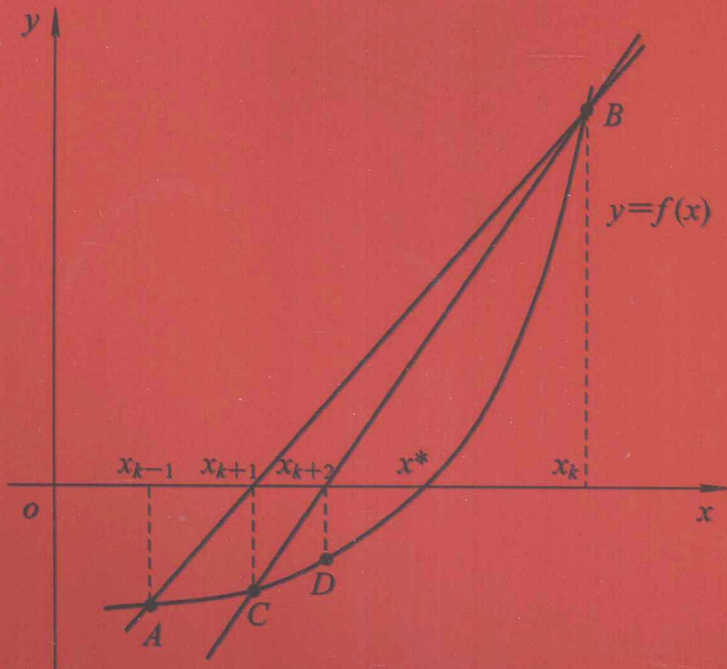


● 高等学校数学教材系列丛书



# 计算方法

任传祥 等编著

西安电子科技大学出版社  
<http://www.xduph.com>

高等学校数学教材系列丛书

# 计算方法

任传祥 王正杰 尹唱唱  
夏颖 陆翔 程学珍



西安电子科技大学出版社

## 内 容 简 介

本书共 9 章: 第 1~8 章为计算方法的理论部分, 内容包括绪论、非线性方程求根、线性方程组的数值解法、函数插值、曲线拟合、数值积分与数值微分、常微分方程的数值解法、矩阵特征值及特征向量的数值求解, 各章均配有例题和习题, 供读者进一步学习; 第 9 章为实验部分, 给出了详细而又注重实际教学的实验指导。

本书在注重数学理论的同时也注重计算机的应用, 内容由浅入深, 先理论后实践, 结构安排合理, 概念清晰, 理论分析严谨, 推理过程清楚、严密。

本书可供高等院校数学与应用数学、信息与计算科学、计算机科学、自动化与控制科学等专业的本科生和研究生使用, 也可供从事科学研究及工程应用领域的科技人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

计算方法/任传祥等编著. —西安: 西安电子科技大学出版社, 2013. 4

(高等学校数学教材系列丛书)

ISBN 978 - 7 - 5606 - 3038 - 0

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

### 中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 058128 号

策 划 刘 杰

责任编辑 王 瑛 刘少东 刘 杰

出版发行 西安电子科技大学出版社(西安市太白南路 2 号)

电 话 (029)88242885 88201467 邮 编 710071

网 址 www.xduph.com 电子邮箱 xdupfb001@163.com

经 销 新华书店

印刷单位 陕西华沐印刷科技有限责任公司

版 次 2013 年 4 月第 1 版 2013 年 4 月第 1 次印刷

开 本 787 毫米×960 毫米 1/16 印张 11

字 数 223 千字

印 数 1~3000 册

定 价 20.00 元

ISBN 978 - 7 - 5606 - 3038 - 0/O

**XDUP 3330001 - 1**

\* \* \* 如有印装问题可调换 \* \* \*

# 前 言

随着计算机技术及相关理论的发展,计算机在科研及工程领域获得了广泛应用,并已深入到人类的日常生活中。应用计算机解决实际问题,必然涉及解决问题的计算方法,要更好地应用计算机解决实际问题,必须学习计算方法。计算方法已经成为高等院校数学与应用数学、信息与计算科学、计算机科学、自动化与控制科学等本科专业的基础课程,也是工科研究生常常选修的课程有的专业则是必修课程。

