

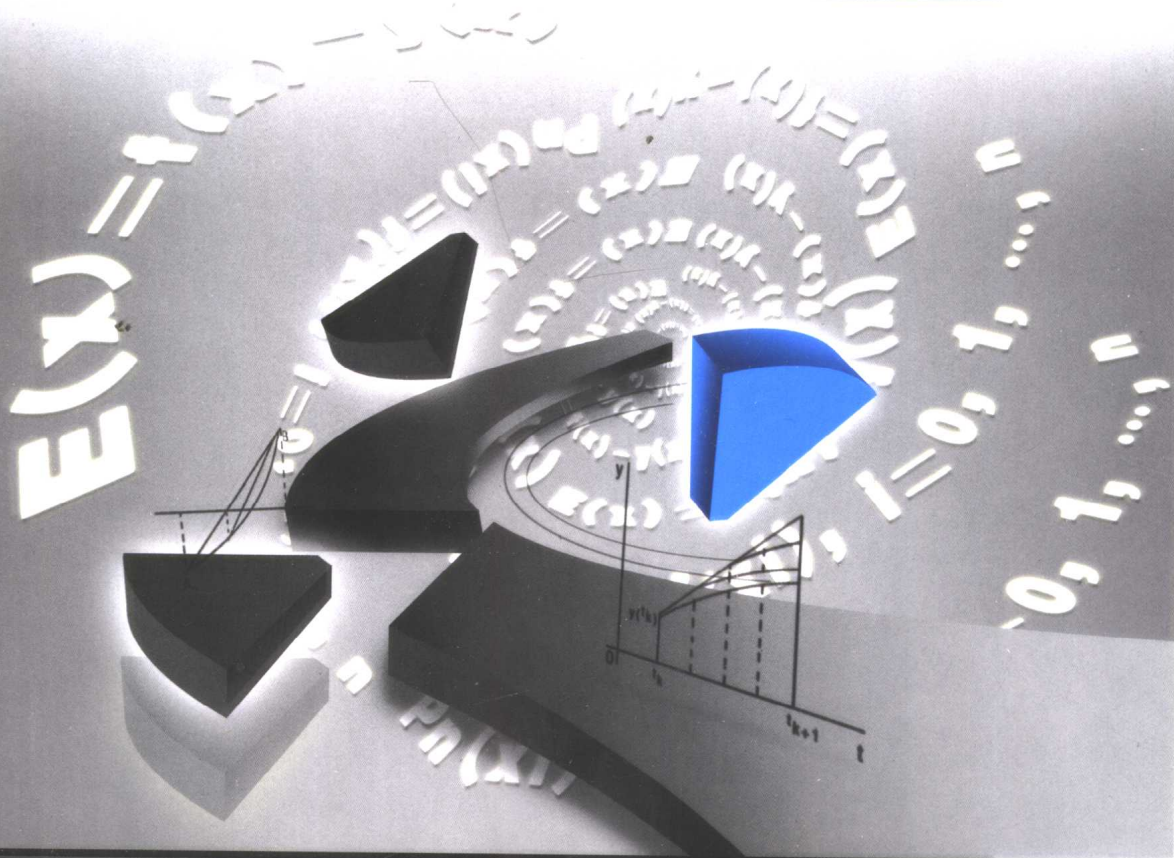
21世纪重点大学规划教材



普通高等教育“十一五”国家级规划教材

徐士良 主编

# 数值分析与算法



机械工业出版社  
CHINA MACHINE PRESS

配电子教案

普通高等教育“十一五”国家级规划教材  
21世纪重点大学规划教材

# 数值分析与算法

徐士良 主编



机械工业出版社

本书以数值分析为基础,介绍算法设计与分析,并给出了工程上常用的、行之有效的具体算法。

全书共分9章。主要内容包括:算法概念与误差分析,矩阵运算与线性方程组的求解,矩阵特征值的计算,非线性方程与方程组的求解,代数插值法,函数逼近与拟合,数值积分,常微分方程数值解,连分式及其新算法。对各章的主要算法,给出了C语言描述。

本书可以作为高等理工院校非数学专业的“数值分析”或“计算方法”等课程的教材,也可供广大工程技术人员参考。

## 图书在版编目(CIP)数据

数值分析与算法/徐士良主编. —北京:机械工业出版社, 2007.1

21世纪重点大学规划教材

ISBN 978-7-111-20668-2

I. 数… II. 徐… III. 数值计算-高等学校-教材 IV. 0241

中国版本图书馆CIP数据核字(2006)第165185号

机械工业出版社(北京市百万庄大街22号 邮政编码100037)

