高等院校“十二五”规划教材

数值分析

张民选　罗贤兵　编写

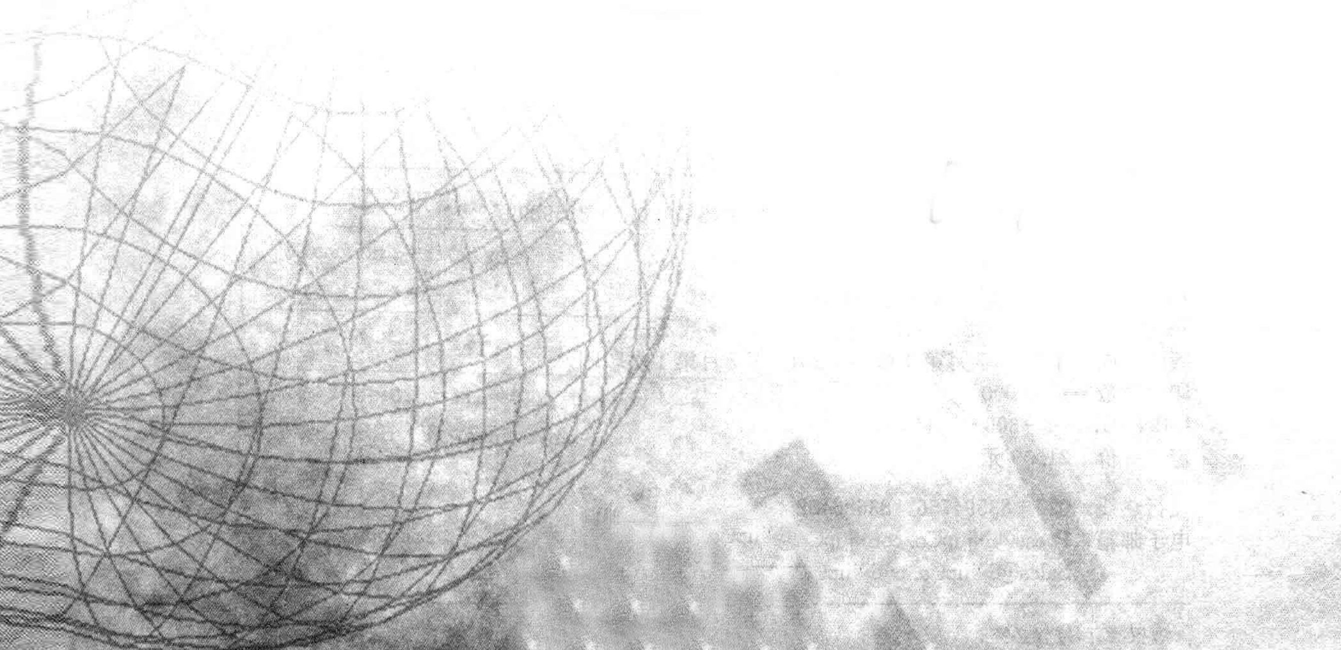
$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}) \\
x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}) \\
\qquad \vdots \\
x_n^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{n(n-1)}x_{n-1}^{(k+1)})
\end{cases}
$$

南京大学出版社

高等院校“十二五”规划教材

数值分析

张民选　罗贤兵　编　写



南京大学出版社

内容提要

数值分析又称为数值计算或计算方法，主要研究各类数学问题的数值解法（近似解法），包括对方法的推导、描述以及对整个求解过程的分析，并由此为计算机提供实际可行、理论可靠、计算复杂性好的各种数值算法.

随着计算机科学与技术的迅速发展，大部分科学实验和工程技术中遇到的各类数学问题都可以通过数值分析中的方法加以解决.科学与工程计算已经成为与理论分析和科学实验同样重要的第三种科学手段.

从实际问题中抽象出的数学问题，大部分都与求解微分方程、线性方程组、非线性方程以及数据处理等问题有关.数值分析这门课程将围绕这些问题的解决提供一些有关的数值方法.本书的主要内容有：非线性方程的数值解法，线性方程组的解法，函数的数值逼近（代数插值与函数的最佳平分逼近），数值积分与数值微分，常微分方程初值问题的数值解法以及矩阵特征值的计算等。

本书可作为高等学校数学专业大学生和工科硕士研究生“数值分析”课程的教材，也可供科技工作者参考.