本书的内容安排从计算方法的理论特点、各基本数学问题计算方法间的关系及先理论后实践的关系出发,共分为9章,第1~8章包括绪论、非线性方程求根、线性方程组的数值解法、函数插值、曲线拟合、数值积分与数值微分、常微分方程的数值解法、矩阵特征值及特征向量的数值求解,第9章为实验指导。每类数学问题数值求解算法的介绍都是从实际中遇到的问题及其数学解决方法遇到的困难出发,以便读者理解和接受所要学习的内容;同时,针对每类数学问题的各种数值计算方法,根据算法的性能递进及由易到难的顺序逐渐展开介绍,而且针对解决同样问题的不同算法,尽量做到理论分析基础上的实例演示,以便读者学习和深入理解不同算法。此外,对各种数值算法的基本理论与实际应用进行了较全面的分析,包括算法的推导、计算过程、几何意义、计算效果、收敛性、实际应用、优劣性及其特点等。

本书在介绍理论知识的同时,注重实践教学,给出了各种重要算法的详细实验指导,并结合实际实验教学中的问题,对算法的程序设计给出程序描述,而不是直接给出程序,同时给出实验参考结果,这既利于实验指导也利于学生实际实验学习。

本书全部授课大约需70学时,授课教师可根据实际情况有选择地进行讲授。

本书的第1章和第4章由任传祥编写,第2章由夏颖编写,第3章和第6章由王正杰编写,第5章由陆翔编写,第7章和第9章由任传祥和尹唱唱编写,第8章由程学珍编写。此外,王伟、栾金金、徐彩丽参与了部分例题及实验指导中算法的程序描述的编写工作。全书由任传祥统稿。

本书得到了西安电子科技大学出版社的帮助,在此深表感谢。

由于编者水平有限,书中不足之处在所难免,敬请广大读者批评指正。

编 者

2012年10月

# 目 录

<b>第 1 章 绪论</b> .....	1
1.1 引言 .....	1
1.2 计算机中数的表示 .....	2
1.2.1 定点表示 .....	2
1.2.2 浮点表示 .....	3
1.3 数值计算的误差 .....	4
1.3.1 误差的来源 .....	4
1.3.2 绝对误差 .....	5
1.3.3 相对误差 .....	5
1.3.4 有效数字与误差 .....	6
1.4 函数求值的误差 .....	8
1.5 数值计算中要注意的若干原则 .....	9
习题 1 .....	14
<b>第 2 章 非线性方程求根</b> .....	15
2.1 引言 .....	15
2.2 二分法 .....	17
2.3 迭代法 .....	19
2.3.1 迭代法的概念及其过程 .....	19
2.3.2 迭代法的收敛性定理 .....	21
2.3.3 迭代法的收敛速度 .....	24
2.4 牛顿迭代法与弦割法 .....	25
2.4.1 牛顿迭代法 .....	25
2.4.2 近似牛顿迭代法与弦割法 .....	28
习题 2 .....	30
<b>第 3 章 线性方程组的数值解法</b> .....	32
3.1 引言 .....	32
3.2 高斯(Gauss)消去法及其改进 .....	33
3.2.1 三角形方程组及其求解 .....	33
3.2.2 高斯消去法 .....	34
3.2.3 列主元高斯消去法 .....	36
3.3 直接分解法 .....	38
3.3.1 基本变换过程 .....	38

3.3.2 杜立特尔(Doolittle)分解 .....	39
3.4 解线性方程组的迭代法 .....	41
3.4.1 雅可比(Jacobi)迭代法 .....	41
3.4.2 高斯-赛德尔(Gauss-Seidel)迭代法 .....	42
3.4.3 迭代法的精度判断 .....	43
3.4.4 迭代法的矩阵表示 .....	44
3.5 向量范数、矩阵范数及迭代法的收敛性 .....	45
3.5.1 向量范数 .....	45
3.5.2 矩阵范数 .....	46
3.5.3 迭代法的收敛性 .....	48
习题3 .....	49
<b>第4章 函数插值</b> .....	<b>50</b>
4.1 引言 .....	50
4.1.1 插值问题及相关概念 .....	50
4.1.2 多项式插值及其唯一性 .....	51
4.2 拉格朗日插值法 .....	52
4.2.1 线性插值多项式 .....	52
4.2.2 二次插值多项式 .....	53
4.2.3 拉格朗日插值多项式 .....	55
4.2.4 拉格朗日插值多项式的余项 .....	56
4.3 牛顿插值法 .....	58
4.3.1 差商 .....	59
4.3.2 牛顿插值多项式 .....	61
4.4 埃尔米特插值 .....	64
4.4.1 埃尔米特插值多项式 .....	64
4.4.2 两点三次埃尔米特插值多项式 .....	66
4.5 分段插值 .....	68
4.5.1 高次插值的缺点 .....	68
4.5.2 分段线性插值和三次埃尔米特插值 .....	69
4.6 三次样条插值 .....	70
4.6.1 三次样条插值函数 .....	71
4.6.2 三次样条插值函数的计算 .....	72
习题4 .....	78
<b>第5章 曲线拟合</b> .....	<b>80</b>
5.1 引言 .....	80
5.2 内积及函数线性无关 .....	80
5.3 最小二乘法曲线拟合 .....	81