责任编辑:车忱 版式设计:霍永明

责任校对:张晓蓉 责任印制:洪汉军

北京京丰印刷厂印刷

2007年3月第1版第1次印刷

184mm×260mm·25.5印张·633千字

0 001—5 000册

标准书号:ISBN 978-7-111-20668-2

定价:35.00元

凡购本书,如有缺页、倒页、脱页,由本社发行部调换

销售服务热线电话:(010) 68326294

购书热线电话:(010) 88379639 88379641 88379643

编辑热线电话:(010) 88379739

封面无防伪标均为盗版

# 出版说明

“211工程”是“重点大学和重点学科建设项目”的简称，是国家“九五”期间惟一的教育重点项目。

进入“211工程”的100所学校拥有全国32%的在校本科生、69%的硕士生、84%的博士生，以及87%的有博士学位的教师；覆盖了全国96%的国家重点实验室和85%的国家重点学科。相对而言，这批学校中的教授、教师有着深厚的专业知识和丰富的教学经验，其中不少教师对我国高等院校的教材建设做过很多重要的工作。为了有效地利用“211工程”这一丰富资源，实现以重点建设推动整体发展的战略构想，机械工业出版社推出了“21世纪重点大学规划教材”。

本套教材以重点大学、重点学科的精品教材建设为主要任务，组织知名教授、教师进行编写。教材适用于高等院校计算机及其相关专业，选题涉及公共基础课、硬件、软件、网络技术，内容紧密贴合高等院校相关学科的课程设备和培养目标，注重教材的科学性、实用性、通用性，在同类教材中具有一定的先进性和权威性。

为了体现建设“立体化”精品教材的宗旨，本套教材为主干课程配备了电子教案、学习指导、习题解答、课程设计、毕业设计指导等内容。

机械工业出版社

# 前 言

本书是作者二十多年教学实践的总结。其内容是以数值分析为基础，以实际应用为目的，以计算机作为计算工具，对工程中常见的数值计算问题，建立行之有效的算法。为此，本书一开始就强调算法设计与分析的基本方法。通过例题说明方法的本质，忽略了许多数学上的繁琐证明过程。

全书共分9章，各章的主要内容如下。

第1章绪论。这一章是本书的基础，主要包括：误差与运算误差，算法的基本概念，数值型算法的基本特点，算法设计的基本方法，对算法的复杂度分析以及数值型算法的稳定性分析。

第2章矩阵与线性方程组。主要包括：一般线性方程组的直接解法与迭代解法，带型方程组的解法，求解对称正定方程组的共轭梯度法，矩阵的三角分解与QR分解，矩阵求逆，最后还介绍了求解托伯利兹系统的方法。

第3章矩阵特征值。主要包括：计算绝对值最大的特征值的乘幂法，求对称矩阵特征值的雅可比方法，求一般实矩阵全部特征值的QR方法。

第4章非线性方程与方程组。主要包括：求方程实根的各种迭代法，求多项式方程全部根的QR方法，求解非线性方程组的牛顿法、拟牛顿法等。

第5章代数插值法。主要包括：拉格朗日插值法，埃特金逐步插值法，牛顿插值法，埃尔米特插值法，样条插值法。

第6章函数逼近与拟合。主要包括：正交多项式的基本概念，最佳一致逼近多项式，最佳均方逼近多项式，最小二乘曲线拟合。

第7章数值积分与数值微分。主要包括：插值求积公式，变步长梯形与辛卜生求积法，龙贝格求积法，高斯求积法等，最后简单介绍数值微分的概念。

第8章常微分方程数值解。主要包括：求解常微分方程初值问题的欧拉方法、龙格-库塔法，高阶微分方程与微分方程组的求解，最后简单介绍线性多步法。

第9章连分式及其新算法。主要包括：连分式的基本概念，连分式插值法，求解各种数值问题的连分式解法。

各章中的主要算法，给出了C语言描述。

本书各章之间基本互相独立，学习时可以根据课时和实际需要选取其中的一些章节。阅读本书只需要具备微积分与线性代数方面的基础知识。如果要使用各算法的C函数，则需要熟悉C语言。

本书通俗易懂、例题和习题丰富，可以作为高等理工院校非数学专业的“数值分析”或“计算方法”等课程的教材，也可作为工程技术人员的自学教材与参考书。参加本书编写工作的还有白小玲、葛兵、徐娟、徐艳、马尔妮等。

限于水平，书中难免会有错误和不当之处，请读者批评指正。

徐士良

# 目 录

出版说明

前言

第 1 章 绪论 .....	1
1.1 误差与运算误差分析 .....	1
1.1.1 数值计算中误差的不可避免性 .....	1
1.1.2 绝对误差与相对误差 .....	2
1.1.3 有效数字 .....	4
1.1.4 运算误差分析 .....	7
1.2 关于算法 .....	12
1.2.1 算法的基本概念 .....	12
1.2.2 数值型算法的特点 .....	13
1.2.3 算法设计基本方法 .....	15
1.2.4 算法的复杂度 .....	27
1.2.5 数值型算法的稳定性 .....	31
1.3 习题 .....	35
第 2 章 矩阵与线性方程组 .....	37
2.1 一般线性方程组的直接解法 .....	37
2.1.1 高斯消去法 .....	38
2.1.2 选主元 .....	40
2.1.3 高斯-约当消去法 .....	48
2.2 带型方程组 .....	54
2.2.1 三对角方程组 .....	54
2.2.2 一般带型方程组 .....	58
2.3 线性方程组的迭代解法 .....	65
2.3.1 简单迭代法 .....	65
2.3.2 高斯-赛德尔迭代法 .....	68
2.3.3 松弛法 .....	71
2.4 共轭梯度法 .....	71
2.4.1 几个基本概念 .....	72
2.4.2 共轭梯度法 .....	73
2.5 矩阵分解 .....	80
2.5.1 矩阵的三角分解 .....	80
2.5.2 矩阵的 QR 分解 .....	86
2.6 矩阵求逆 .....	94
2.6.1 原地工作的矩阵求逆 .....	95
2.6.2 全选主元矩阵求逆 .....	99
2.7 托伯利兹系统 .....	107

