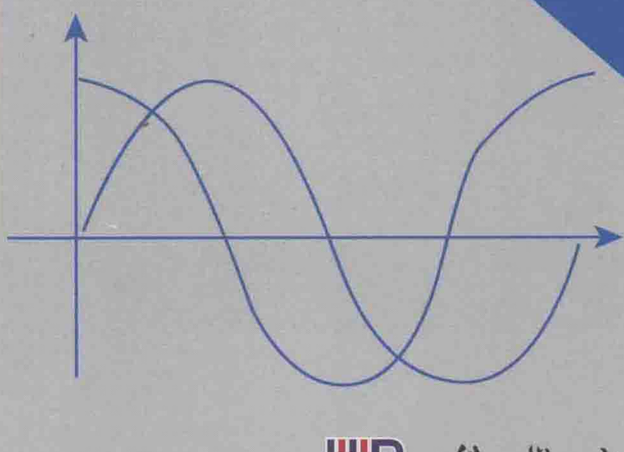
普通高等教育“十二五”规划教材

“211”数学类主干课改教材

计算方法

江世宏　编著



科学出版社

普通高等教育“十二五”规划教材
“211”数学类主干课改教材

计 算 方 法

江世宏 编著

科 学 出 版 社
北 京

内 容 简 介

本书将科学与工程计算软件 MATLAB 作为计算方法实现的平台和辅助计算方法学习的工具，介绍现代科学研究和工程技术中常用的数值计算方法. 全书共 7 章. 主要介绍经典的数值计算方法，包括绪论、插值法、曲线拟合的最小二乘法、数值积分、非线性方程求根、线性方程组的数值求解以及常微分方程初值问题的数值解法.

本书可作为高等学校理工科信息与计算科学专业、计算机专业本科生或工科各专业研究生"计算方法"、"科学计算"和"数值分析"等课程的教材与参考书，也可供广大科技工作者学习数值计算方法和了解 MATLAB 应用时参考.

图书在版编目（CIP）数据

计算方法 / 江世宏编著. —北京：科学出版社，2014.6
普通高等教育"十二五"规划教材. "211"数学类主干课改教材
ISBN 978-7-03-040680-4

I. ①计… II. ①江… III. ①计算方法–高等学校–教材 IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2014）第 102192 号

责任编辑：黄彩霞 孔晓慧 / 责任校对：胡小洁
责任印制：高　嵘 / 封面设计：蓝正

科 学 出 版 社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http：//www.sciencep.com

武汉市首壹印务有限公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
开本：787×1092 1/16
2014 年 6 月第 一 版 印张：13
2014 年 6 月第一次印刷 字数：304 000

定价：31.80 元

（如有印装质量问题，我社负责调换）

前　言

在经济高速发展的21世纪，随着科学与技术的进步，社会对人才的能力与素质的要求越来越高．现代科技工作者普遍认为，数学与科学计算、理论研究、科学实验并列为科学研究的三大支柱，计算机是不可缺少的工具．因此，现代科技人才必须具备四大能力，即数学与科学计算、理论研究、科学实验和计算机应用的能力．而现代科技人才要获得这四大能力，还必须具备四大素质，即创造、归纳、演绎和数学建模素质．

计算方法以数学理论为基础，研究各种数学问题的数值解法．它通过构建离散化数学模型，并将它转化成为适用于计算机求解的算法，通过编程计算其结果，然后分析计算结果的误差．可以说，计算方法这门课程的学习对于四大能力和四大素质的培养起到巨大作用．

在计算方法中，关于算法的误差分析、稳定性分析以及收敛性讨论，都需要运用数学理论知识，通过演绎推导出相关结论；关于舍入误差累积造成的影响、龙格现象发生与否、拟合模型的确定，都需要借助计算机做仿真实验，而实验设计对于创造、建模和编程素质的培养大有裨益；而对各种数学问题的求解公式，进行算法设计，会使归纳、演绎、建模素质得到训练与提高．可以毫不夸张地讲，计算方法是一门为培养科技人才四大能力与四大素质而量身定制的课程．

种植与养殖技术革命推动人类进入农业经济时代；蒸汽机与电气技术革命推动人类进入工业经济时代；而现阶段的信息技术革命，使人类步入知识经济时代．计算机被广泛地应用到各个领域，而在数学中的应用更是达到了前所未有的深度，数学已不再是一门单纯的基础理论科学，它正在成为一种关键且普遍适用的技术，而计算方法更是一种随时可能用上的实用技术．在人类社会即将步入“云计算”时代之际，掌握好计算技术显得更为必要．