习题 5 .....	86
<b>第 6 章 数值积分与数值微分 .....</b>	<b>88</b>
6.1 引言 .....	88
6.1.1 机械求积公式 .....	88
6.1.2 代数精度 .....	89
6.1.3 插值型求积公式 .....	90
6.2 牛顿-科特斯(Newton-Cotes)求积公式 .....	91
6.2.1 梯形积分公式 .....	91
6.2.2 辛普森(Simpson)积分公式 .....	93
6.2.3 一般的牛顿-科特斯积分公式 .....	95
6.3 复化求积公式 .....	97
6.3.1 复化梯形公式 .....	98
6.3.2 复化辛普森公式 .....	98
6.3.3 复化科特斯公式 .....	99
6.3.4 步长的自动选择 .....	101
6.4 数值微分 .....	103
6.4.1 数值求导的差商公式 .....	103
6.4.2 插值型数值微分 .....	104
习题 6 .....	107
<b>第 7 章 常微分方程的数值解法 .....</b>	<b>109</b>
7.1 引言 .....	109
7.2 欧拉方法及改进的欧拉方法 .....	110
7.2.1 欧拉方法 .....	110
7.2.2 改进的欧拉方法 .....	113
7.3 龙格-库塔方法 .....	116
7.3.1 龙格-库塔方法的基本思想 .....	116
7.3.2 二阶龙格-库塔方法 .....	117
7.3.3 高阶龙格-库塔方法 .....	119
7.4 线性多步法 .....	122
7.4.1 线性多步法的基本思想 .....	122
7.4.2 阿达姆斯显式公式 .....	123
7.4.3 阿达姆斯隐式公式 .....	125
7.4.4 阿达姆斯预估校正公式 .....	126
习题 7 .....	127
<b>第 8 章 矩阵特征值及特征向量的数值求解 .....</b>	<b>129</b>
8.1 引言 .....	129
8.2 幂法与反幂法 .....	130

8.2.1 幂法 .....	130
8.2.2 反幂法 .....	134
8.3 雅可比方法 .....	137
8.4 QR 方法 .....	143
8.4.1 QR 方法的基本思想 .....	143
8.4.2 矩阵的 QR 分解 .....	143
习题 8 .....	145
<b>第 9 章 实验指导</b> .....	147
实验一 舍入误差与数值稳定性 .....	147
实验二 非线性方程求根 .....	149
实验三 线性方程组的数值解法 .....	152
实验四 函数插值 .....	155
实验五 曲线拟合 .....	158
实验六 数值积分 .....	159
实验七 常微分方程的数值解法 .....	161
实验八 矩阵特征值及特征向量的数值求解 .....	164
<b>参考文献</b> .....	168



# 第 1 章 绪 论

## 1.1 引 言

数学是研究数量、结构、变化以及空间模型等概念的一门学科。随着社会的发展和科学的进步，数学开始被应用于力学领域，后来被应用于越来越广的范围，覆盖了物理、工程、化学、天文、地理、生物、医学，甚至经济、语言等领域，这促进了包括可应用的数学及数学的应用两个部分的应用数学的产生和迅速发展，使其成为数学的一个分支。应用数学研究如何将数学知识应用到其他的范畴，它包含许多分支，其中数值计算方法是其重要的分支之一。

数值计算方法又称数值分析或计算方法，是为求解各种实际应用中的数学问题提供有效算法及其理论的一门学科，是程序设计和对数值结果进行分析的依据和基础。计算方法与计算机关系密切，计算机的出现和广泛的应用为计算方法的发展提供了平台和空间，而计算方法也促进了计算机的应用。自从 1946 年第一台计算机问世至今，随着计算机技术的迅速发展，其应用的速度、深度和广度远远超过了历史上的任何一种技术手段，目前其应用的范围几乎是人类社会的所有领域。应用计算机解决实际问题时，很多情况下需要计算的是问题的数值解，如何应用计算机求得实际问题的数值解正是计算方法所要研究的内容。