2.7.1 托伯利兹矩阵求逆的快速算法 .....	107
2.7.2 求解托伯利兹型线性方程组的递推算法 .....	115
2.8 习题 .....	120
<b>第3章 矩阵特征值</b> .....	<b>123</b>
3.1 计算绝对值最大的特征值的乘幂法 .....	123
3.2 求对称矩阵特征值的雅可比方法 .....	126
3.3 QR方法求一般实矩阵的全部特征值 .....	138
3.3.1 QR方法的基本思想 .....	138
3.3.2 化一般实矩阵为上H矩阵 .....	139
3.3.3 双重步QR方法求矩阵特征值 .....	142
3.4 习题 .....	151
<b>第4章 非线性方程与方程组</b> .....	<b>152</b>
4.1 方程求根的基本思想 .....	152
4.1.1 方程求根的基本过程 .....	152
4.1.2 对分法求方程的实根 .....	154
4.1.3 简单迭代法 .....	157
4.2 埃特金迭代法 .....	161
4.3 牛顿迭代法与插值法 .....	164
4.3.1 牛顿迭代法 .....	164
4.3.2 插值法 .....	169
4.4 控制迭代过程结束的条件 .....	172
4.5 QR方法求多项式方程的全部根 .....	174
4.6 非线性方程组的求解 .....	176
4.6.1 牛顿法 .....	177
4.6.2 拟牛顿法 .....	179
4.7 习题 .....	184
<b>第5章 代数插值法</b> .....	<b>186</b>
5.1 插值的基本概念 .....	186
5.2 拉格朗日插值法 .....	188
5.2.1 拉格朗日插值多项式的构造 .....	188
5.2.2 插值多项式的余项 .....	197
5.2.3 插值的逼近性质 .....	199
5.3 埃特金逐步插值法 .....	200
5.4 牛顿插值法 .....	208
5.4.1 差商及其牛顿插值公式 .....	208
5.4.2 差分与等距结点插值公式 .....	212
5.5 埃尔米特插值法 .....	215
5.6 样条插值法 .....	219
5.6.1 样条函数 .....	219
5.6.2 三次样条插值函数的构造 .....	219
5.7 习题 .....	240
<b>第6章 函数逼近与拟合</b> .....	<b>243</b>

6.1 正交多项式 .....	243
6.1.1 正交多项式的构造 .....	244
6.1.2 切比雪夫多项式 .....	246
6.1.3 勒让德多项式 .....	252
6.1.4 其他常用的多项式 .....	253
6.2 最佳一致逼近多项式 .....	255
6.2.1 一致逼近的基本概念 .....	255
6.2.2 最佳一致逼近多项式 .....	256
6.2.3 里米兹算法 .....	259
6.3 最佳均方逼近多项式 .....	264
6.3.1 均方逼近的基本概念 .....	264
6.3.2 最佳均方逼近多项式 .....	264
6.4 最小二乘曲线拟合 .....	266
6.4.1 最小二乘曲线拟合的基本概念 .....	266
6.4.2 用正交多项式作最小二乘曲线拟合 .....	271
6.5 习题 .....	276
<b>第7章 数值积分与数值微分 .....</b>	<b>278</b>
7.1 插值求积公式 .....	278
7.2 变步长求积法 .....	282
7.2.1 变步长梯形求积法 .....	282
7.2.2 变步长辛卜生求积法 .....	285
7.3 龙贝格求积法 .....	288
7.4 高斯求积法 .....	292
7.4.1 代数精度的概念 .....	292
7.4.2 什么是高斯求积法 .....	293
7.4.3 几种常用的高斯求积公式 .....	296
7.5 高振荡函数的求积法 .....	302
7.6 数值微分 .....	310
7.7 习题 .....	311
<b>第8章 常微分方程数值解 .....</b>	<b>313</b>
8.1 常微分方程数值解的基本思想 .....	313
8.2 欧拉方法 .....	316
8.2.1 基本公式 .....	316
8.2.2 误差分析 .....	318
8.2.3 步长的自动选择 .....	319
8.2.4 改进的欧拉公式 .....	320
8.3 龙格-库塔法 .....	321
8.4 一阶微分方程组与高阶微分方程 .....	324
8.4.1 一阶微分方程组 .....	324
8.4.2 高阶微分方程 .....	336
8.5 线性多步法 .....	337
8.5.1 阿当姆斯方法 .....	338
8.5.2 哈密方法 .....	344