本教材与其他教材相比较，有以下几个显著特点：

（1）将优秀的科学与工程计算软件 MATLAB 完全融入计算方法之中，使 MATLAB 既成为所有数值计算方法的一个实现平台，又成为辅助计算方法学习的一个工具．力求使计算方法学起来“易懂”，学完后“会算”．

（2）每章增加了 MATLAB 解题举例一节，精选了一些应用 MATLAB 解决计算方法问题的实例，希望学生通过这些实例的学习，能更深入地了解 MATLAB，更好地利用 MATLAB 来辅助计算方法的学习．每章增设了实验题，这些实验题内容包括：利用 MATLAB 设计实例，去解释计算方法中的某些概念、性质、结论和现象；用 MATLAB 编程实现所学到的算法．

（3）为提高学生编程能力，给出一些经典数值计算方法转化为算法的详细过程．

本教材的编写得到了国家级教学研究项目“现代教育技术在应用型人才培养数学教

学中的应用研究”(项目编号：FIB070335-A2-10)的支持，还得到了学校研究生精品课程建设的经费资助.

本书在编写过程中的主要参考资料一并在参考文献中列出，对这些专家教授给予本书的帮助，作者表示衷心的感谢. 鉴于作者的水平有限，疏漏与不妥之处在所难免，恳请专家和读者批评指正.

作 者

2013 年 11 月于武汉

目　　录

前言

第 1 章　绪论 ······ 1

1.1　计算方法的研究对象与特点 ······ 1

1.2　误差 ······ 3

1.2.1　绝对误差与绝对误差限 ······ 3

1.2.2　相对误差与相对误差限 ······ 3

1.2.3　有效数字 ······ 3

1.2.4　误差的传播 ······ 4

1.3　数值计算中应注意的一些原则 ······ 6

1.4　MATLAB 解题示例 ······ 8

习题 1 ······ 10

实验 1 ······ 11

第 2 章　插值法 ······ 12

2.1　插值多项式定义 ······ 12

2.2　插值多项式的存在唯一性与余项 ······ 13

2.3　拉格朗日插值多项式 ······ 14

2.4　牛顿插值多项式 ······ 16

2.4.1　差商的概念 ······ 16

2.4.2　差商性质 ······ 17

2.4.3　牛顿插值多项式及余项 ······ 18

2.5　埃尔米特插值多项式 ······ 20

2.5.1　埃尔米特插值多项式定义 ······ 20

2.5.2　埃尔米特插值多项式的构造 ······ 20

2.5.3　埃尔米特插值多项式的唯一性 ······ 21

2.5.4　余项 ······ 21

2.6　分段线性插值 ······ 23

2.6.1　龙格现象 ······ 23

2.6.2　分段线性插值 ······ 24

2.7　三次样条插值 ······ 25

2.7.1　三次样条插值函数的定义 ······ 25

2.7.2　确定三次样条插值函数的条件分析 ······ 25

2.7.3　三次样条插值函数的构建 ······ 25

2.7.4　三次样条插值函数的误差界与收敛性 ······ 27

2.8 MATLAB 解题举例 ······ 28
习题 2 ······ 34
实验 2 ······ 36
第 3 章 曲线拟合的最小二乘法 ······ 37
3.1 曲线拟合与最小二乘法 ······ 37
3.2 多项式拟合函数 ······ 40
3.3 用正交多项式作最小二乘拟合 ······ 41
3.4 矛盾方程组的最小二乘解 ······ 44
3.5 MATLAB 解题举例 ······ 46
习题 3 ······ 50
实验 3 ······ 51
第 4 章 数值积分 ······ 52
4.1 数值求积的基本思想 ······ 52
4.2 代数精度 ······ 54
4.3 插值型求积公式 ······ 55
4.4 牛顿-科茨公式 ······ 55
4.5 偶阶求积公式的代数精度 ······ 58
4.6 复化求积公式 ······ 58
4.6.1 梯形求积公式的余项 ······ 59
4.6.2 辛普森求积公式的余项 ······ 59
4.6.3 复化梯形求积公式 ······ 59
4.6.4 复化辛普森求积公式 ······ 60
4.6.5 S_n 与 T_n 的关系 ······ 61
4.7 复化梯形求积公式的递推化 ······ 62
4.7.1 梯形的递推化算法 ······ 62
4.7.2 误差的事后估计与补偿值 ······ 62
4.7.3 梯形递推化公式的实现算法 ······ 63
4.8 龙贝格算法 ······ 64
4.8.1 理查森外推加速法 ······ 64
4.8.2 龙贝格求积算法 ······ 66
4.9 高斯型求积公式 ······ 67
4.9.1 高斯型求积公式的定义 ······ 67
4.9.2 高斯型求积公式的求法 ······ 68
4.9.3 高斯点的特性 ······ 68
4.9.4 高斯型求积公式的余项 ······ 69
4.9.5 高斯型求积公式的稳定性 ······ 69
4.9.6 高斯-勒让德求积公式 ······ 70
4.10 MATLAB 解题举例 ······ 72

