# 数值计算方法

（第二版）

丁丽娟　程杞元　编著

北京理工大学出版社
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

# 数值计算方法

（第二版）

丁丽娟　程杞元　编著

北京理工大学出版社
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

# 内 容 简 介

本书是根据国家教委关于"数值计算方法"课程的基本要求，为理工科大学硕士研究生及高年级本科生编写的教材。包含了数值代数、数值分析与微分方程数值解法的基本内容。本书不仅介绍了求各类数学问题的近似解的最基本、常用的数值方法，而且着重阐明构造算法的基本思想与原理。在内容安排上，既注重理论的严谨性，又注重方法的实用性。每章配备了例题与数值计算应用实例，并附有丰富的习题和上机实习题，以帮助读者巩固和加深理解有关内容。书中对常用的方法都给出了比较详细的算法，书末附有 MATLAB 数学软件的简介，便于读者编制程序进行数值试验。



**图书在版编目(CIP)数据**

数值计算方法/丁丽娟，程杞元编著．—2 版．—北京：北京理工大学出版社，2005.8

ISBN 7-81045-317-3

Ⅰ.数… Ⅱ.①丁…②程… Ⅲ.数值计算-计算方法-高等学校-教材 Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(97)第 15709 号

出版发行 / 北京理工大学出版社
社　　址 / 北京市海淀区中关村南大街 5 号
邮　　编 / 100081
电　　话 / (010)68914775(办公室)　68944990(发行部)
网　　址 / http://www.bitpress.com.cn
电子邮箱 / chiefedit@bitpress.com.cn
经　　销 / 全国各地新华书店
印　　刷 / 北京圣瑞伦印刷厂
开　　本 / 787 毫米 × 1092 毫米　1/16
印　　张 / 19.75
字　　数 / 438 千字
版　　次 / 2005 年 8 月第 2 版　2005 年 8 月第 8 次印刷
印　　数 / 23001～27000 册　　责任校对 / 郑兴玉
定　　价 / 28.00 元　　责任印制 / 吴皓云

# 前　言

随着计算机的广泛使用与科学技术的迅速发展,科学计算已是科学研究、工程设计中的一个重要的手段,它已成为与理论分析、科学试验并驾齐驱的科学研究方法。目前,掌握和应用科学计算的基本方法或数值计算方法,已不再是数学专业的学生和专门从事科学与工程计算工作的科研人员的必备知识,大量从事力学、物理学、航空航天、信息传输、能源开发、土木工程、机械设计、医药卫生及社会科学领域的科研人员和工程技术人员,也将数值计算方法作为各自领域研究的一种重要研究工具。因此,“数值计算方法”已逐渐成为理工科大学硕士研究生和本科生的必修课程。

本书的第一版是参照国家教委关于“数值计算方法”课程的基本要求为理工科各专业硕士生及高年级本科生编写的。包含了数值代数、数值分析和微分方程数值解法的基本内容。力求全面、系统地介绍求解各类数学问题近似解的最基本、常用的方法,并且着重阐明构造算法的基本思想与原理。根据教育部“突出重概念、重方法、重应用、重能力的培养”的精神,及近几年的教学实践,我们对第一版作了修改。修改的原则如下:

1. 在保留第一版理论严谨性的前提下,更注重方法的实用性。为此,增加或替换了一些例题,以便更好地体现数值方法的优越性和如何应用数值方法求解数学问题。各章以相应的基本方法为工具,配备了数值计算的应用实例,以便读者更好地体会如何应用数值计算方法解决实际问题。

2. 在每一章的末尾,对该章介绍的内容作了简洁的评注,并对文中未讨论、近几年发展起来的计算效果很好的方法作了简单说明,给出了参考书目,以利于读者自学。

3. 强调利用数学软件,介绍了 MATLAB 软件的数学演算、数值计算和绘图的基本功能。合理地利用 MATLAB 等数学软件,可使读者将时间和精力集中到数学方法上,而不是花费在语言编程和调试程序上。