8.6 常微分方程数值解法的相容性、收敛性与稳定性 .....	351
8.7 习题 .....	353
<b>第9章 连分式及其新算法</b> .....	<b>355</b>
9.1 连分式 .....	355
9.1.1 连分式的基本概念 .....	355
9.1.2 连分式的主要性质 .....	358
9.2 函数连分式 .....	361
9.2.1 函数连分式的基本概念 .....	361
9.2.2 函数连分式的主要性质 .....	362
9.2.3 函数连分式的计算 .....	363
9.3 变换级数为连分式 .....	365
9.4 连分式插值法 .....	367
9.4.1 连分式插值的基本概念 .....	367
9.4.2 连分式插值函数的构造 .....	367
9.4.3 连分式逐步插值 .....	373
9.5 方程求根的连分式解法 .....	374
9.6 一维积分的连分式解法 .....	378
9.7 常微分方程初值问题的连分式解法 .....	383
9.8 习题 .....	392
<b>附录 各章习题部分参考答案</b> .....	<b>394</b>
<b>参考文献</b> .....	<b>400</b>

# 第 1 章 绪 论

## 1.1 误差与运算误差分析

### 1.1.1 数值计算中误差的不可避免性

误差在数值计算中是不可避免的。也就是说，数值计算方法在绝大多数情况下不存在绝对的严格和精确。

不可否认，由于计算机技术的发展，许多复杂的数值计算问题才能得以解决（这些问题用手算是不可想象的），但计算机与任何计算工具一样，它所处理的数值型数据只能是近似的，如果处理不当，这些近似的数据经过大量的运算后，其产生的误差有可能相当大。

为了说明数值计算过程中误差的来源，下面简单介绍在用计算机解决实际问题时，各主要步骤中所引进的各种误差。

#### (1) 构造数学模型

为了便于进行数值计算，一般需要首先将实际问题归纳为数学问题，这就是常说的需要建立一个合适的数学模型。

在将实际问题归纳为数学问题时，通常总要附加许多限制，并且要忽略一些次要的因素，以便建立一个“理想化”的数学模型。因此，这样得到的数学模型实际上只是客观现象的一种近似描述。而这种经过归纳后的数学描述上的近似，必然也就引进了误差。这种数学描述上的近似所引进的误差称为模型误差。

在将实际问题归纳为数学问题的过程中，除了模型误差外，还有一种很重要的误差，就是在构造数学模型时，为了对问题本身作抽象近似，除了忽略一些次要因素外，还需要对主要因素通过实验观测取得各种有效数据，并对这些数据进行分析综合，从而确定数学模型中的各种参数。由于条件的限制，通过实验观测到的数据与真值之间往往有一定差异，这也给计算引进了一定的误差。这种误差称为观测误差。

#### (2) 制定解题方案，确定计算的近似公式

数学模型建立后，还不能直接用计算机解决问题。这是因为，计算机只能作一些它能够运行的、并且是有限次的运算或判断，以及在一些规定的设备上输入与输出。因此，还必须为数学模型建立一个便于用计算机进行计算的近似公式。

大家知道，许多数学运算（如微分、积分与无穷级数求和等）是通过极限过程来定义的，而实际上计算机只能完成有限次的算术运算与逻辑运算。因此，在实际应用时，还需要将数学模型变成实际可行的解题方案，即将数学模型加工成算术运算与逻辑运算的有限序列。而这种加工又往往表现为对某种无穷过程的“截断”或计算方法的近似。例如，对于收敛的无穷级数，通常用它前面的有限项之和来近似代替无穷级数的和，实际上抛弃了无穷级数后面的无穷多项，由此便产生了误差。又如，用梯形公式计算积分的近似数，这种方法本

身就有一定的误差。这类误差统称为方法误差或截断误差。

### (3) 上机计算

解题方案确定之后，就可以通过某种工具来具体描述解题步骤，然后编制计算机程序，调试通过后就可以在计算机上正式运行，最后得到所需要的结果。

计算机科学的发展，为科学计算以及数据处理提供了高速和高精度的计算工具。但计算机与任何计算工具一样，总是受有效数字位数的限制，在进行数值计算时，其处理的数据总是近似的。在计算机中，任何数据都要转换成二进制形式才能进行处理，而绝大部分的数值型数据是无法精确地用二进制形式表示的，也就是说，即使是一个准确的数，为了用计算机进行处理，在转换成二进制数时就变成近似的。这就说明，在计算机中，参加运算的数据只能具有有限位的有效数字，其超过部分将被无情地处理掉，即产生了误差。这种误差称为舍入误差。