习题 4 …… 74
实验 4 …… 75
第 5 章　非线性方程求根 …… 77
5.1　根的隔离 …… 77
5.2　两分法 …… 78
5.3　迭代法 …… 80
5.3.1　迭代法的基本思想 …… 80
5.3.2　迭代法的几何意义 …… 80
5.3.3　迭代法的收敛性 …… 81
5.3.4　局部收敛性 …… 82
5.3.5　收敛速度 …… 82
5.3.6　迭代过程的加速 …… 83
5.4　牛顿法 …… 85
5.5　弦截法 …… 87
5.6　MATLAB 解题举例 …… 90
习题 5 …… 92
实验 5 …… 93
第 6 章　线性方程组的数值求解 …… 94
6.1　高斯顺序消去法 …… 94
6.1.1　高斯顺序消去法思想 …… 94
6.1.2　高斯顺序消去法与矩阵分解 …… 96
6.2　高斯列主元消去法 …… 101
6.3　高斯全主元消去法 …… 103
6.4　平方根法 …… 104
6.4.1　实对称正定矩阵的三角分解 …… 104
6.4.2　改进的平方根算法 …… 105
6.5　追赶法 …… 107
6.6　向量与矩阵范数 …… 108
6.6.1　向量范数 …… 108
6.6.2　向量范数的性质 …… 109
6.6.3　向量序列的收敛性 …… 110
6.6.4　矩阵范数及性质 …… 111
6.7　误差分析 …… 114
6.7.1　方程组的病态性 …… 114
6.7.2　矩阵的条件数 …… 115
6.8　迭代法 …… 116
6.8.1　迭代法与向量序列的敛散性 …… 116
6.8.2　矩阵序列的收敛性 …… 116

6.8.3 迭代法基本定理 …… 119
6.8.4 雅可比迭代法 …… 120
6.8.5 高斯-塞德尔迭代法 …… 121
6.8.6 雅可比迭代与高斯-塞德尔迭代的收敛定理 …… 123
6.9 MATLAB 解题举例 …… 124
习题 6 …… 127
实验 6 …… 129
第 7 章 常微分方程初值问题的数值解法 …… 131
7.1 微分方程数值解法 …… 131
7.2 欧拉公式 …… 131
7.2.1 显式欧拉公式 …… 131
7.2.2 显式欧拉公式的几何意义 …… 132
7.2.3 局部截断误差 …… 132
7.2.4 隐式欧拉公式 …… 133
7.2.5 梯形公式 …… 134
7.2.6 改进的欧拉公式 …… 135
7.3 龙格-库塔方法 …… 136
7.3.1 二阶龙格-库塔公式 …… 136
7.3.2 四阶龙格-库塔公式 …… 138
7.4 单步法的收敛性 …… 138
7.5 单步法的稳定性 …… 140
7.6 线性多步法 …… 143
7.6.1 线性多步法的一般公式 …… 143
7.6.2 线性多步公式的构造 …… 143
7.6.3 四阶亚当斯显式公式 …… 144
7.6.4 四阶亚当斯隐式公式 …… 145
7.6.5 亚当斯预校系统 …… 146
7.6.6 改进的亚当斯预校系统 …… 146
7.7 MATLAB 解题举例 …… 147
习题 7 …… 152
实验 7 …… 153
部分习题答案 …… 155
实验题参考解答 …… 161
参考文献 …… 197

第 1 章　绪　　论

1.1　计算方法的研究对象与特点

为了阐明计算方法的研究对象与特点，我们来考察两个例子.

例 1.1　求函数 $f(x)=e^x$ 在 $x=1$ 处的函数值.