图书在版编目（CIP）数据

数值分析 / 张民选，罗贤兵编写. —南京 ：南京大学出版社，2013.7

高等院校“十二五”规划教材

ISBN 978-7-305-11418-2

Ⅰ.①数… Ⅱ.①张… ②罗… Ⅲ.①数值分析—研究生—教材 Ⅳ.①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 089566 号

出版发行 南京大学出版社
社　　址 南京市汉口路 22 号　　　邮　编 210093
网　　址 http://www.NjupCo.com
出 版 人 左　健

丛 书 名 高等院校“十二五”规划教材
书　　名 数值分析
编　　者 张民选　罗贤兵
策划编辑 吴　华
责任编辑 姚　萍　吴　汀　　　编辑热线 025-83596997

照　　排 江苏南大印刷厂
印　　刷 宜兴市盛世文化印刷有限公司
开　　本 787×1092　1/16　印张 10.75　字数 259 千
版　　次 2013 年 7 月第 1 版　　2013 年 7 月第 1 次印刷
印　　数 1～3 000
ISBN 978-7-305-11418-2
定　　价 21.00 元

发行热线 025-83594756　83686452
电子邮箱 Press@NjupCo.com
Sales@NjupCo.com(市场部)

前　言

数值分析是一门紧密联系实际问题、数学理论与电子计算机的课程，随着计算机科学与技术的迅速发展，大部分科学和工程技术中遇到的各类数学问题都可以通过数值分析中的方法加以解决. 现今无论在传统科学领域还是高新科技领域都少不了数值计算这一类工作，数值计算已成为优化工程设计、进行数值模拟试验以代替耗资巨大的真实实验的一种重要手段.

随着科技的发展，越来越多的工科类学生，特别是工科类研究生，越来越需要吸取计算方法方面的知识，该书主要针对工科类研究生或本科生编写. 该书的主要内容是向读者介绍误差的相关知识、非线性方程求根、线性代数方程组数值解法、插值与拟合、数值积分与微分和常微分方程初值问题的数值解法等知识. 在此基础上，本书还简要介绍了适用于做数值计算的 Matlab 软件，并用本课程中的计算方法作为编程实例，读者只需要将现有例子做适当修改就可以实现本书中的计算方法.

全书初稿得到贵州师范大学杨一都教授和贵州大学张大凯教授一字一句的精心审校，并提出了许多宝贵意见，对此我们表示衷心的感谢. 全书在编写过程中，我们参阅了不少书籍，这些都已经列于参考文献，有些可能由于疏漏而没有列出，我们对这些资料的作者深表感谢.

本书是在南京大学出版社编辑吴华同志的精心统筹下编校出版的，她为保证本书的出版质量起到了关键作用. 本书的编写与出版还得到了贵州大学研究生院的关心、支持和资助，在此深表感谢.

由于水平有限，书中难免有一些错误、缺点和不足，恳请广大读者、同行和有关专家批评指正.

编　者

目　　录

第 1 章 引论

数值分析又称为数值计算或计算方法，是关于使用计算机进行近似计算的一门学科，主要研究各类数学问题的数值解法(近似解法)，包括对方法的推导、描述以及对整个求解过程的分析，并由此为使用计算机解决由实际问题抽象出的数学模型提供切实可行、理论可靠、高效快速、计算复杂性好的各种数值算法.

因此数值分析是一门紧密联系实际问题、数学理论和电子计算机的课程，是科学与工程计算的基础. 随着计算机科学与技术的迅速发展，大部分科学实验和工程技术中遇到的各类数学问题都可以通过数值分析中的方法得以解决. 科学与工程计算已经成为与理论分析和科学实验同样重要的第三种科学手段. 现今无论在传统科学领域还是高新科技领域都少不了数值计算这一类工作，数值计算已成为优化工程设计、进行数值模拟试验以代替耗资巨大的真实实验的一种重要手段.

从实际问题中抽象出的数学问题的基本元素是函数、多项式、微积分、线性与非线性方程组等，数值分析这门课程将围绕这些基本问题的数值化提供一些基本的数值方法. 本书的主要内容有：非线性方程的数值解法，线性方程组的解法，函数的数值逼近(代数插值与函数的最佳平方逼近)，数值积分与数值微分，常微分方程初值问题的数值解法以及矩阵特征值的计算等.

学习数值分析这门课程，首先要注意掌握方法的基本原理和基本思想，在此基础上注意和计算机结合进行一些数值计算的训练.