全书讲授约需 60 学时,也可选择部分章节讲授。由于编者水平有限,书中不当之处难免,恳请读者批评指正。

衷心感谢香港浸会大学研究生院院长汤涛教授,他在百忙之中仔细地审阅了全稿,提出了宝贵的建议。感谢北京理工大学研究生院和出版社的支持,使本书的修订版得以顺利出版。

**编著者**
2005 年 3 月

# 目　录

# 第一章　误　　差

## §1.1　误差的来源

数值计算方法，概括地说是“研究用于求得数学问题近似解的方法和过程”。因此，在计算过程中，误差是不可避免的。用数学方法解决实际问题，常按以下过程进行：

$$\boxed{\text{实际问题}} \xrightarrow{\text{抽象、简化}} \boxed{\text{数学模型}} \xrightarrow{\text{数值计算}} \boxed{\text{问题近似解}}$$

在此过程中，引起误差的因素很多，主要有以下几种：

1. 模型误差

实际问题的解与数学模型的解之差称为“模型误差”。

2. 观测误差

数学问题中所出现的一些参量，其值往往由观测得到，而观测不可能绝对准确，由此产生的误差称为“观测误差”。

3. 截断误差

一般数学问题常常难以求出精确解，需要简化为较易求解的问题，以简化问题的解作为原问题解的近似。如求一个收敛的无穷级数之和，总是用它的部分和作为近似值，也就是截去该级数后面的无穷多项。这样由于简化问题所引起的解的误差称为“方法误差”或“截断误差”。例如

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!} + \cdots$$

当 $|x|$ 很小时，可以用 $1 - \frac{x^2}{2}$ 作为 $\cos x$ 近似值。由交错级数判敛的莱布尼兹(Leibniz)准则，它的截断误差的绝对值不超过 $\frac{x^4}{24}$。

4. 舍入误差

在计算过程中往往要对数字进行舍入。如受机器字长的限制，无穷小数和位数很多的数必须舍入成一定的位数。这样产生的误差称为“舍入误差”。

本课程中只讨论截断误差与舍入误差对计算结果的影响。

## §1.2　绝对误差、相对误差和有效数字

### 1.2.1　绝对误差与相对误差

设 $x^*$ 为准确值 $x$ 的一个近似值，称

$$e(x^*) = x - x^* \tag{1-1}$$

为近似值 $x^*$ 的绝对误差，简称误差。一般情况下准确值 $x$ 难以求出，从而也不能算出绝对误差 $e(x^*)$ 的准确值，但可以根据测量工具或计算的情况估计出它的取值范围，即估计出误差绝对值的一个上界 $\varepsilon$

$$|e(x^*)| = |x - x^*| \leqslant \varepsilon \tag{1-2}$$

通常称 $\varepsilon$ 为近似值 $x^*$ 的绝对误差限，简称误差限。显然，误差限不是惟一的。

有了误差限及近似值，就可以得到准确值的范围

$$x^* - \varepsilon \leqslant x \leqslant x^* + \varepsilon$$

即准确值 $x$ 必定在区间 $[x^* - \varepsilon, x^* + \varepsilon]$ 内，也常记作

$$x = x^* \pm \varepsilon$$

容易看出，经过四舍五入得到的数，其误差必定不超过被保留的最后数位上的半个单位，即最后数位上的半个单位为其误差限。例如若取 $\pi$ 的近似值为 3.14，则

$$|\pi - 3.14| \leqslant 0.001\,6 \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

若取 $\pi \approx 3.142$，则

$$|\pi - 3.142| \leqslant 0.000\,41 \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

误差限的大小不能完全反映近似值的精确程度。要刻画近似值的精确程度，不仅要看绝对误差的大小，还必须考虑所测量本身的大小，由此引出了相对误差的概念。

仍设 $x^*$ 为准确值 $x$ 的近似值，称绝对误差与准确值之比为近似值 $x^*$ 的相对误差，记为 $e_r(x^*)$，即

$$e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x} = \frac{x - x^*}{x} \tag{1-3}$$