解

由于 $f(1)=e$ 是一个无理数，无法计算其精确值．而 $f(x)=e^x$ 的泰勒展开式

$$e^x = 1+\frac{x}{1!}+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\frac{e^{\theta x}}{(n+1)!}x^{n+1} \quad (0<\theta<1)$$

提供了一个计算 e 近似值的方法．如果记

$$S_n = 1+\frac{1}{1!}+\frac{1}{2!}+\cdots+\frac{1}{n!}$$

则 $\lim\limits_{n\to\infty} S_n = e$．当 n 充分大时，有 $S_n \approx e$，且截断误差为

$$R_n = |e-S_n| = \frac{e^{\theta}}{(n+1)!}$$

由于 θ 的具体取值不确定，无法准确给出截断误差，只能给出截断误差的上界

$$R_n < \frac{e}{(n+1)!} < \frac{3}{(n+1)!}$$

如果取计算精度为 $\varepsilon = 10^{-8}/2$，为使 S_n 作为 e 的近似值达到精度要求，需使 n 的取值满足 $\dfrac{3}{(n+1)!} \leqslant \varepsilon$．这种误差估计方法称为**误差的事前估计法**.

有了计算 e 近似值的数学模型，还应将它转化成为方便计算机编程的有效算法.

设 $a_n = \dfrac{1}{n!}$，取 $a_1 = 1$，$S_0 = 1$，则 $S_n = S_{n-1} + a_n$，$a_{n+1} = \dfrac{a_n}{n+1}$.

根据上述递推式，可设计以下算法：

第 1 步　置初值 $s \leftarrow 1$，$a \leftarrow 1$，$n \leftarrow 1$.

第 2 步　当 $3a > 10^{-8}/2$ 时，反复执行以下操作：

（1）$s \leftarrow s+a$；

（2）$a \leftarrow a/(n+1)$；

（3）$n \leftarrow n+1$.

第 3 步　输出 s.

根据所设计的算法，可编写以下 MATLAB 程序.

```
s=1;a=1;n=1;
```

```
while 3*a>10^(-8)/2
    s=s+a;
    a=a/(n+1);
    n=n+1;
end
fprintf('e 的近似值为 s(%2d)=%10.8f\n',n,s)
```

该程序的运行结果为：e 的近似值为 s(13)=2.71828183.

例 1.2 求函数 $f(x)=x^2-2$ 在 $[1,2]$ 上零点.

解

$f'(x)=2x$ 在 $[1,2]$ 上恒正，$f(1)f(2)=-2<0$，故 $f(x)=x^2-2$ 在 $(1,2)$ 上存在着唯一零点 $x=\sqrt{2}$. $\sqrt{2}$ 为无理数，无法给出其精确值，为了获得它的近似值，需要寻找一个有效的计算方法.

考虑由以下递推式所生成的数列 $\{x_n\}$：

$$\begin{cases} x_0=2 \\ x_{n+1}=\dfrac{1}{2}\left(x_n+\dfrac{2}{x_n}\right) \end{cases} \quad (n=0,1,\cdots)$$

显然 $x_n>0$，$x_{n+1}\geqslant\sqrt{x_n\cdot\dfrac{2}{x_n}}=\sqrt{2}$，即数列 x_n 的下界为 $\sqrt{2}$，而 $x_{n+1}-x_n=\dfrac{2-x_n^2}{2x_n}\leqslant 0$，$x_{n+1}\leqslant x_n$，即数列 x_n 单调下降.据单调有界数列存在极限的准则，$\lim\limits_{n\to\infty}x_n$ 存在，设 $\lim\limits_{n\to\infty}x_n=x$.

对 $x_{n+1}=\dfrac{1}{2}\left(x_n+\dfrac{2}{x_n}\right)$ 两边取极限，有 $x=\dfrac{1}{2}\left(x+\dfrac{2}{x}\right)$，解得 $x=\sqrt{2}$，即 $\lim\limits_{n\to\infty}x_n=\sqrt{2}$，由极限理论可知，当 n 充分大时，有 $x_n\approx\sqrt{2}$.

由于 $\sqrt{2}$ 未知，绝对误差 $\left|x_n-\sqrt{2}\right|$ 无法确定.据极限理论，当 n 充分大时，有 $\left|x_{n+1}-x_n\right|\approx\left|x_n-\sqrt{2}\right|$，如果取计算精度为 $\varepsilon=10^{-8}/2$，当近似误差

$$\left|x_{n+1}-x_n\right|\leqslant\varepsilon$$

时，取 x_{n+1} 作为 $\sqrt{2}$ 满足精度要求的近似值，这种误差估计方法称为**误差的事后估计法**.