§1.1 误差的概念

1.1.1 误差的来源

电子计算机是解决当代一切重大科学、技术、工程、经济等问题的有力工具. 任何一个在生产活动和科学实验中提出的问题要在计算机上得以解决，一般要经历以下几个过程：首先要将实际问题根据一定的假设建立数学模型，其次根据数学模型的特点选择合适的计算方法，最后在计算机上实现算法得出数值结果，并结合实际校正数学模型，采用更有效的数值方法，达到更完美的结果.

数学模型是实际问题的一种数学描述，它往往抓住问题的主要因素，忽略其次要因素. 比如，自由落体运动中下落的高度 h 与下落的时间 t 之间的函数关系

$$h=\frac{1}{2}gt^2,$$

就是忽略了物体下落过程中的阻力而得到的，由这个公式算出来的下落高度和实际的下落高度有一些误差，这种误差称为**模型误差**.

在数学模型中往往有一些参数，比如温度、长度、电压、重力加速度等，这些参数是由观测或实验得到的，受测量仪器和视力等因素的影响，和实际值或准确值也有一定的误差，这种误差称为**观测误差**.

当实际问题的数学模型不能获得精确解时，必须采用数值方法（近似计算方法）求其近似解. 这些方法通常采用有限逼近无限，离散逼近连续，把无限的计算过程用有限步的计算来代替，由此产生的误差称为**截断误差**或**方法误差**.

例如，用 e^x 的幂级数展开式

$$e^x=1+x+\frac{1}{2!}x^2+\frac{1}{3!}x^3+\cdots+\frac{1}{n!}x^n+\cdots$$

计算 e^x 时，取级数的前 $n+1$ 项的和 S_{n+1} 作为 e^x 的近似表达式：

$$e^x\approx S_{n+1}=1+x+\frac{1}{2!}x^2+\frac{1}{3!}x^3+\cdots+\frac{1}{n!}x^n,$$

则 $R(x)=e^x-S_{n+1}$ 就是截断误差.

计算器或计算机都只有有限位存储和计算能力，用数值方法解数学问题一般不能得到问题的精确解. 在进行数值计算的过程中，初始数据（例如一些无理数、无限循环小数或超出计算机字长的数）或计算的结果要用四舍五入或其他规则取近似值以存入计算机，由此产生的误差称为**舍入误差**.

以上简要叙述了用计算机解决实际问题的过程中所有可能产生的误差，也就是误差的来源. 模型误差和观测误差不是数值分析所讨论的对象，数值分析主要讨论的是截断误差和舍入误差.

1.1.2 误差的基本概念

用数值方法求一个数学问题的数值解时，要求问题的数值解与精确解的误差越小越好，也即数值解的精度越高越好. 因此首先要给出误差大小的度量，有两种衡量误差大小的方法，一个是绝对误差，另外一个是相对误差.

定义 1.1.1 设 x^* 是某一个量的准确值，x 是 x^* 的一个近似值，称 x^* 与 x 的差

$$e(x)=x^*-x \tag{1.1.1}$$

为 x 的**绝对误差**，通常简称为**误差**.

注意	绝对误差不是误差的绝对值. 当 $e(x)>0$ 时，x 是 x^* 的不足近似值；当 $e(x)<0$ 时，x 是 x^* 的过剩近似值. 绝对误差的绝对值的大小能够比较好地描述 x 与 x^* 的接近程度. 但是很多时候人们只知道这个量的近似值 x，因而无法算出准确的绝对误差，这时通常用另外一个量来描述绝对误差的大小.

定义 1.1.2　若$|e(x)|=|x^*-x|\leqslant\varepsilon$，则称$\varepsilon$是近似值$x$的**绝对误差限**.

> 注意
>
> 绝对误差限ε不唯一，它是绝对误差的一个估计，因此ε越小越好.

在实践中，通常是根据测量工具或计算情况去估计近似数的误差限. 比如，用一把厘米刻度尺去测量物体的长度，得长度为$x=23$ cm，这个物体的实际长度为x^* cm，从刻度尺可以知道其误差限为0.5 cm.

衡量一个近似数的精确程度，只有绝对误差是不够的. 例如，测量长度为1 000 m的机场跑道误差是1 m，而测量长度为400 m的跑道误差也是1 m，显然前者的测量结果比后者精确. 这说明决定一个近似值的精度除了绝对误差外，还必须顾及这个数本身的大小. 这就需要引进相对误差的概念.