由于在计算过程中准确值 $x$ 总是未知的，故一般取相对误差为

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

可以证明，当 $|e_r(x^*)|$ 很小时，$\frac{e(x^*)}{x} - \frac{e(x^*)}{x^*}$ 是 $e_r(x^*)$ 的高阶无穷小，可以忽略不计。所以，取绝对误差与近似值之比为相对误差是合理的。

同样，相对误差也只能估计其上限。如果存在正数 $\varepsilon_r$，使得

$$|e_r(x^*)| = \left|\frac{e(x^*)}{x^*}\right| \leqslant \varepsilon_r \tag{1-4}$$

则称 $\varepsilon_r$ 为 $x^*$ 的相对误差限。显然，误差限与近似值绝对值之比 $\frac{\varepsilon}{|x^*|}$ 为 $x^*$ 的一个相对误差限。

例如由实验测得光速近似值为 $c^* = 2.997\,925 \times 10^5$ km/s，其误差限为 0.1 km/s，于是

$$\frac{\varepsilon}{|c^*|} = \frac{0.1}{2.997\,925 \times 10^5} < 4 \times 10^{-7}$$

所以 $4 \times 10^{-7}$ 是 $c^*$ 的一个相对误差限。

### 1.2.2 有效数字

有效数字是近似值的一种表示法。它既能表示近似值的大小，又能表示其精确程度。

在计算过程中,常常按四舍五入的原则取数 $x$ 的前几位数 $x^*$ 为其近似值。例如 $x=\sqrt{2}=1.414\,213\,562\cdots$ 取前四位数得近似值 $x^*=1.414$,取前八位数得近似值 $x^*=1.414\,213\,6$,前面已经提到,通过四舍五入得到的数,其绝对误差均不超过末位数字的半个单位,即

$$|\sqrt{2}-1.414|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}$$

$$|\sqrt{2}-1.414\,213\,6|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-7}$$

如果近似值 $x^*$ 的误差限是 $\frac{1}{2}\times10^{-n}$,则称 $x^*$ 准确到小数点后第 $n$ 位,并从第一个非零数字到这一位的所有数字均称为有效数字。例如 $\sqrt{2}$ 的近似值 1.414 准确到小数点后第 3 位,它具有 4 位有效数字。1.414 213 6 作为 $\sqrt{2}$ 的近似值精确到小数点后第 7 位,有 8 位有效数字。一般地,如果近似值 $x^*$ 的规格化形式为

$$x^*=\pm0.a_1a_2\cdots a_n\cdots\times10^m \tag{1-5}$$

其中 $m$ 为整数,$a_1\neq0$,$a_i(i=1,2,\cdots)$ 为 0 到 9 之间的整数。如果

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n} \tag{1-6}$$

则称近似值 $x^*$ 有 $n$ 位有效数字。

例如 $x=0.003\,400\pm\frac{1}{2}\times10^{-5}$ 表示近似值 0.003 400 准确到小数点后第 5 位,有 3 位有效数字。

上面的讨论表明,可以用有效数字位数来刻画误差限。形如式(1-5)的数,当 $m$ 一定时,其有效数字位数 $n$ 越大,则误差限越小。例如若 $x^*=1\,452.046$ 是具有 7 位有效数字的近似值,则它的误差限为

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

又若 $x^*=1\,452.0$ 是具有 5 位有效数字的近似值,则其误差限为 $\frac{1}{2}\times10^{-1}$。

下面的定理给出了相对误差限与有效数字的关系。

**定理 1.1** 若 $x$ 的近似值 $x^*=\pm0.a_1a_2\cdots a_n\times10^m(a_1\neq0)$ 有 $n$ 位有效数字,则 $\frac{1}{2a_1}\times10^{-n+1}$ 为其相对误差限。反之,若 $x^*$ 的相对误差限 $\varepsilon_r$ 满足

$$\varepsilon_r\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{-n+1}$$

则 $x^*$ 至少具有 $n$ 位有效数字。

[证明] 由式(1-6)

$$|e(x^*)|=|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n}$$

从而有

$$|e_r(x^*)|=\left|\frac{e(x^*)}{x^*}\right|\leqslant\frac{\frac{1}{2}\times10^{m-n}}{0.a_1a_2\cdots a_n\times10^m}\leqslant\frac{1}{2a_1}\times10^{-n+1}$$