有了计算 $\sqrt{2}$ 近似值的数学模型，还应将它转化成为适合计算机编程的有效算法.

第 1 步 置初值 $x_1\leftarrow 2$，$n\leftarrow 1$，$\mathrm{err}\leftarrow 1$.

第 2 步 当 $\mathrm{err}>10^{-8}/2$ 时，反复执行以下操作：

（1）$x_2\leftarrow\dfrac{1}{2}\left(x_1+\dfrac{2}{x_1}\right)$；

（2）$\mathrm{err}\leftarrow\left|x_2-x_1\right|$；

（3）$n\leftarrow n+1$；

（4）$x_1\leftarrow x_2$.

第 3 步 输出 x_1.

根据上述算法，可很方便地撰写 MATLAB 程序代码.

```
x1=2;n=1;err=1;
while err>10^(-8)/2
    x2=(x1+2/x1)/2;
    err=abs(x2-x1);
    n=n+1;
    x1=x2;
end
fprintf('2 的平方根的近似值为 x(%1d)=%10.8f\n',n,x1)
```

该程序的运行结果为：2 的平方根的近似值为 x(6)=1.41421356.

由上述两例可以看出，计算方法（或数值计算方法）是研究数学问题求数值解的方法和有关理论的一门学科．其主要特点是，首先创建一个适用于求数学问题数值解的离散化的数学模型，并设法将该数学模型改造成为一个递推化的数学模型．为了便于计算机求解，需要设计一个面向计算机编程的有效算法．为了保证计算精度，还需要进行误差估计.

1.2 误差

1.2.1 绝对误差与绝对误差限

定义 1.1 设 x 为精确值，x^* 为近似值，$E(x)=x-x^*$，分别称 $E(x)$ 和 $|E(x)|$ 为 x^* 作为 x 近似的**误差**和**绝对误差**.

由于 x 通常是未知的，所以 $|E(x)|=|x-x^*|$ 无法准确求出，但可以估计出 $|E(x)|$ 不超过某个正数 δ .

定义 1.2 若 $|E(x)|=|x-x^*|\leqslant\delta$，称 δ 为 x^* 作为 x 近似的**绝对误差限**或**精度**.

1.2.2 相对误差与相对误差限

定义 1.3 记 $|E_{\mathrm{r}}(x)|=\left|\dfrac{x-x^*}{x}\right|$，称 $|E_{\mathrm{r}}(x)|$ 为 x^* 作为 x 近似的**相对误差**.

一般情况下，由于 x 未知，常常使用 $|E_{\mathrm{r}}(x)|=\left|\dfrac{x-x^*}{x^*}\right|$.

定义 1.4 若 $|E_{\mathrm{r}}(x)|=\left|\dfrac{x-x^*}{x^*}\right|\leqslant\delta$，称 δ 为 x^* 作为 x 近似的**相对误差限**.

1.2.3 有效数字

设 x^* 为实数，如果 $x^*=\pm 0.a_1a_2\cdots a_n\times 10^m$，其中，$a_1,a_2,\cdots,a_n$ 为 0～9 的自然数，且

$a_1 \neq 0$，m 为整数，则称 x^* 被表示成为 **m 阶码的形式**.

例如，$x^* = 0.0541231$ 的 m 阶码表示形式为 $x^* = 0.541231 \times 10^{-1}$.

定义 1.5 设 $x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$，若 $|x - x^*| \leqslant 10^{m-l}/2 (1 \leqslant l \leqslant n)$，则称 x^* 作为 x 的近似具有 l 位**有效数字**.

例 1.3 如果精确值 $x = 0.054039412$，而测量值 $x^* = 0.0541231$，问测量值 x^* 作为精确值 x 的近似，具有几位有效数字？

解

$x^* = 0.541231 \times 10^{-1}$

$|x - x^*| = 0.000083688 \leqslant 10^{-3}/2 = 10^{-1-2}/2$，故 x^* 具有 2 位有效数字.

定理 1.1 如果 $x^* = 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$ 具有 n 位有效数字，则其相对误差限为 $|E_r(x)| \leqslant \dfrac{10^{-(n-1)}}{2a_1}$. 反之，如果 $|E_r(x)| \leqslant \dfrac{10^{-(n-1)}}{2(a_1+1)}$，则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证明

由 $x^* = 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$，有 $a_1 \times 10^{m-1} \leqslant |x^*| \leqslant (a_1+1) \times 10^{m-1}$.