定义 1.1.3　近似值x的绝对误差和准确值之比，即

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

称为近似值x的**相对误差**. 由于准确值x^*是不知道的，所以通常用

$$e_r(x)=\frac{x^*-x}{x} \tag{1.1.2}$$

表示近似值x的**相对误差**.

类似于绝对误差限，相对误差不可能计算出来，只能对它作一个估计.

定义 1.1.4　若$|e_r(x)|\leqslant\varepsilon_r$，则称$\varepsilon_r$是近似值$x$的**相对误差限**.

相对误差是一个无量纲的量，通常用百分比表示，与绝对误差限一样，相对误差限不唯一，越小近似程度越高. 另外，由绝对误差和相对误差的关系，容易得到$\varepsilon_r=\frac{\varepsilon}{|x|}$.

为了给出一种近似值的表示方法，使之既能表示其大小，又能表示其精确程度，下面引入有效数字的概念. 在实际计算中，当准确值x^*有很多位数时，通常按照四舍五入的原则取近似，得到近似值x. 例如，无理数

$$\mathrm{e}=2.718\,281\,828\,459\,045\,534\,9\cdots,$$

按四舍五入的原则取小数点后两位和后五位时，得$\mathrm{e}\approx\mathrm{e}_2=2.72$，$\mathrm{e}\approx\mathrm{e}_5=2.718\,28$，不管取几位小数得到的近似值，其绝对误差都不超过末位数的半个单位，即

$$|\mathrm{e}-\mathrm{e}_2|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-2},$$

$$|\mathrm{e}-\mathrm{e}_5|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-5}.$$

定义 1.1.5　设近似值$x=\pm0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n\times10^m$，其中$\alpha_i\in\{0,1,2,\cdots,9\}(i=1,2,\cdots,n)$，$\alpha_1\neq0$，$m$为整数，如果其绝对误差$|e(x)|=|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n}$，则称近似值$x$有$n$位**有效数字**. 其中$\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n$都是$x$的有效数字，也称$x$为有$n$位有效数字的近似值.

根据定义 1.1.5,前述近似值 e_2,e_5 分别具有 3 位和 6 位有效数字.

例 1.1 下列数据都是按照四舍五入的原则得到的数据,它们各有几位有效数字?

(1) 23.073 5; (2) 0.105 6; (3) 3.004; (4) 0.005 20.

解 设上述四个数据的准确值分别为 x_1^*,x_2^*,x_3^*,x_4^*,由于它们的近似值都是四舍五入得来的,故有

(1) $x_1=23.0735=0.230735\times10^2$,

$$|x_1^*-x_1|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4}=\frac{1}{2}\times10^{2-6},$$

因此 $x_1=23.0735$ 有 6 位有效数字.

(2) $x_2=0.1056\times10^0$,

$$|x_2^*-x_2|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4}=\frac{1}{2}\times10^{0-4},$$

因此 $x_2=0.1056$ 有 4 位有效数字.

(3) $x_3=3.004=0.3004\times10^1$,

$$|x_3^*-x_3|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}=\frac{1}{2}\times10^{1-4},$$

因此 $x_3=3.004$ 有 4 位有效数字.

(4) $x_4=0.00520=0.520\times10^{-2}$,

$$|x_4^*-x_4|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-5}=\frac{1}{2}\times10^{-2-3},$$

因此 $x_4=0.00520$ 有 3 位有效数字.

注意	x_4 小数点后最末位的 0 也是有效数字,不能舍去.

有效数字与相对误差限有如下关系:

定理 1.1.1 设近似值 $x=\pm0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n\times10^m$ 有 n 位有效数字,则其相对误差限为 $\varepsilon_r=\dfrac{1}{2\alpha_1}\times10^{-n+1}$.

证明 因为 x 有 n 位有效数字,所以 $|x^*-x|\leqslant\dfrac{1}{2}\times10^{m-n}=\varepsilon$.

又因为 $|x|\geqslant\alpha_1\times10^{m-1}$,所以

$$\left|\frac{x^*-x}{x}\right|\leqslant\frac{\frac{1}{2}\times10^{m-n}}{\alpha_1\times10^{m-1}}=\frac{1}{2\alpha_1}\times10^{-n+1}=\varepsilon_r.$$

定理 1.1.2 设近似值 $x=\pm0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n\times10^m$ 的相对误差限为

$$\varepsilon_r=\frac{1}{2(\alpha_1+1)}\times10^{-n+1},$$

则 x 至少有 n 位有效数字.