所以 $\frac{1}{2a_1}\times10^{-n+1}$ 是 $x^*$ 的相对误差限。

若 $\varepsilon_r \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1}$，由式(1-4)

$$|e(x^*)| = |x^* e_r(x^*)| \leqslant 0.a_1 \cdots a_n \cdots \times 10^m \varepsilon_r$$
$$\leqslant (a_1+1) \times 10^{m-1} \times \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

由式(1-6)，$x^*$ 至少有 $n$ 位有效数字。

定理 1.1 表明，由有效数字位数可以求出相对误差限。如 $x^* = 2.72$ 是 $x = e$ 的具有 3 位有效数字的近似值，故其相对误差限为

$$\varepsilon_r = \frac{1}{2 \times 2} \times 10^{-3+1} = 0.25 \times 10^{-2}$$

## §1.3 数值计算中误差的传播

### 1.3.1 基本运算中的误差估计

本节中所讨论的基本运算是指四则运算与一些常用函数的计算。

由微分学，当自变量改变量(误差)很小时，函数的微分作为函数改变量的主要线性部分可以近似函数的改变量，故利用微分运算公式可导出误差运算公式。

设数值计算中求得的解与参量(原始数据) $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 有关，记为

$$y = f(x_1, x_2, \cdots, x_n) \tag{1-7}$$

参量的误差必定引起解的误差。设 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的近似值分别为 $x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*$，相应的解为

$$y^* = f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*) \tag{1-8}$$

假定 $f$ 在点 $(x_1^*, \cdots, x_n^*)$ 可微，则当数据误差较小时，解的绝对误差为

$$\begin{aligned} e(y^*) &= y - y^* = f(x_1, \cdots, x_n) - f(x_1^*, \cdots, x_n^*) \\ &\approx \mathrm{d}f(x_1^*, \cdots, x_n^*) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i}(x_i - x_i^*) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i} e(x_i^*) \end{aligned} \tag{1-9}$$

其相对误差为

$$\begin{aligned} e_r(y^*) &= \frac{e(y^*)}{y^*} \approx \mathrm{d}(\ln f) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i} \frac{e(x_i^*)}{f(x_1^*, \cdots, x_n^*)} \\ &= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i} \frac{x_i^*}{f(x_1^*, \cdots, x_n^*)} e_r(x_i^*) \end{aligned} \tag{1-10}$$

特别地，由式(1-9)和式(1-10)可得和、差、积、商之误差公式。

$$\begin{cases} e(x_1 \pm x_2) = e(x_1) \pm e(x_2) \\ e_r(x_1 \pm x_2) = \dfrac{x_1}{x_1 \pm x_2} e_r(x_1) \pm \dfrac{x_2}{x_1 \pm x_2} e_r(x_2) \end{cases} \tag{1-11}$$

$$\begin{cases} e(x_1x_2) \approx x_2e(x_1) + x_1e(x_2) \\ e_r(x_1x_2) \approx e_r(x_1) + e_r(x_2) \end{cases} \tag{1-12}$$

$$\begin{cases} e\left(\dfrac{x_1}{x_2}\right) \approx \dfrac{1}{x_2}e(x_1) - \dfrac{x_1}{x_2^2}e(x_2) \\ e_r\left(\dfrac{x_1}{x_2}\right) \approx e_r(x_1) - e_r(x_2) \end{cases} \tag{1-13}$$

式(1-11)~式(1-13)表明,和、差之误差为误差之和、差,积、商之相对误差为相对误差之和、差。由以上各式还可得出

$$|e(x_1 \pm x_2)| = |e(x_1) \pm e(x_2)| \leqslant |e(x_1)| + |e(x_2)| \tag{1-14}$$

$$|e_r(x_1x_2)| \approx |e_r(x_1) + e_r(x_2)| \leqslant |e_r(x_1)| + |e_r(x_2)| \tag{1-15}$$

$$\left|e_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right)\right| \approx |e_r(x_1) - e_r(x_2)| \leqslant |e_r(x_1)| + |e_r(x_2)| \tag{1-16}$$