如果 x^* 具有 n 位有效数字，有

$$|E_r(x)| = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leqslant \frac{10^{m-n}/2}{a_1 \times 10^{m-1}} = \frac{10^{-(n-1)}}{2a_1}$$

如果 $|E_r(x)| \leqslant \dfrac{10^{-(n-1)}}{2(a_1+1)}$，有

$$|x - x^*| = |x^*| \cdot |E_r(x)| \leqslant (a_1+1) \times 10^{m-1} \times \frac{10^{-(n-1)}}{2(a_1+1)} = 10^{m-n}/2$$

例 1.4 要使 $\sqrt{2}$ 的近似值的相对误差限小于 0.5%，需至少取几位有效数字？

解

因为 $x = \sqrt{2} = 1.414213\cdots$，$a_1 = 1$，欲使相对误差限满足

$$|E_r(x)| \leqslant \frac{10^{-(n-1)}}{2 \times 1} < 10^{-2}/2$$

解得 $n > 3$，可取 $n = 4$. 即当近似值至少取 4 位有效数字时，其相对误差限小于 0.5%.

1.2.4 误差的传播

将带有误差的数据进行数据计算，误差在运算过程中会进行传播，必然导致计算结果出现误差.精确值 x 通常与近似值 x^* 很接近，其差可以认为是较小的增量，即可以把误差看做微分，由此可得

$$E(x) = x - x^* = \mathrm{d}x$$

$$E_r(x) = \frac{E(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x} = \frac{\mathrm{d}x}{x} = \mathrm{d}\ln x$$

这表明：x 的微分表示 x 的误差，$\ln x$ 的微分表示 x 的相对误差.

根据上式可以得到算术运算的误差，以 x 、 y 两数为例，则

$$E(x\pm y)=\mathrm{d}(x\pm y)=\mathrm{d}x\pm\mathrm{d}y=E(x)\pm E(y)$$

$$E(xy)=\mathrm{d}(xy)=y\mathrm{d}x+x\mathrm{d}y=yE(x)+xE(y)$$

$$E\left(\frac{x}{y}\right)=\mathrm{d}\left(\frac{x}{y}\right)=\frac{y\mathrm{d}x-x\mathrm{d}y}{y^2}=\frac{yE(x)-xE(y)}{y^2}\quad(y\neq 0)$$

$$E_{\mathrm{r}}(xy)=\mathrm{d}\ln(xy)=\mathrm{d}\ln x+\mathrm{d}\ln y=E_{\mathrm{r}}(x)+E_{\mathrm{r}}(y)$$

$$E_{\mathrm{r}}\left(\frac{x}{y}\right)=\mathrm{d}\ln\left(\frac{x}{y}\right)=\mathrm{d}\ln x-\mathrm{d}\ln y=E_{\mathrm{r}}(x)-E_{\mathrm{r}}(y)$$

例 1.5　已知某场地长 l 的值为 $l^*=110\ \mathrm{m}$，宽 d 的值 d^* 为 80m，且 $\left|l-l^*\right|\leqslant 0.2\ \mathrm{m}$，$\left|d-d^*\right|\leqslant 0.1\ \ \mathrm{m}$，试求面积 $s=ld$ 的绝对误差限与相对误差限.

解

$$\left|E(s)\right|=\left|E(ld)\right|\approx d^*\left|E(l)\right|+l^*\left|E(d)\right|\leqslant 80\times 0.2+110\times 0.1=27\ (\mathrm{m}^2)$$

$$\left|E_{\mathrm{r}}(s)\right|=\left|E_{\mathrm{r}}(ld)\right|=\left|\frac{E(ld)}{l^*d^*}\right|\approx\frac{27}{110\times 80}\approx 0.31\%$$

或者

$$\left|E_{\mathrm{r}}(s)\right|=\left|E_{\mathrm{r}}(ld)\right|\leqslant\left|E_{\mathrm{r}}(l)\right|+\left|E_{\mathrm{r}}(d)\right|\approx\frac{0.2}{110}+\frac{0.1}{80}\approx 0.31\%$$

在计算函数值 $f(x)$ 时，当自变量 x 取近似值 x^*，即 x 取值带有误差时，其计算得到的函数值也会有误差，而 $f(x)$ 的误差可以简单地用以下公式来作近似估计：

$$Ef(x)=f(x)-f(x^*)=f'(\xi)(x-x^*)\quad(\xi\text{ 在 }x\text{ 与 }x^*\text{ 之间})$$

近似地可取

$$Ef(x)\approx f'(x)(x-x^*)=f'(x)E(x)$$

或者

$$Ef(x)\approx f'(x^*)(x-x^*)=f'(x^*)E(x)$$

例 1.6　已知 $(\sqrt{2}-1)^6=99-70\sqrt{2}=\dfrac{1}{99+70\sqrt{2}}$，由于 $\sqrt{2}$ 的精确值未知，如果取近似值 $\sqrt{2}\approx 1.414$，代入上述表达式进行计算，试判断哪一个表达式的计算效果最佳.

