到满足一定精度要求的结果。

§2 近似数的误差估计

既然在数值计算过程中，误差是不可避免的，那么，对近似数的误差估计就很必要了。下面，我们介绍近似数的误差估计的两种方法。

2.1 绝对误差与相对误差

定义 1 若x^*是真值x的一个近似值，则称

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

为x^*的绝对误差。

注意，e^*可正可负。当e^*为正时，x^*为x的一个过剩近似值；当e^*为负时，x^*为x的一个不足近似值。

近似数x^*的绝对误差看起来很直观，但有时不能确切地反映出某种测量的精确程度。例如，当我们测量 100 米的距离时，产生的绝对误差是 1 米，而当测量1000米的距离时，产生的绝对误差是 5 米，那么，这两次测量哪一次比较精确呢？表面上看，好像第二次的测量误差比较大，但实际上恰好相反。比较科学的对比方法，就是要考虑在两次测量当中，平均每测量 1 米能产生多大的误差，即有

第一次测量每米产生误差$\frac{1}{100}$

第二次测量每米产生误差$\frac{1}{1000}=\frac{0.5}{100}$

可见，还是第二次的测量结果比较精确。于是，又有相对误差的定义。

定义 2 若x^*是真值x的一个近似值，则称

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

为x^*的相对误差。

在实际计算中，真值x总是不知道的，故通常将

$$e_r^*=\frac{x^*-x}{x^*} \tag*{(1.2)$'$}$$

作为x^*的相对误差

2.2 估差公式与误差限

一个近似数x^*的误差（绝对误差或相对误差）可正可负，并且由于真值总是不知道的，因此，无法按公式（1.1）或（1.2）、（1.2）′来计算x^*的误差，而只能去估计误差的范围，一般去估计误差的绝对值的上界，于是，有下面的定义。

定义 3 若一个正数ε^*或ε_r^*分别为近似数x^*的绝对误差或相对误差的绝对值的上界，即

$$|x^*-x|\leqslant\varepsilon^* \tag{1.3}$$

或：

$$\left|\frac{x^*-x}{x^*}\right| \leqslant \varepsilon_r^*; \tag{1.4}$$

则称ε^*为x^*的绝对误差限，称ε_r^*为x^*的相对误差限，称（1.3）、（1.4）为近似数x^*的估差公式。

注意，这里误差限总是一个正数

例 1 估计近似数$x^*=0.0025$的误差。

首先估计其绝对误差。因为 0.0025 可能是由 0.00254 或 0.00245（当然，其第五位小数上的数字可能比 4 还小或比 5 还大）经过四舍五入后而得到的，故它的绝对误差的绝对值不超过5×10^{-5}，或写成0.5×10^{-4}，一般又写成$\frac{1}{2}\times10^{-4}$，于是，这里有

$$|x^*-x| \leqslant \frac{1}{2}\times10^{-4}$$

式中$x^*=0.0025$，x为其真值。注意，这里$\varepsilon^*=\frac{1}{2}\times10^{-4}$就是近似数$x^*=0.0025$的绝对误差限，它是小数点后第 4 位上的半个单位。

估计x^*的相对误差。由公式（1.4），有

$$\left|\frac{x^*-x}{x^*}\right| \leqslant \frac{\frac{1}{2}\times10^{-4}}{0.0025} = 2\%$$

2.3 有效数字与误差估计

在估计近似数的误差时，又引出了有效数字的概念。

定义 1 若近似数x^*的绝对误差限是某一位上的半个单位，且该位直到x^*的第一位非零数字一共有n位，则称此近似数x^*有n位有效数字，或说精确到该位。

例 2 判定下列近似数x^*各有多少位有效数字：

（1）$x^*=0.0025$。

前面已知道，它的绝对误差限$\varepsilon^*=\frac{1}{2}\times10^{-4}$，即为小数点后第 4 位上的半个单位，而从该位起，直到x^*的第一位不为零的数字 2 为止，共有 2 位数，故称近似数$x^*=0.0025$具有 2 位有效数

字。

（2）$x^*=3.054$。

经四舍五入所产生的绝对误差限为$\varepsilon^*=\frac{1}{2}\times10^{-3}$，它是小数点后第3位上的半个单位，而从该位起，直到x^*的第一位非零数字3为止，共有4位数，故称近似数$x^*=3.054$具有4位有效数字。

近似数$x^*=0.0025$又可以写成

$$0.0025=0.25\times10^{-2}$$
$$=(2\times10^{-1}+5\times10^{-2})\times10^{-2}$$

它的绝对误差的估计公式又可写成

$$|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-2-2}$$

一般地，经过四舍五入后得到的一个近似数x^*，可以表示成

$$x^*=\pm0.x_1x_2\cdots x_n\times10^m$$
$$=\pm(x_1\times10^{-1}+x_2\times10^{-2}+\cdots+x_n\times10^{-n})\times10^m \tag{1.5}$$

其中x_1，x_2，…，x_n都是0，1，…，9这十个数字中的任何一个，且$x_1\neq0$；n是正整数，m是整数，则有x^*的估差公式

$$|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n} \tag{1.6}$$

这样，又引出了有效数字的另一个定义。

定义 2 用（1.5）式表示的x的一个近似数x^*，其若有估差公式（1.6）成立，则称x^*具有n位有效数字。

例 3 判定下列近似数x^*各有多少位有效数字：

（1）$x^*=3.054=0.3054\times10^1$

$$=(3\times10^{-1}+0\times10^{-2}+5\times10^{-3}+4\times10^{-4})\times10^1,$$

其绝对误差的估计公式为

$$|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}=\frac{1}{2}\times10^{1-4}$$