证明 因为绝对误差限 $\varepsilon=|x|\varepsilon_r$,$|x|\leqslant(\alpha_1+1)\times10^{m-1}$,所以

$$\varepsilon \leqslant (\alpha_1+1)\times 10^{m-1}\times\frac{1}{2(\alpha_1+1)}\times 10^{-n+1}=\frac{1}{2}\times 10^{m-n},$$

所以 x 至少有 n 位有效数字.

综上所述:有效数字可以刻画近似数的精确度;绝对误差与小数点后的位数有关;相对误差与有效数字位数有关;有效数字位数越大,近似数就越精确.

例 1.2 求$\sqrt{3}$的近似值,使其绝对误差限 ε 分别为$\frac{1}{2}\times 10^{-1}$,$\frac{1}{2}\times 10^{-3}$.

解 $\sqrt{3}=1.732\,05\cdots$,

依题意得其近似值 $x_1=1.7$,$x_2=1.732$.

例 1.3 已知近似值 x 的相对误差限$\varepsilon_r=0.3\%$,求 x 至少具有几位有效数字.

解 设 x 的第一位有效数字为$\alpha_1\neq 0$,则其相对误差限

$$\varepsilon_r=0.3\%=\frac{3}{1\,000}<\frac{1}{2}\times 10^{-2}=\frac{1}{2(9+1)}\times 10^{1-2},$$

因此 x 至少具有 2 位有效数字.

例 1.4 为了使$\sqrt{70}$的近似值的相对误差限 $\varepsilon_r<0.1\%$,查开方表时,应取多少位有效数字?

解 因为 $8<\sqrt{70}<9$,所以有效数字的第一位数 $\alpha_1=8$.

要 $\varepsilon_r<0.1\%=\frac{1}{1\,000}$,只要取 n,使得$\frac{1}{2\alpha_1}\times 10^{-n+1}=\frac{1}{2\times 8}\times 10^{-n+1}<\frac{1}{1\,000}$即可.

解上述不等式得 $n\geqslant 3$,故查开方表得$\sqrt{70}\approx 8.37$.

§1.2 函数的误差

在计算函数值时,如果自变量有误差,会导致求出来的函数值也有误差,本节考虑由自变量的误差所引起的函数值的误差,探讨它们之间的关系.

1.2.1 一元函数的误差

首先设 $y=f(x)$为线性函数,假设自变量的准确值为 x^*,近似值为 x,由这个近似值 x 计算出来的函数值为 $y=f(x)=kx+b$,因而函数值的误差为

$$y^*-y=f(x^*)-f(x)=k(x^*-x).$$

由此得到函数值的误差是自变量的误差的 k 倍. 记

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

即得

$$e(y)=ke(x). \tag{1.2.1}$$

对于一般的函数 $y=f(x)$,假设自变量的近似值为 x,函数值的近似值为 y,自变量的

准确值为 x^*，函数值的准确值为 y^*，由一阶 Taylor 公式

$$f(x^*)-f(x)=f'(x)(x^*-x)+o(x^*-x),$$

这里 $o(x^*-x)$表示比(x^*-x)高阶的无穷小量. 舍去高阶无穷小量并引用前面的记号，得函数值的绝对误差

$$e(y)\approx f'(x)e(x) \tag{1.2.2}$$

及函数值的相对误差

$$e_r(y)=\frac{e(y)}{y}\approx x\frac{f'(x)}{f(x)}e_r(x). \tag{1.2.3}$$

例 1.5 已知函数 $y=x^m$ 和自变量的相对误差 $e_r(x)$，求函数的相对误差 $e_r(y)$.

解 因为 $y'=mx^{m-1}$，所以由式(1.2.3)得

$$e_r(y)\approx x\frac{mx^{m-1}}{x^m}e_r(x)=me_r(x),$$

即函数 $y=x^m$ 的相对误差大约是自变量 x 的相对误差的 m 倍.