由上所述，在数值计算过程中，误差的产生是不可避免的，误差的类型也是各种各样的，它们会直接影响到计算结果的准确性。

虽然数值计算中的误差是不可避免的，但是，在解决实际问题时，应该尽量减少产生误差的机会，尽量减小某些误差或将它们限制在许可的范围之内。这是因为，误差在计算过程中会产生不好的效应。例如，某个参数由于观测引进的误差可能是微不足道的，或者少量的舍入误差对中间的计算结果影响不大，但是，经过计算机的千百万（甚至更多）次运算以后，积累的误差就可能大得惊人。初始数据的微小误差也可能会引起严重错误，甚至会导致完全错误的结果。

## 1.1.2 绝对误差与相对误差

### 1. 绝对误差

**定义 1-1** 设  $x$  为准确数， $x^*$  为其近似数。则

$$E(x) = x - x^*$$

称为近似数  $x^*$  关于准确数  $x$  的绝对误差。

一般来说，由于准确数  $x$  是未知的，因此，无法根据定义 1-1 准确地计算出某个近似数的绝对误差，而只能根据测量或计算的具体情况估计出误差绝对值的一个范围，也就是估计出  $|E(x)|$  的上界。

设

$$|E(x)| = |x - x^*| \leq \eta$$

则称  $\eta$  为近似数  $x^*$  关于准确数  $x$  的绝对误差限。

前面说过，一般无法计算出由定义 1-1 所定义的绝对误差，因此，工程上就将绝对误差限称为绝对误差。在本书中，如果没有特殊说明，绝对误差即指绝对误差限，有时简称为误差。

当估计出近似数  $x^*$  关于准确数  $x$  的绝对误差限  $\eta$  后，工程上可以用以下两种方法表示准确数  $x$  所在的范围：

$$x^* - \eta \leq x \leq x^* + \eta$$

或

$$x = x^* \pm \eta$$

在计算函数值  $f(x)$  时, 当自变量  $x$  有一个误差时, 其计算得到的函数值也有一个误差。如果给出了自变量  $x$  的绝对误差为  $E(x)$ , 则函数值的绝对误差可以用下式来估计:

$$E[f(x)] = f'(x)E(x)$$

## 2. 相对误差

绝对误差的大小反映了近似数偏离准确数的程度, 还不能完全反映近似数的准确程度。例如, 有两个量  $x$  和  $y$ , 其中  $x = 10 \pm 1$ ,  $y = 1000 \pm 5$ 。显然, 近似数  $y^* = 1000$  的绝对误差比近似数  $x^* = 10$  的绝对误差大了 4 倍, 但并不能说  $y^*$  的准确程度要比  $x^*$  差, 实际上正好相反,  $y^*$  的准确程度要优于  $x^*$ 。

为了能够确切地表示一个近似数的准确程度, 需要引进相对误差的概念。

**定义 1-2** 设  $x$  为准确数,  $x^*$  为其近似数。则

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

称为近似数  $x^*$  关于准确数  $x$  的相对误差。

实际上, 由于准确数  $x$  一般是不知道的, 因此, 相对误差通常又定义为

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

由上述定义可以看出, 相对误差表示近似数  $x^*$  关于准确数  $x$  的绝对误差  $E(x)$  与近似数本身之比, 因而更客观地反映了该近似数的准确程度。

和绝对误差一样, 由于准确数  $x$  一般是不知道的, 其绝对误差  $E(x) = x - x^*$  无法准确地算出, 因此也就无法确定出相对误差  $E_r(x)$  的准确数, 只能估计出它的一个范围。

如果

$$|E_r(x)| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \delta$$

则称  $\delta$  为近似数  $x^*$  关于准确数  $x$  的相对误差限。

在实际应用中, 就将相对误差限称为相对误差。在本书中, 如果没有特殊说明, 相对误差即指相对误差限。

根据相对误差的定义, 相对误差限  $\delta$  与绝对误差限  $\eta$  之间有如下关系:

$$\delta = \left| \frac{\eta}{x^*} \right|$$

**【例 1-1】** 设  $x$  的绝对误差为  $\eta$ , 试估计  $f(x) = e^x$  的相对误差。

**解:**  $|E_r[f(x)]| = \left| \frac{E[f(x)]}{f(x)} \right| = \left| \frac{f'(x)E(x)}{f(x)} \right| = \left| \frac{e^x E(x)}{e^x} \right| = |E(x)| = \eta$

**【例 1-2】** 计算球体积要使相对误差限为 1%, 问度量半径  $R$  时允许的相对误差限是多少?

**解:** 球体积的计算公式为

$$V(R) = \frac{4}{3} \pi R^3$$

当半径  $R$  有一误差  $E(R)$  时, 球体积的相对误差为

$$|E_r[V(R)]| = \left| \frac{E[V(R)]}{V(R)} \right| = \left| \frac{V'(R)E(R)}{V(R)} \right| = \frac{4\pi R^2 E(R)}{\frac{4}{3} \pi R^3} = 3 \left| \frac{E(R)}{R} \right| = 3|E_r(R)|$$