故此x^*具有4位有效数字。

（2）$x^* = 30.54 = 0.3054 \times 10^2$

$$= (3 \times 10^{-1} + 0 \times 10^{-2} + 5 \times 10^{-3} + 4 \times 10^{-4}) \times 10^2$$

其绝对误差的估计公式为

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \frac{1}{2} \times 10^{2-4}$$

故此x^*仍具有 4 位有效数字。

（3）$x^* = 0.03 = 0.3 \times 10^{-1}$

$$= (3 \times 10^{-1}) \times 10^{-1}$$

其绝对误差的估计公式为

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

故此x^*具有 1 位有效数字。

（4）$x^* = 0.0300 = 0.300 \times 10^{-1}$

$$= (3 \times 10^{-1} + 0 \times 10^{-2} + 0 \times 10^{-3}) \times 10^{-1}$$

其绝对误差的估计公式为

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-4} = \frac{1}{2} \times 10^{-1-3}$$

故此x^*具有 3 位有效数字。

注意，上例中的各近似数x^*的绝对误差限是根据各x^*的小数点后保留的位数写出来的，而变成等号右端的形式，则是根据x^*的（1.5）形式的表达式来确定的。

从上例中我们看出，两个不同的近似数，可能有相同的绝对误差限，如（2）与（3）中的两个近似数x^*，它们的绝对误差限都是$\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$，但是，由于它们的（1.5）形式的表达式不同，故$\varepsilon^*$变化后的形式也就不同，（2）中的$\varepsilon^*$变为$\frac{1}{2} \times 10^{2-4}$，（3）中的$\varepsilon^*$变为$\frac{1}{2} \times 10^{-1-1}$，故它们所具有的有效数字的位数也就不同。

从上例中我们还可以看出，两个不同的近似数，如（1）与（2）中的近似数3.054与30.54，虽然它们的绝对误差限不同，一个是$\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$，一个是$\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$，但由它们的变化后的$\varepsilon^*$的形式看出，它们所具有的有效数字的位数却是相同的。

总之，要判定一个近似数有多少位有效数字，首先要根据近似数x^*所保留的小数位数，来确定x^*的绝对误差限，然后再根据定义 1 或定义 2 来判定x^*的有效数字的位数。要根据定义 2 来判定x^*的有效数字的位数时，尚需将x^*表示成（1.5）式的形式，并将绝对误差限ε^*变成（1.6）式中的形式，然后才能判定。

另外，值得注意的是，近似数的小数点后面的零，不能随便省去。如例 3 中的0.03与0.0300，前者精确到0.01，有 1 位有效数字，后者精确到0.0001，有 3 位有效数字。可见，它们的近似程度完全不同。

下面我们介绍近似数的有效数字与其误差估计的关系。

首先，从（1.6）式可以看出，在m相同的情况下，n越大，绝对误差限ε^*就越小，即有效位数越多，近似数就越精确。

其次，再介绍有效数字与相对误差限的关系。由（1.5）式可知，一个具有 n 位有效数字的近似数x^*（其真值为x），有

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

再由（1.6）式，有

$$\left|\frac{x^* - x}{x^*}\right| \leqslant \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{x_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)} \qquad (1.7)$$

这就是说，只要知道近似数x^*的有效数字的位数 n 及其最左边的第一位非零数字x_1，就可以根据公式（1.7）写出 x^* 的相对误差限。

注意，若近似数x^*具有 n 位有效数字，则（1.7）式成立；反之，若（1.7）式成立，则不能说明x^*一定具有n位有效数字。但我们可以证明，若近似数x^*的相对误差限满足关系式

$$\varepsilon_r^* = \frac{1}{2(x_1+1)} \times 10^{-(n-1)} \qquad (1.8)$$

时，则x^*至少有 n 位有效数字。事实上，由于

$$|x^* - x| \leqslant |x^*| \cdot \varepsilon_r^* = |x^*| \cdot \frac{1}{2(x_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

且$|x^*|\leqslant(x_1+1)\times10^{m-1}$，故有

$$|x^*-x|\leqslant(x_1+1)\times10^{m-1}\cdot\frac{1}{2(x_1+1)}\times10^{-(n-1)}$$

$$=\frac{1}{2}\times10^{m-n}$$

于是，由定义 2 可知，近似数x^*具有 n 位有效数字。

由（1.7）式可知，一个近似数 x^* 的有效数字的位数 n 越大，则其相对误差限也就越小。

总之，由（1.6）、（1.7）式可知，一个近似数x^*具有多少位有效数字，直接反映了它的精确程度。有效数字的位数越多，该近似数的近似程度就越高，越精确。

例 4 已知$\pi=3.1415926\cdots$，要使其近似值x^*的相对误差限小于0.1%，应取多少位有效数字？

若取x^*有 n 位有效数字，则由（1.7）式，有

$$\left|\frac{x^*-\pi}{x^*}\right|\leqslant\frac{1}{2x_1}\times10^{-n+1}$$

这里，$x_1=3$。显然，只要取 $n=4$，就有

$$\varepsilon_r^*=\frac{1}{6}\times10^{-3}<10^{-3}=0.1\%$$

于是，取得π的一个近似值为$x^*=3.142$。

§3 和、差、积、商的误差估计

3.1 和、差、积、商的绝对误差的估计

设x^*、y^*分别是真值x、y的近似值，则$x^*\pm y^*$的绝对误差为

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

故有

$$|(x^*\pm y^*)-(x\pm y)|\leqslant|x^*-x|+|y^*-y| \tag{1.9}$$

或者

$$\varepsilon^*(x^*\pm y^*)=\varepsilon^*(x^*)+\varepsilon^*(y^*) \tag*{(1.9)′}$$