1.2.2 多元函数的误差

设 $z=f(x,y)$为二元函数，已知两个自变量的误差 $e(x)$，$e(y)$与相对误差 $e_r(x)$，$e_r(y)$，怎样求由它们引起的函数值的误差 $e(z)$和相对误差 $e_r(z)$？

根据微积分的知识和一元函数的误差的启发，用二元函数的全微分来求二元函数值的误差：

$$e(z)\approx \mathrm{d}z=\frac{\partial z}{\partial x}e(x)+\frac{\partial z}{\partial y}e(y), \tag{1.2.4}$$

$$e_r(z)=\frac{e(z)}{z}\approx\frac{x}{z}\frac{\partial z}{\partial x}e_r(x)+\frac{y}{z}\frac{\partial z}{\partial y}e_r(y). \tag{1.2.5}$$

对于一般的 n 元函数，可以类似地获得其误差.

下面，特别针对“加、减、乘、除”的误差进行具体讨论. 为此，设 x,y 为近似值，x^*，y^* 为准确值，误差 $e(x)$，$e(y)$与相对误差 $e_r(x)$，$e_r(y)$已知.

根据误差与相对误差的定义易得

$$e(x\pm y)=e(x)\pm e(y), \tag{1.2.6}$$

$$e_r(x\pm y)=\frac{e(x\pm y)}{x\pm y}=\frac{x}{x\pm y}e_r(x)+\frac{y}{x\pm y}e_r(y). \tag{1.2.7}$$

设 $z=xy$，由式(1.2.4)和式(1.2.5)可得

$$e(xy)\approx ye(x)+xe(y), \tag{1.2.8}$$

$$e_r(xy)=\frac{e(xy)}{xy}\approx e_r(x)+e_r(y). \tag{1.2.9}$$

设 $z=\dfrac{x}{y}$,同理可得

$$e\left(\frac{x}{y}\right)\approx\frac{1}{y}e(x)-\frac{x}{y^2}e(y),\tag{1.2.10}$$

$$e_r\left(\frac{x}{y}\right)\approx e_r(x)-e_r(y).\tag{1.2.11}$$

例 1.6 设测得桌面长 $x=120.0$ cm,桌面宽 $y=60.0$ cm. 若已知 $|e(x)|\leqslant 0.2$ cm, $|e(y)|\leqslant 0.1$ cm,求桌面面积 S 的绝对误差限和相对误差限.

解 桌面面积 $S=xy$,由式(1.2.8)得绝对误差限

$$|e(S)|\leqslant|ye(x)|+|xe(x)|\leqslant 60\times0.2+120\times0.1=24\ \text{cm}^2,$$

由式(1.2.9)得相对误差限

$$|e_r(S)|\leqslant|e_r(x)|+|e_r(y)|\leqslant\frac{0.2}{120}+\frac{0.1}{60}=0.0033.$$

§1.3 算法的数值稳定性

所谓**算法**,不仅仅是单纯的数学公式,而是对一些已知数据按某种规定的顺序进行有限次的四则运算,求出所需要的未知量的整个计算步骤. 解决一个数学问题往往有多种算法,不同算法计算的结果的误差往往是不同的. 先看下面例题.

例 1.7 计算积分 $I_n=\int_0^1 x^n\mathrm{e}^{x-1}\mathrm{d}x, n=0,1,2,\cdots,9$.

解 利用定积分的分部积分法可得 I_n 的递推关系

$$\begin{cases}I_0=1-\mathrm{e}^{-1}\approx0.6321,\\ I_n=1-nI_{n-1},n=1,2,3,\cdots,9.\end{cases}\tag{1.3.1}$$

计算结果如下:

n	0	1	2	3	4
I_n	0.632 1	0.367 9	0.264 2	0.207 4	0.170 4
n	5	6	7	8	9
I_n	0.148 0	0.112 0	0.216 0	−0.728 0	7.552 0

由于在闭区间[0,1]上,被积函数 $f(x)=x^n\mathrm{e}^{x-1}\geqslant0$,根据定积分的性质

$$0<\frac{\mathrm{e}^{-1}}{n+1}=\mathrm{e}^{-1}\min_{0\leqslant x\leqslant1}(\mathrm{e}^x)\int_0^1x^n\mathrm{d}x<I_n<\mathrm{e}^{-1}\max_{0\leqslant x\leqslant1}(\mathrm{e}^x)\int_0^1x^n\mathrm{d}x=\frac{1}{n+1},$$

应有 $I_7<\frac{1}{8}=0.125, I_8>0, I_9<\frac{1}{10}=0.1$.