现要求  $|E_r[V(R)]| = 3|E_r(R)| \leq 1\%$ , 即  $|E_r(R)| \leq 0.3333\%$ 。

### 1.1.3 有效数字

在实际应用中,除了用相对误差来反映一个近似数的准确程度外,还经常用有效数字的位数来反映近似数的准确程度。

**定义 1-3** 设  $x$  为准确数,  $x^*$  为其近似数。若

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-k}$$

则称用  $x^*$  近似表示  $x$  时准确到小数点后第  $k$  位; 并称从小数点之后的第  $k$  位数字起直到最左边的非零数字之间的所有数字为有效数字; 称有效数字的位数为有效数位。

**定义 1-4** 设  $x$  为准确数,  $x^*$  为其近似数, 且表示成如下形式:

$$x^* = \pm 10^m (x_1 \times 10^{-1} + x_2 \times 10^{-2} + \cdots + x_n \times 10^{-n})$$

其中,  $x_1, x_2, \dots, x_n$  都是 0~9 十个数字之一, 且  $x_1 \neq 0$ ,  $n$  是正整数,  $m$  是整数。若

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

则称近似数  $x^*$  具有  $n$  位有效数字。

**【例 1-3】** 设  $\sqrt{20} = 4.472136$  具有 7 位有效数字, 试确定下列各近似数的有效数字位数:

(1)  $\sqrt{20} \approx 4.42$       (2)  $\sqrt{20} \approx 4.47164$       (3)  $\sqrt{20} \approx 4.469576$

**解:** 设  $x = \sqrt{20} = 4.472136$ ,  $x^*$  为各近似数。

(1) 设  $\sqrt{20} \approx x^* = 4.42 = 10^1 \times 0.442$ 。其中  $m = 1$ 。

$$|x - x^*| = |4.472136 - 4.42| = 0.052136 \leq 0.5 \times 10^0 = 0.5 \times 10^{m-1}$$

因此, 根据定义 1-3 有  $k = 0$ , 即该近似数准确到个位数, 共有 1 位有效数字。根据定义 1-4 有  $n = 1$ , 同样具有 1 位有效数字。

(2) 设  $\sqrt{20} \approx x^* = 4.47164 = 10^1 \times 0.447164$ 。其中  $m = 1$ 。

$$|x - x^*| = |4.472136 - 4.47164| = 0.000396 \leq 0.5 \times 10^{-3} = 0.5 \times 10^{m-4}$$

因此, 根据定义 1-3 有  $k = 3$ , 即该近似数准确到小数点后第 3 位, 共有 4 位有效数字。根据定义 1-4 有  $n = 4$ , 同样是具有 4 位有效数字。

(3) 设  $\sqrt{20} \approx x^* = 4.469576 = 10^1 \times 0.4469576$ 。其中  $m = 1$ 。

$$|x - x^*| = |4.472136 - 4.469576| = 0.00256 \leq 0.5 \times 10^{-2} = 0.5 \times 10^{m-3}$$

因此, 根据定义 1-3 有  $k = 2$ , 即该近似数准确到小数点后第 2 位, 共有 3 位有效数字。根据定义 1-4 有  $n = 3$ , 同样是具有 3 位有效数字。

由这个例子可以看出, 关于有效数字的定义 1-3 与定义 1-4 是等价的。

**【例 1-4】** 设近似数  $x^* = 0.937$  具有 3 位有效数字, 估计用  $x^*$  代替  $x$  时的相对误差。并估计计算函数  $f(x) = \sqrt{1-x}$  值时的绝对误差与相对误差。

**解:** 因为  $x^* = 0.937$  具有 3 位有效数字, 所以

$$|E(x)| = |x - x^*| \leq 0.0005.$$

由此可得用  $x^*$  代替  $x$  时的相对误差为

$$|E_r(x)| = \left| \frac{x - x^*}{x} \right| \leq \frac{0.0005}{0.937} \approx 0.000534 = 0.0534\%$$

函数  $f(x) = \sqrt{1-x}$  值时的绝对误差为

$$\begin{aligned} |E[f(x)]| &= |f(x) - f(x^*)| = |f'(x^*)E(x)| = \left| \frac{-1}{2\sqrt{1-x^*}} E(x) \right| \\ &= \frac{0.0005}{2\sqrt{1-0.937}} \approx 0.001 \end{aligned}$$

函数  $f(x) = \sqrt{1-x}$  值时的相对误差为

$$|E_r[f(x)]| = \frac{|E[f(x)]|}{|f(x^*)|} = \frac{0.001}{\sqrt{1-0.937}} \approx 0.004 = 0.4\%$$

一个近似数的有效数字位数反映了该近似数的准确程度，而相对误差也反映了近似数的准确程度。因此，一个近似数的有效数字位数与该近似数的相对误差具有一定的联系。在实际应用中，可以根据一个近似数的有效数字位数确定该近似数的相对误差，同样，也可以由近似数的相对误差来确定该近似数的有效数字的位数。

下面给出反映近似数的有效数字位数与相对误差之间关系的两个基本结论。

**定理 1-1** 若近似数  $x^*$  具有  $n$  位有效数字，则其相对误差满足

$$|E_r(x)| \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)}$$

其中， $x_1$  为最左边的一位有效数字。

**证明** 设近似数  $x^*$  的表示形式为

$$x^* = \pm 10^m (x_1 \times 10^{-1} + x_2 \times 10^{-2} + \cdots + x_n \times 10^{-n} + \cdots)$$