计算机解决实际问题的过程包括实际问题、数学模型、计算方法、方法的程序设计、计算机求解等步骤。其中实际问题包括各个领域的许多问题，而这些实际问题的计算机求解，目前虽有一些计算软件可以直接使用，如 Matlab、Mathematica 等，但需要了解算法设计的原理，以便更好地应用；同时，随着实际问题越来越复杂，规模越来越庞大，现成的数值方法软件难以满足实际需要，如天气预报、计算化学、Web 搜索、结构设计等，这也要求学习计算方法，以便寻求新的解决问题的方法。

本书从工程实际问题出发，研究以下数学问题：非线性方程的求解、线性方程组的求解、函数的插值与逼近、数值积分与微分、微分方程的数值求解、矩阵的特征值与特征向量的计算。

## 1.2 计算机中数的表示

在数值计算中无处不涉及小数的运算，了解小数在计算机中的表示和运算是学习数值计算方法的基础。计算机中的数都是以二进制的形式来表示的。对于正整数，二进制形式为

$$d_n 2^n + d_{n-1} 2^{n-1} + \cdots + d_1 2^1 + d_0 2^0$$

而对于小于 1 的正数，其形式为

$$d_{-1} 2^{-1} + d_{-2} 2^{-2} + d_{-3} 2^{-3} + \cdots$$

其中， $d_i$  表示二进制数字，取值为 0 或 1。

计算机中小数点的表示方式分为定点表示和浮点表示。定点表示中小数点的位置固定不变，而浮点表示中小数点的位置是浮动的，因此用这两种方法表示的数被分别称为定点数和浮点数。