从表中可见按递推关系(1.3.1)算出的 I_7, I_8, I_9 的结果是不可采信的. 其原因是计算 I_0 时 e^{-1} 是无理数, 0.632 1 与 I_0 有不超过 $\frac{1}{2}\times10^{-4}$ 的舍入误差, 此误差在运算过程中传播很快, I_n 的误差 $e(I_n)=ne(I_{n-1})=\cdots=n!\ e(I_0)$, 以致算出的 I_7, I_8, I_9 严重失真.

现在换一种计算方法. 由 $\frac{e^{-1}}{10}<I_9<\frac{1}{10}$, 取 $I_9\approx\frac{1}{2}\left(\frac{e^{-1}}{10}+\frac{1}{10}\right)=0.0684$, 其绝对误差限为 $\frac{1}{2}\times10^{-4}$, 将递推关系(1.3.1)改写为

$$\begin{cases} I_9\approx 0.0684, \\ I_{n-1}=\dfrac{1}{n}(1-I_n),\ n=9,8,\cdots,1, \end{cases} \tag{1.3.2}$$

则计算结果如下:

n	9	8	7	6	5
I_n	0.068 4	0.103 5	0.112 1	0.126 8	0.145 5
n	4	3	2	1	0
I_n	0.170 9	0.207 3	0.264 2	0.367 9	0.632 1

从表中可见按递推关系(1.3.2)算出的 I_0 是相当准确的, 究其原因, 主要是 $e(I_{n-1})=\frac{1}{n}e(I_n)$, 从而由 I_9 推算到 I_0 时, 误差传播为 $e(I_0)=\frac{1}{9!}e(I_9)$. 在这个过程中, 误差不但没有增加, 反而在不断地减少.

定义 1.3.1 如果一个算法的舍入误差在整个计算过程中能够得到有效的控制, 或者舍入误差的增长不影响产生可靠的结果, 则称此算法是**数值稳定的**, 否则称此算法是**数值不稳定的**.

由前面对函数的误差分析知, 在进行数值计算时, 有些情况要特别注意, 例如相近的数相减、绝对值小的数作除数等, 这些情况会使计算结果严重失真, 这显然不是人们所期望的. 在计算过程中, 虽然处处有误差, 但还是希望误差在可控制的范围内, 否则就失去了计算的意义. 那么在计算过程中, 要注意哪些问题, 并怎样来解决呢? 以下分别举例说明.

1.3.1 避免相近的数相减

在数值计算中, 两个相近的数相减时有效数字会损失, 因此在计算过程中, 需要尽量避免此情况的发生.

例 1.8 在 7 位字长十进制计算机上求 $x^2-26x+1=0$ 的两个根.

(准确根为 $x_1=25.961481\cdots$, $x_2=0.038518603\cdots$)

解 首先利用一元二次方程求根公式 $x_{1,2}=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$ 进行求解, 得

$$x_1=13+\sqrt{168}\approx25.96148, x_2=13-\sqrt{168}\approx0.03852.$$

通过计算，x_1 有 7 位有效数字，但 x_2 的计算结果只有 4 位有效数字. 出现这种状况的主要原因是出现了 13 和 $\sqrt{168}$ 这两个相近的数相减损失了有效数字. 为避免这种情况，现采用韦达定理进行求解

$$x_1 = 13 + \sqrt{168} \approx 25.961\,48, x_2 = \frac{1}{x_1} \approx 0.038\,518\,6,$$

此时 x_2 有 6 位有效数字.

针对上述一元二次方程的求根公式，为避免相近的数相减损失有效数字，通常采用韦达定理和求根公式结合来求方程的根，而不是只利用求根公式.

例 1.9 假定在某一计算过程中，需要计算表达式 $1-\cos x$ 的值（x 非常接近 0），直接进行计算会导致相近的数相减损失有效数字，为避免这种情况发生，利用恒等式

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

通过计算 $2\sin^2\frac{x}{2}$ 来代替计算 $1-\cos x$.

1.3.2 防止大数"吃掉"小数

在数值计算中，有时参加运算的数的数量级相差很大，而计算机的位数（字长）是有限的，在编程过程中若不注意运算顺序，就有可能产生大数"吃掉" 小数的现象，影响计算结果的可靠性. 因此，数相加时，应尽量避免将小数加到大数中所引起的这种严重后果.

例 1.10 设 $a=10^8$，$b=40$，$c=30$，在 7 位字长的计算机上计算 $a+b+c$.