且  $x_1 \neq 0$ 。显然有

$$|x^*| \geq x_1 \times 10^{m-1}$$

又因为已知  $x^*$  具有  $n$  位有效数字，则由有效数字的定义 1-4 知

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

因此，近似数  $x^*$  近似代替  $x$  时的相对误差为

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

定理得证。

**【例 1-5】** 为了要取  $\sqrt{20}$  的一个近似数，使其相对误差不超过 0.1%，则所取的近似数应具有多少位有效数字？

**解：** 设为  $x = \sqrt{20}$  取的近似数应具有  $n$  位有效数字，其相对误差满足

$$|E_r(x)| \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)} \leq 0.1\%$$

其中， $x_1 = 4$  ( $\sqrt{20}$  的最左边的有效数字为 4)。即

$$\frac{1}{2 \times 4} \times 10^{-(n-1)} \leq 0.1\%$$

解得  $n \geq 3.097$ 。取  $n = 4$ 。即所取的近似数应具有 4 位有效数字，就可以保证其相对误差不超过 0.1%。

需要指出的是，定理 1-1 中的条件只是充分条件，而不是必要条件。即：如果近似数  $x^*$

具有  $n$  位有效数字, 则其相对误差一定满足

$$|E_r(x)| \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)}$$

但相对误差满足

$$|E_r(x)| \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)}$$

的近似数不一定具有  $n$  位有效数字。下面的例子说明了这个问题。

**【例 1-6】** 设  $x = \sin 29^\circ 20' = 0.4900$ 。现取一个近似数为

$$x^* = 0.484$$

其相对误差为

$$|E_r(x)| = \left| \frac{x - x^*}{x} \right| = \left| \frac{0.4900 - 0.484}{0.49} \right| \leq 0.0125 = \frac{2}{2 \times 4} \times 10^{-(2-1)}$$

即  $n=2$ 。但实际上  $x^* = 0.484$  不具有 2 位有效数字, 因为其绝对误差

$$|x - x^*| = |0.4900 - 0.484| = 0.0060 > 0.005$$

不满足由定义 1-3 中规定的具有 2 位有效数字的条件。

**定理 1-2** 若一个近似数  $x^*$  的相对误差为

$$|E_r(x)| \leq \frac{1}{2(x_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)}$$

则该近似数至少准确到  $n$  位有效数字(即该近似数至少具有  $n$  位有效数字)。其中  $x_1$  为最左边的一位有效数字。

**证明** 设近似数  $x^*$  的表示形式为

$$x^* = \pm 10^m (x_1 \times 10^{-1} + x_2 \times 10^{-2} + \cdots + x_n \times 10^{-n} + \cdots)$$

且  $x_1 \neq 0$ 。显然有

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

又因为

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

所以有

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

由有效数字的定义 1-4 可知,  $x^*$  具有  $n$  位有效数字。

定理得证。

在实际应用中, 如果已知某近似数的相对误差满足定理 1-2 中的条件, 则可以认为该近似数具有  $n$  位有效数字; 或者为了要使所取的近似数具有  $n$  位有效数字, 则应取其相对误差满足定理 1-2 中条件的近似数。

同样需要指出的是, 定理 1-2 中的条件只是充分条件, 而不是必要条件。即: 如果某近似数  $x^*$  的相对误差满足

$$|E_r(x)| \leq \frac{1}{2(x_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)}$$

则其一定具有  $n$  位有效数字; 但具有  $n$  位有效数字的近似数, 其相对误差不一定满足

$$|E_r(x)| \leq \frac{1}{2(x_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)}$$

下面的例子将说明这个问题。

**【例 1-7】** 设  $x = \sqrt{20} = 4.472136$  具有 7 位有效数字。现取一个近似数

$$x^* = 4$$

其绝对误差为

$$|x - x^*| = |4.472136 - 4| \leq 0.5 = \frac{1}{2} \times 10^{1-1}$$

由有效数字的定义 1-4 可知, 近似数  $x^* = 4$  具有 1 位有效数字。但其相对误差

$$|E_r(x)| = \left| \frac{x - x^*}{x} \right| = \frac{0.472136}{4.472136} \geq \frac{2}{2(4+1)} \times 10^{-(1-1)} = 0.1$$

最后需要说明的是, 在书写或表示一个近似数时, 通常有以下两种方式:

(1) 注明该近似数  $x^*$  及其绝对误差  $\eta$ , 即将近似数写成  $x^* \pm \eta$ 。

(2) 在没有注明近似数的绝对误差时, 则默认该近似数准确到末位数字。在这种情况下, 要求从其最左边的非零数字起, 直到最右边的一位数字止, 都是有效数字。例如, 0.00203 具有 3 位有效数字, 分别为 2, 0, 3; 3.14 也具有 3 位有效数字, 分别为 3, 1, 4。特别需要指出的是, 在这种表示方式中, 0.23 与 0.2300 的有效数字的位数是不一样的, 前者具有 2 位有效数字, 其绝对误差不超过 0.005, 而后者具有 4 位有效数字, 其绝对误差不超过 0.0005。