### 1.2.1 定点表示

定点表示就是小数点的位置在数中固定不变。计算机中有两种定点数最常用：一种是定点纯小数，另一种是定点纯整数。

定点纯小数是把小数点固定在数的符号位之后、最高数值位之前，小数点位置隐含，本身不占位，其格式如图 1.1 所示。

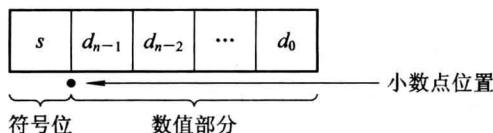


图 1.1 定点纯小数的格式

定点纯整数是把小数点固定在数值的最低位之后，最高位为符号位，小数点位置隐含，本身不占位，其格式如图 1.2 所示。

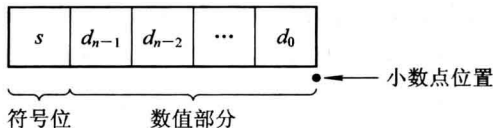


图 1.2 定点纯整数的格式

**例 1-1** 如图 1.3 所示的两个 8 位二进制数，求对应的十进制数。

**解** 图 1.3(a) 所示为定点纯整数表示方法，故可得  $N_1 = +84$ ， $N_2 = -84$ 。

图 1.3(b) 所示为定点纯小数表示方法，故可得  $N_1 = +0.65625$ ， $N_2 = -0.65625$ 。

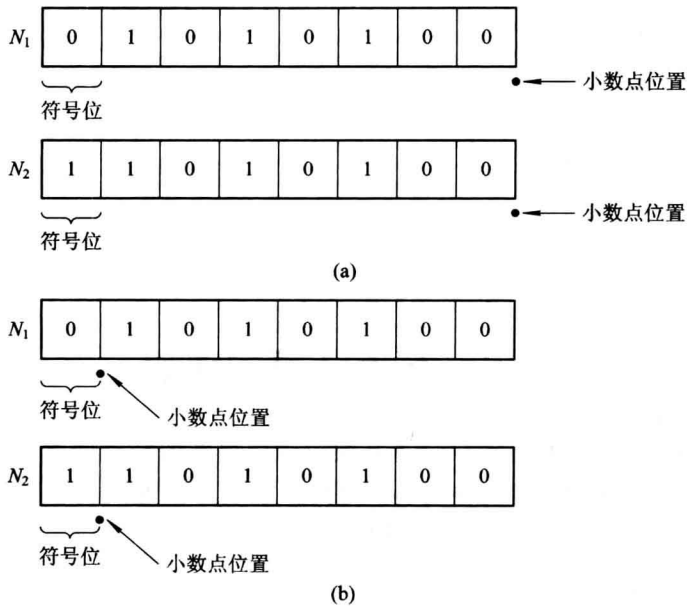


图 1.3 例 1-1 用图

### 1.2.2 浮点表示

相比定点表示，浮点表示在位数有限的前提下可以扩大数的表示范围，同时又可保持数的有效精度。

浮点数在机器中的一般表示形式如图 1.4 所示。

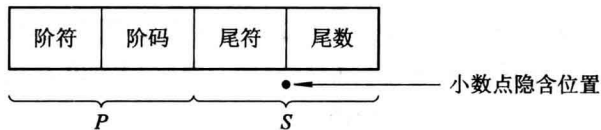


图 1.4 浮点数的表示形式

其中  $P$  表示阶码，而阶符表示阶码的符号； $S$  表示尾数，尾符表示尾数的符号。也就是说，计算机中一个浮点数由阶码和尾数组成，而阶码和尾数都有自己的符号。

通常，用一位二进制数  $P_f$  表示阶码的符号位。当  $P_f=0$  时，表示阶码为正；当  $P_f=1$  时，表示阶码为负。

同样，用一位二进制数  $S_f$  表示尾数的符号位。当  $S_f=0$  时，表示尾数为正；当  $S_f=1$  时，表示尾数为负。

**例 1-2** 用浮点数表示  $-18.75$ ，并假定尾数用 8 位二进制表示，阶码用 4 位二进制表示，均含符号位。

解 因为

$$(-18.75)_{10} = (-10010.11)_2 = (-0.1001011) \times 2^{+101}$$

则-18.75 的浮点数表示如图 1.5 所示。

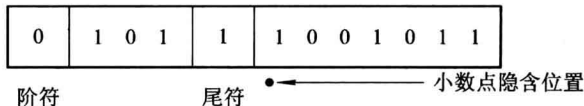


图 1.5 例 1-2 用图

## 1.3 数值计算的误差

对于大量实际问题,应用计算机计算其数值解所得到的结果通常为近似解,即存在误差。误差是评价算法优劣的一个重要指标,也是求解实际问题所要求的结果之一,因此误差计算和分析等相关内容是计算方法的重要基础内容。

### 1.3.1 误差的来源

基于计算方法应用计算机求解实际问题的过程,不可避免会引入误差,根据误差的来源不同,误差通常分为以下四种类型:

(1) 模型误差。用数学方法解决一个具体的实际问题,首先要建立数学模型,这就要对实际问题进行抽象、简化或假设,因此建立的数学模型与实际客观问题之间就存在着一定的差距,即误差,这种误差称做模型误差。

(2) 观测误差。在数学模型中通常包含一些需要通过观测得到的物理量,如温度、长度、电压等,这些量的观测值与其实际值之间的误差,称做观测误差。

(3) 截断误差。当数学模型不能得到精确解时,通常用数值方法求它的近似解,则所求得的近似解与准确解之间的误差称为截断误差,也称为方法误差。

例如,计算  $\sin x$  的值时,应用其泰勒展开式有

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots$$

如果取该式的前两项计算  $\sin x$  的值,即  $\sin x = x - \frac{x^3}{3!}$ ,则  $\frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots$  为计算  $\sin x$  的截断误差。

(4) 舍入误差。由于计算机的字长有限,参加运算的数据在计算机中只能表示为数据真实值的近似值,由此产生了误差,而且用计算机进行实际计算时每一步都可能产生该类误差,这种误差称为舍入误差。

例如,设计算机的字长为最多能够处理 10 位十进制数,则  $1 \div 3 = 0.333\ 333\ 333\ 3$ ,而

式来计算相对误差：

即相对误差可由绝对误差与准确值计算得到，但实际上准确值难以得到，因此通常根据下

$$e_r = \frac{e}{x}$$

根据绝对误差的定义，即式(1.1)，将其代入式(1.4)有

$$e_r^* = \frac{x - x^*}{x} \tag{1.4}$$

误差，记做  $e_r^*$ ，即

**定义 1.2** 设  $x$  为准确值， $x^*$  为  $x$  的一个近似值，称  $(x - x^*)/x$  为近似值  $x^*$  的相对

### 1.3.3 相对误差

确，其实这就是相对误差。

$y^*$  为 1000 cm 产生了 5 cm 的误差，即每 1 cm 产生的误差为 0.005 cm，所以  $y^*$  比  $x^*$  更精确；实际上， $x^*$  为 15 cm 产生了 2 cm 的误差，即每 1 cm 产生的误差约为 0.1333 cm，而 2 cm， $e(y^*) = 5$  cm，从表面上看  $y^*$  的绝对误差大于  $x^*$  的绝对误差，得出  $x^*$  更精确的结论能完全刻画近似值的精确程度。例如， $x = (15 \pm 2)$  cm， $y = (1000 \pm 5)$  cm，则  $e(x^*) =$  绝对误差是有量纲的，这从上述的两个例子也可以看出。另外，仅有绝对误差通常不