解

记 $\left|E(\sqrt{2})\right|=\left|\sqrt{2}-1.414\right|\leqslant\dfrac{1}{2}\times 10^{-3}$.

取 $f_1(x)=(x-1)^6$ ， $f_1'(x)=6(x-1)^5$ ，

$$\left|f_1(\sqrt{2})-f_1(1.414)\right|\approx\left|6\cdot(1.414-1)^5\right|\cdot\left|E(\sqrt{2})\right|\leqslant 0.073\cdot\left|E(\sqrt{2})\right|$$

取 $f_2(x)=99-70x$ ， $f_2'(x)=-70$ ，

$$\left|f_2(\sqrt{2})-f_2(1.414)\right|\approx\left|-70\right|\cdot\left|E(\sqrt{2})\right|\leqslant 70\cdot\left|E(\sqrt{2})\right|$$

取 $f_3(x)=\dfrac{1}{99+70x}$， $f_3'(x)=\dfrac{-70}{(99+70x)^2}$ ，

$$\left|f_3(\sqrt{2})-f_3(1.414)\right|\approx\left|\frac{-70}{(99+70\times1.414)^2}\right|\cdot\left|E(\sqrt{2})\right|\leqslant 0.002\cdot\left|E(\sqrt{2})\right|$$

比较可知，表达式$\dfrac{1}{99+70\sqrt{2}}$的计算效果最佳.

1.3 数值计算中应注意的一些原则

在数值计算时，每一步运算都可能产生误差或误差传播，而一个复杂的科学计算或工程技术问题的解决，往往要运算成千上万次，甚至亿万次，如果每一步运算都要进行误差分析，显然是不可能的，也是不必要的.人们通过对误差传播规律的分析，提出在数值计算中应该遵循的原则，在数值计算中遵循了这些原则，可以将误差控制在估计的范围内.

1. 选用数值稳定的算法

例 1.7 数列$\{x_n\}$满足递推公式$x_n=10x_{n-1}-1$（$n=1,2,\cdots$），若取$x_0=\sqrt{2}$的近似值$x_0^*=1.41$(3 位有效数字)，求x_n的误差.

解

$$0<e_0=x_0-x_0^*=\sqrt{2}-1.41\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-2}$$

$$e_n=x_n-x_n^*=10(x_{n-1}-x_{n-1}^*)10e_{n-1}=10^2e_{n-2}=\cdots=10^ne_0$$

由于初值x_0的误差e_0，随着n的增大，x_n的误差e_n越来越严重，造成计算结果x_n^*的严重失真. 这表明，上述递推算式是一个数值不稳定的算法.

2. 避免两个相近数的相减

在数值计算中，两个相近数相减时，会损失有效数字，导致相对误差变大.

例 1.8 设$x=\sqrt{63}=7.9372\cdots$，若取$x^*=7.94$来计算$8-\sqrt{63}$，并使其近似值具有 3 位有效数字，应选择怎样的算式？

解

$$8-\sqrt{63}\approx0.0627461$$

取$x^*=7.94$作为$x=\sqrt{63}$的近似值，它具有 3 位有效数字.

如果直接用算式$8-\sqrt{63}$来计算

$$8-\sqrt{63}=8-7.94=0.06$$

其结果只有 1 位有效数字.

如果改用算式$8-\sqrt{63}=\dfrac{1}{8+\sqrt{63}}$来计算

$$\frac{1}{8+\sqrt{63}}=\frac{1}{8+7.94}=\frac{1}{15.94}\approx 0.0627$$

其结果具有 3 位有效数字.

3. 尽量避免绝对值太小的数做除数

对于算式 $\frac{2.7182}{0.001}=2718.2$，如果分母变为 0.0011，即分母发生 0.0001 的变化时，算式 $\frac{2.7182}{0.0011}=2471.1$ 的商发生了巨大变化.