解 若直接按照 $a+b+c$ 这个顺序相加，其结果是 $a+b+c=a=10^8$，这是因为计算机作加减法时是要对阶的，即把加数都写成尾数小于 1 的同阶的数，再对其尾数相加减，所以

$$a = 0.100\,000\,0 \times 10^9, b = 0.000\,000\,04 \times 10^9, c = 0.000\,000\,03 \times 10^9,$$

而计算机字长只有七位，因而四舍五入得到

$$b = 0.000\,000\,0 \times 10^9, c = 0.000\,000\,0 \times 10^9,$$

所以从左到右计算是 $a+b+c=0.100\,000\,0\times10^9=a=10^8$，此时 b,c 都被 a"吃掉"了.

若交换加法顺序，先计算 $b+c$，然后将其结果加到 a 上，其结果就变成了

$$b + c + a = 0.100\,000\,1 \times 10^9,$$

这就避免了 b,c 被 a"吃掉".

1.3.3 避免大乘数小除数

由式(1.2.8)知，当两个数 x,y 相乘时，如果乘数 x 或 y 的绝对值很大，函数值的绝对误差限 $|e(xy)|$ 会很大. 因此在计算过程中，尽量避免绝对值很大的数作乘数.

用绝对值小的数作除数，所得到的数的绝对值可能非常大，容易产生"溢出" 现象，即计算结果超出计算机的存储范围. 即使不产生"溢出" 现象，由式(1.2.10)知，当 $|y|$ 接近零时，$\left|\frac{1}{y}\right|$ 和 $\left|\frac{x}{y^2}\right|$ 就会很大，那么商 $\frac{x}{y}$ 的绝对误差限 $\left|e\left(\frac{x}{y}\right)\right|$ 也会很大. 因此在计算过程中，尽量

避免绝对值小的数作除数.

1.3.4 减少运算次数

同样一个计算问题,若能选择更为简洁的计算公式,减少运算次数,不但可以节省计算量,提高计算速度,还能减少误差积累.

例如,计算多项式 $P_n(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0$ 的值,若采用逐步计算然后相加的办法,计算 a_kx^k 需要 k 次乘法,而 $P_n(x)$ 有 $n+1$ 项,因此需作 n 次加法和 $1+2+\cdots+n=\dfrac{n(n+1)}{2}$ 次乘法,但若采用递推算法(秦九韶算法)

$$\begin{cases} u_0 = a_n, \\ u_k = u_{k-1}x + a_{n-k}, \end{cases}$$

对 $k=1,2,\cdots,n$ 反复执行 $u_k=u_{k-1}x+a_{n-k}$,则只需 n 次乘法和 n 次加法便可.

上述方法实际上就是对 $P_n(x)$ 的项加括号,例如

$$P_5(x) = a_5x^5 + a_4x^4 + a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0,$$

对其加括号变成

$$P_5(x) = ((((a_5x + a_4)x + a_3)x + a_2)x + a_1)x + a_0,$$

按加括号的顺序进行计算就是秦九韶算法.

习 题 1

1. 下列数字是按照四舍五入的方式得到的数据,指出其绝对误差限、相对误差限和有效数字位数.

(1) 1.071; (2) 0.005 6; (3) 333.00; (4) 2.050.

2. 用四舍五入的原则写出下列各数的具有 5 位有效数字的近似数.

(1) 346.785 4; (2) 7.000 009; (3) 0.000 132 458 0; (4) 0.600 030 0.

3. 计算 $\sqrt{10}$ 的近似值,使其相对误差不超过0.1%.

4. 为了使 $\sqrt{38}$ 的近似数的相对误差小于 0.1%,问应取几位有效数字?

5. 正方形的边长约为 10 cm,问测量边长的误差限多大才能保证面积的误差不超过0.1 cm^2.

6. 用下列数据计算 $\lg x-\lg y$.

(1) $x=100,y=100.1$; (2) $x=100.1,y=10^{-5}$.

7. 序列 $\{y_n\}$ 满足递推关系 $y_n=9y_{n-1}-2\,012(n=1,2,3,\cdots)$,若 $y_0=2.370\,12$(有 6 位有效数字),求计算 y_{10} 的绝对误差限是多少?

8. 求方程 $x^2-56x+1=0$ 的两个根,使其至少具有四位有效数字.

9. 下面计算 y 的公式,哪一个的精确度高?