$x = (5 \pm 0.01)$  m，即该物体的准确长度在 4.99 m ~ 5.01 m 范围内。  
 $|23 - x| \leq 0.5$  mm；又如，测得某物体长度为 5 m，若误差限为 0.01 m，则可记准确长度

来表示近似值的精度或准确值的范围。

$$x = x^* \pm \epsilon \tag{1.3}$$

有了误差限就可知道  $x$  的范围，因此工程上通常用

越高。近似值的误差可正可负，实际应用中常用误差限来表示误差。

$\epsilon$  称为绝对误差限或精度。显然，误差限不是唯一的，但是误差限越小，表示近似值的精度

$$|e^*| = |x - x^*| \leq \epsilon \tag{1.2}$$

误差的绝对值不超过某个正数  $\epsilon$ ，即

通常无法知道准确值  $x$ ，也就不能算出误差的准确值  $e^*$ ，只能根据测量或计算估计出

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

简称误差，记做  $e^*$ ，即

**定义 1.1** 设  $x$  为准确值， $x^*$  为  $x$  的一个近似值，称  $x - x^*$  为近似值  $x^*$  的绝对误差，

### 1.3.2 绝对误差

其真实值应为  $1 \div 3 = 0.333\ 333\ 333\ 333\ 33\ \dots$ ，由此产生的误差就是舍入误差。

$$e_r^* = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*} \quad (1.5)$$

同绝对误差一样, 相对误差也可正可负, 因此实际中也取某个正数  $\epsilon_r$  作为误差限来表示相对误差, 即  $|e_r^*| \leq \epsilon_r$ , 则根据式(1.2)可得

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{|x^*|} \quad (1.6)$$

**例 1-3** 已知某商品的质量为  $(35 \pm 0.2)$ kg, 计算该商品的相对误差限  $\epsilon_r$ 。

**解** 根据已知可得该商品质量的绝对误差限  $\epsilon = 0.2$ , 则根据式(1.6)有

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{|x^*|} = \frac{0.2}{35} \approx 0.0057$$

**例 1-4** 已知  $e = 2.718\ 281\ 82\dots$ , 取其近似值  $e^* = 2.718\ 28$ , 求  $e^*$  的绝对误差限  $\epsilon$  和相对误差限  $\epsilon_r$ 。

**解**  $e^*$  的绝对误差为

$$E = e^* - e = 2.718\ 28 - 2.718\ 281\ 82\dots = -0.000\ 001\ 82\dots$$

则  $|E| = 0.000\ 001\ 82\dots \leq 0.000\ 002 = 2 \times 10^{-6}$ , 所以绝对误差限为

$$\epsilon = 2 \times 10^{-6}$$

则相对误差为

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{|e^*|} = \frac{2 \times 10^{-6}}{2.718\ 28} \approx 0.7358 \times 10^{-6}$$

### 1.3.4 有效数字与误差

**定义 1.3** 若  $x^*$  作为  $x$  的近似值, 其绝对误差的绝对值不超过某一位的半个单位, 而从该位开始到  $x^*$  的第一位非零数字共有  $n$  位, 则称用  $x^*$  近似  $x$  时, 具有  $n$  位有效数字, 简称  $x^*$  有  $n$  位有效数字。

一般来说, 如果  $x$  的近似值  $x^*$  可以表示成如下形式:

$$x^* = \pm 0.a_1a_2\dots a_n \times 10^k \quad (1.7)$$

其中  $a_i \in \{0, 1, 2, \dots, 9\}$ , 且  $a_1 \neq 0$ 。若

$$|x^* - x| \leq 0.5 \times 10^{k-n} \quad (1.8)$$

则称近似数  $x^*$  具有  $n$  位有效数字, 或称  $x^*$  精确到第  $n$  位; 反之, 若  $x^*$  具有  $n$  位有效数字, 则其绝对误差必定满足:

$$|x^* - x| \leq 0.5 \times 10^{k-n}$$

这也称为有效数字的等价定义。

**例 1-5** 已知  $\pi = 3.141\ 592\ 65\dots$ , 设  $\pi$  的 3 个近似值分别为  $\pi_1 = 3.14$ ,  $\pi_2 = 3.1415$ ,  $\pi_3 = 3.141\ 592\ 7$ , 求  $\pi_1$ 、 $\pi_2$ 、 $\pi_3$  有效数字的个数。