4. 合理安排运算顺序，避免大数“吃掉”小数

计算机上只能用有限位数进行计算，若参加运算的数的数量级相差太大，在它们的加减运算中，先对阶，后运算，这样绝对值很小的数往往会被绝对值较大的数“吃掉”，造成计算结果严重失真.

例 1.9 在五位浮点十进制计算机上，计算 $S=12345+\sum_{i=1}^{1000}0.9$.

解

在计算机上进行计算时，首先要将数据“规格化”，即将数据表示成为 m 阶码形式

$$12345=0.12345\times 10^5, \qquad 0.9=0.9\times 10^0$$

然后将数据“对阶”，即以数据中 10 的幂次最大者为基准，使数据 10 的幂次一致

$$12345=0.12345\times 10^5, \qquad 0.9=0.000009\times 10^5$$

由于计算机采用五位浮点十进制，0.9 在计算机中被表示成为 0.00000×10^5，于是

$$S=0.12345\times 10^5+0.00000\times 10^5+\cdots+0.00000\times 10^5=0.12345\times 10^5=12345$$

结果显然不可靠，这是由运算中出现了大数 12345“吃掉”小数 0.9 造成的.

如果计算时先把数量级相同的一千个 0.9 相加，最后再加 12345，就不会出现大数“吃掉”小数现象.

$$s=0.9\times 10^0+\cdots+0.9\times 10^0=900$$
$$S=0.12345\times 10^5+0.009\times 10^5=0.13245\times 10^5=13245$$

5. 减少运算次数，避免误差累积

数值计算过程中，每一步都不可避免地会产生误差，并且都有可能传播到下一步，还会积累到最终的计算结果中. 因此，减少运算次数，不但可以提高计算效率，还可以减少误差的传播与积累.

例 1.10 已知 $\ln 2=0.6931\cdots$，利用展开式

$$\ln(1+x)=x-\frac{x^2}{2}+\frac{x^3}{3}-\frac{x^4}{4}+\cdots+(-1)^{n-1}\frac{x^n}{n}+\cdots \quad (-1<x\leqslant 1)$$

可得 $\ln 2$ 的计算公式

$$\ln 2 = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \cdots + (-1)^{n-1}\frac{1}{n} + \cdots$$

研究以下问题：

（1）若记 $s_n = \sum_{k=1}^{n} \frac{(-1)^{k-1}}{k}$，当 n 取多大时，s_n 作为 $\ln 2$ 的近似具有 3 位有效数字；

（2）再构造一个计算 $\ln 2$ 更为有效的公式.

解

欲使 $\left|\ln 2 - s_n\right| \leqslant 10^{-3}/2$，由交错级数的莱布尼茨定理有 $\left|\ln 2 - s_n\right| < \frac{1}{n+1}$，只需 $\frac{1}{n+1} < 10^{-3}/2$，即 $n > 1999$，取 $n = 2000$.

在 MATLAB 命令窗口输入以下命令：

```
syms k
vpa(symsum((-1)^(k-1)/k，k，1，2000)，4)
```

可求得 $s_{2000} = 0.6929$.

由原展开式，有

$$\ln(1-x) = -x - \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} - \cdots - \frac{x^n}{n} - \cdots \quad (-1 < x \leqslant 1)$$

两展开式相减，有

$$\frac{1}{2}\ln\frac{1+x}{1-x} = x + \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} + \cdots + \frac{x^{2n-1}}{2n-1} - \cdots \quad (-1 < x < 1)$$

令 $x = \frac{1}{3}$，可得

$$\ln 2 = 2\left[\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\left(\frac{1}{3}\right)^3 + \frac{1}{5}\left(\frac{1}{3}\right)^5 + \cdots + \frac{1}{2n-1}\left(\frac{1}{3}\right)^{2n-1} + \cdots\right]$$

仅取前 3 项进行计算，在 MATLAB 命令窗口输入以下表达式：

```
2*(1/3+(1/3)^3/3+(1/3)^5/5)
```

可得 00.6930，该近似值也具有 3 位有效数字.

1.4 MATLAB 解题示例

例 1.11 递推式

$$\begin{cases} x_1 = 2 \\ x_{k+1} = \frac{1}{2}\left(x_k + \frac{7}{x_k}\right) \end{cases} \quad (k = 1, 2, \cdots)$$

可用来计算 $\sqrt{7}$ 的近似值. 分别用实验方法和数学方法证明：如果 x_k 是 $\sqrt{7}$ 具有 n 位有效数字的近似值，则 x_{k+1} 是 $\sqrt{7}$ 具有 $2n$ 位有效数字的近似值.