### 1.1.4 运算误差分析

前面已经提到, 在数值计算过程中, 误差是不可避免的。特别需要指出的是, 由于受计算机 (其他计算工具也是如此) 有效数字位数的限制, 在实际运算过程中的每一步都不可避免地要产生误差。因此, 尽量减小运算过程中每一步的误差, 或者将误差限制在最小的范围之内, 是数值计算中要重点考虑的问题之一。

有运算就会产生误差, 但不同的运算, 或不同的运算步骤所产生的误差是不一样的。下面举例说明不同的运算产生不同误差的情况。

**【例 1-8】** 设函数

$$g(x) = 10^3(1 - \cos x)$$

用 4 位数学用表计算  $g(2^\circ)$  的近似值。

解: 求解这个问题可以用以下两种方法。

**方法 1**

查 4 位数学用表得  $\cos 2^\circ = 0.9994$ 。因此

$$g(2^\circ) = 10^3(1 - \cos 2^\circ) = 10^3(1 - 0.9994) = 0.6$$

**方法 2**

利用三角恒等式

$$1 - \cos x = 2\sin^2(x/2)$$

得到

$$g(x) = 10^3(1 - \cos x) = 2 \times 10^3 \sin^2(x/2)$$



查 4 位数学用表得  $\sin 1^\circ = 0.0175$ 。因此

$$g(2^\circ) = 2 \times 10^3 \sin^2 1^\circ = 2 \times 10^3 \times (0.0175)^2 = 0.6125$$

在以上两种解法中，初始数据（查 4 位数学用表得到）都准确到小数点后第四位，但最后得到的结果并不相同。究竟哪个结果更准确一些呢？下面用相对误差的概念进行分析。

在方法 1 中，假设准确值  $A = \cos 2^\circ$ ，则函数的准确值为

$$g(2^\circ) = 10^3(1 - A)$$

$A$  的近似值为  $A^* = 0.9994$ ，则函数的近似值为

$$g^*(2^\circ) = 10^3(1 - A^*)$$

其中， $|A - A^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$ 。由此可以计算函数的相对误差为

$$\begin{aligned} |E_r[g(2^\circ)]| &= \left| \frac{E[g(2^\circ)]}{g^*(2^\circ)} \right| = \left| \frac{g(2^\circ) - g^*(2^\circ)}{g^*(2^\circ)} \right| = \left| \frac{10^3(1 - A) - 10^3(1 - A^*)}{10^3(1 - A^*)} \right| \\ &= \left| \frac{A - A^*}{1 - A^*} \right| \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{-4}}{1 - 0.9994} = \frac{1}{12} = 8.3\% \end{aligned}$$

在方法 2 中，假设准确值  $B = \sin 1^\circ$ ，则函数的准确值为

$$g(2^\circ) = 2 \times 10^3 \times B^2$$

$B$  的近似值为  $B^* = 0.0175$ ，则函数的近似值为

$$g^*(2^\circ) = 2 \times 10^3 \times (B^*)^2$$

其中， $|B - B^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$ 。由此可以计算函数的相对误差为

$$\begin{aligned} |E_r[g(2^\circ)]| &= \left| \frac{E[g(2^\circ)]}{g^*(2^\circ)} \right| = \left| \frac{g(2^\circ) - g^*(2^\circ)}{g^*(2^\circ)} \right| = \left| \frac{2 \times 10^3 \times B^2 - 2 \times 10^3 \times (B^*)^2}{2 \times 10^3 \times (B^*)^2} \right| \\ &= \left| \frac{B^2 - (B^*)^2}{(B^*)^2} \right| = \frac{|B - B^*| \cdot |B + B^*|}{(B^*)^2} \\ &= \frac{2|B - B^*|}{B^*} \leq \frac{2 \times \frac{1}{2} \times 10^{-4}}{0.0175} = \frac{1}{175} = 0.57\% \end{aligned}$$

其中， $B + B^* \approx 2B^*$ 。

由以上分析可以看出，方法 2 所得结果的相对误差比解法 1 所得结果的相对误差要小，即方法 2 所得的结果更准确一些。实际上，通过更精确的计算，具有 6 位有效数字的答案为 0.609173。

上述例子说明，同一个计算问题，可以有多个运算过程，而不同的运算过程所得到的结果其准确程度是不同的。因此，在进行数值计算时，应该考虑各种运算过程中产生的误差。

在分析运算误差时，通常要考虑以下一些原则。

### 1. 两个相近的近似数相减，会严重丢失有效数字

当两个近似数相近时，这两个近似数的最左边若干位数字相同，因此，它们作减法运算后，最左边的有效数字变成了 0，因而最终结果中的有效数字位数会减少。对于这种现象，可以通过相对误差的概念来说明。

假设要作如下减法运算：