解 方法一: 根据有效数字的定义, 需计算  $\pi_1$ 、 $\pi_2$  和  $\pi_3$  的绝对误差限, 即

$$|e_1^*| = |\pi_1 - \pi| = 0.001\ 592\ 6\cdots < 0.002 < 0.005 = 0.5 \times 10^{-2}$$

$$|e_2^*| = |\pi_2 - \pi| = 0.000\ 092\ 6\cdots < 0.0005 = 0.5 \times 10^{-3}$$

$$|e_3^*| = |\pi_3 - \pi| < 0.000\ 000\ 05 = 0.5 \times 10^{-7}$$

所以  $\pi_1$  有 3 位有效数字,  $\pi_2$  有 4 位有效数字,  $\pi_3$  有 8 位有效数字。

方法二: 利用有效数字的等价定义计算, 则有

$\pi_1 = 3.14 = 0.314 \times 10^1$ , 而  $|e_1^*| < 0.5 \times 10^{-2}$ , 即  $k-n = -2$ , 而  $k=1$ , 所以  $n=3$ , 即  $\pi_1$  有 3 位有效数字。同理可得  $\pi_2 = 3.1415$  有 4 位有效数字,  $\pi_3$  有 8 位有效数字。

例 1-6 已知  $x = 4.854 \pm 0.03$ , 则其近似值 4.854 具有几位有效数字?

解 因为 4.854 的误差限  $\epsilon = 0.03$ , 则  $\epsilon < 0.05 = 0.5 \times 10^{-1}$ , 根据有效数字的等价定义,  $k-n = -1$ , 而  $k=1$ , 所以  $n=2$ , 即 4.854 具有 2 位有效数字。

定理 1.1 如果  $x$  的近似值  $x^*$  可以表示成如下形式:

$$x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^k \quad (a_i \in \{0, 1, 2, \cdots, 9\}, \text{ 且 } a_1 \neq 0)$$

则:

(1) 若  $x^*$  有  $n$  位有效数字, 则其相对误差  $e_r^*$  满足  $|e_r^*| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}$ ;

(2) 若  $x^*$  的相对误差  $e_r^*$  满足  $|e_r^*| \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n}$ , 则  $x^*$  至少有  $n$  位有效数字。

证明 (1) 根据有效数字的等价定义, 若  $x^*$  有  $n$  位有效数字, 则有

$$|e| = |x^* - x| \leq 0.5 \times 10^{k-n}$$

所以

$$|e_r^*| = \frac{|e|}{|x^*|} \leq \frac{0.5 \times 10^{k-n}}{0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^k} \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}$$

(2) 若  $x^*$  的相对误差满足  $|e_r^*| \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n}$ , 则有

$$\begin{aligned} |e| &= |x^* \times e_r^*| \leq |x^*| \times \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n} \\ &= 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^k \times \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n} \\ &\leq (a_1+1) \times 10^{k-1} \times \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n} \\ &= \frac{1}{2} \times 10^{k-n} \end{aligned}$$

所以  $x^*$  有  $n$  位有效数字。

例 1-7 要使得  $\sqrt{20}$  的相对误差不超过 0.1%, 应至少取几位有效数字?

解 设  $\sqrt{20}$  的近似值  $x^*$  有  $n$  位有效数字, 则由定理 1.1 得  $x^*$  的相对误差满足

$$|e_r^*| = \frac{|x^* - x|}{|x^*|} \leq \frac{1}{2 \times a_1} \times 10^{1-n} \leq 0.1\%$$

而  $x^*$  的首位数字  $a_1$  为 4, 所以有

$$|e_r^*| \leq \frac{1}{2 \times 4} \times 10^{1-n} = 0.125 \times 10^{1-n} \leq 0.1\%$$

由此可以得到  $n \geq 3.097$ , 即应至少取 4 位有效数字。

## 1.4 函数求值的误差

数值运算中, 所得到的数据有误差, 必然会引起函数值的误差, 这种数据误差的影响较为复杂, 一般采用泰勒级数展开的方法来估计。

### 1. 一元函数的情况

计算函数  $y=f(x)$  的值, 若得到的是  $x$  的近似值  $x^*$ , 由此计算得到的函数值也是近似值  $y^*=f(x^*)$ , 现在研究  $y^*$  的绝对误差与相对误差。

将  $f(x)$  在  $x^*$  处作泰勒展开, 并取一阶泰勒多项式, 则有

$$f(x) \approx f(x^*) + \frac{f'(x^*)}{1!}(x-x^*)$$

所以  $y^*$  的绝对误差  $e(y^*)=y-y^*=f(x)-f(x^*) \approx f'(x^*)(x-x^*)$ , 即

$$e(y^*) \approx f'(x^*)e(x^*) \quad (1.9)$$

根据相对误差的定义可以得到  $y^*$  的相对误差为

$$e_r(y^*) = \frac{e(y^*)}{y^*} \approx \frac{f'(x^*)e(x^*)}{y^*} = \frac{x^* f'(x^*)}{f(x^*)} e_r(x^*) \quad (1.10)$$

### 2. 多元函数的情况

设  $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$  依次为  $x_1, x_2, \dots, x_n$  的近似值, 计算函数近似值  $y^*=f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$  的绝对误差和相对误差。

根据多元泰勒展开式, 将  $y=f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  在  $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$  处进行泰勒展开, 并取一阶泰勒多项式得

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \approx f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} (x_i - x_i^*)$$

所以  $y^*$  的绝对误差为

$$\begin{aligned} e(y^*) &= f(x_1, x_2, \dots, x_n) - f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) \\ &\approx \sum_{i=1}^n f'_i(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) e(x_i^*) \end{aligned} \quad (1.11)$$



根据相对误差的概念可以得到  $y^*$  的相对误差为

$$\begin{aligned} e_r(y^*) &= \frac{e(y^*)}{y^*} \approx \frac{\sum_{i=1}^n f'_i(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) e(x_i^*)}{y^*} \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{f'_i(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)} x_i^* e_i(x_i^*) \end{aligned} \quad (1.12)$$

### 3. 和、差、积、商误差的计算

利用函数求值的误差计算公式可以得到两个数的和、差、积、商的误差估计，设两个近似数  $x_1^*$ 、 $x_2^*$ ，其误差分别为  $e(x_1^*)$  和  $e(x_2^*)$ ，对它们进行加、减、乘、除运算得到的误差分别为

$$e(x_1^* + x_2^*) = e(x_1^*) + e(x_2^*) \quad (1.13)$$

$$e(x_1^* - x_2^*) = e(x_1^*) - e(x_2^*) \quad (1.14)$$

$$e(x_1^* x_2^*) = x_2^* e(x_1^*) + x_1^* e(x_2^*) \quad (1.15)$$

$$e\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) = \frac{e(x_1^*)}{x_2^*} - \frac{x_1^* e(x_2^*)}{(x_2^*)^2} \quad (1.16)$$

**例 1-8** 测得某桌面的长  $a$  的近似值  $a^* = 120$  cm，宽  $b$  的近似值  $b^* = 60$  cm。若已知  $|e(a^*)| \leq 0.2$  cm， $|e(b^*)| \leq 0.1$  cm，试求面积近似值  $s^* = a^* b^*$  的绝对误差与相对误差。

**解** 根据乘法运算的误差计算公式得

$$e(s^*) = b^* e(a^*) + a^* e(b^*) = 60 \times 0.2 + 120 \times 0.1 = 24 \text{ cm}^2$$

则相对误差为

$$e_r(s^*) = \frac{e(s^*)}{s^*} = \frac{e(s^*)}{a^* b^*} = \frac{24}{120 \times 60} = 0.33\%$$

## 1.5 数值计算中要注意的若干原则

解决一个问题的计算方法往往有多种，不同的计算方法计算结果的精确度往往不同，计算量小而精度高的算法最好，因此对数值计算中计算结果的精度，即误差，进行分析十分重要。然而现实中的工程或科学问题经常是非常复杂的，针对其计算的每一步都进行误差分析难以做到，也不必，因此通过对误差传播的分析并结合计算过程中的实践经验，得出了数值计算中应注意的若干原则。

(1) 尽量避免两个相近的数相减。数值计算中，两个相近的数相减会严重损失有效数字，也会造成计算结果相对误差变得很大。如  $x = 532.65$  和  $y = 532.32$  都具有 5 位有效数字，但  $x - y = 0.33$  只有两位有效数字。要避免这种现象的发生所采取的措施就是改变计算方法。