因此,和、差的误差限不超过各数的误差限之和,积、商的相对误差限不超过各数的相对误差限之和。

**例 1** 设 $y = x^n$,求 $y$ 的相对误差与 $x$ 的相对误差之间的关系。

[解] 由式(1-10)得

$$e_r(y) = \mathrm{d}(\ln x^n) = n\mathrm{d}(\ln x) = ne_r(x)$$

所以 $x^n$ 的相对误差是 $x$ 的相对误差的 $n$ 倍。特别地,$\sqrt{x}$ 的相对误差是 $x$ 的相对误差的一半。

**例 2** 假定运算中数据都精确到两位小数,试求 $x^* = 1.21 \times 3.65 - 9.81$ 的绝对误差限和相对误差限,计算结果有几位有效数字?

[解] 由式(1-11)和式(1-12)得

$$e(x^*) = 3.65 \times e(1.21) + 1.21 \times e(3.65) - e(9.81)$$

因为式中数据都精确到两位小数,即其误差限均为$\frac{1}{2} \times 10^{-2}$,故有

$$\begin{aligned} |e(x^*)| &\leqslant 3.65 \times |e(1.21)| + 1.21 \times |e(3.65)| + |e(9.81)| \\ &\leqslant (3.65 + 1.21 + 1) \times \frac{1}{2} \times 10^{-2} = 0.0293 \end{aligned}$$

$$|e_r(x^*)| = \frac{|e(x^*)|}{|x^*|} \leqslant \frac{0.0293}{5.3935} = 0.0054$$

所以,$x^*$ 的绝对误差限为 0.029 3,相对误差限为 0.005 4,计算结果有两位有效数字。

### 1.3.2 算法的数值稳定性

计算一个数学问题,需要预先设计好由已知数据计算问题结果的运算顺序,这就是算法。例如,计算积分值

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x \qquad (n = 0,1,2\cdots)$$

由关系式

$$I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x + \int_0^1 \frac{5x^{n-1}}{x+5}\mathrm{d}x = \int_0^1 x^{n-1}\mathrm{d}x = \frac{1}{n}$$

且

$$\frac{1}{6(n+1)} < I_n < \frac{1}{5(n+1)}$$

可设计如下两种算法：

算法Ⅰ

取 $I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5}\mathrm{d}x = \ln 1.2$，按公式

$$I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1} \qquad (n = 1,2,\cdots) \tag{1-17}$$

依次计算 $I_1, I_2, \cdots$ 的近似值。

算法Ⅱ

取 $I_n^* \approx \frac{1}{2}\left[\frac{1}{6(n+1)} + \frac{1}{5(n+1)}\right]$，按公式

$$I_{k-1} = \frac{1}{5}\left(\frac{1}{k} - I_k\right) \qquad (k = n, n-1, \cdots, 1) \tag{1-18}$$

依次计算 $I_{n-1}, I_{n-2}, \cdots, I_0$ 的近似值。

分别取 $I_0^* = 0.182\,321\,55$，$I_{14}^* = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{6\times 15} + \frac{1}{5\times 15}\right) \approx 0.012\,222\,22$，按算法Ⅰ，Ⅱ的计算结果见表 1－1。

**表 1－1**

| $n$ | $I_n$（按算法Ⅰ计算） | $I_n$（按算法Ⅱ计算） |
|---|---|---|
| 0 | 0.182 321 55 | 0.182 321 55 |
| 1 | 0.088 392 25 | 0.088 392 22 |
| 2 | 0.058 038 75 | 0.058 038 92 |
| 3 | 0.043 139 58 | 0.043 138 73 |
| 4 | 0.034 302 08 | 0.034 306 33 |
| 5 | 0.028 489 58 | 0.028 468 35 |
| 6 | 0.024 218 75 | 0.024 324 91 |
| 7 | 0.021 763 39 | 0.021 232 60 |
| 8 | 0.016 183 05 | 0.018 836 99 |
| 9 | 0.030 195 88 | 0.016 926 17 |
| 10 | −0.050 979 41 | 0.015 369 14 |
| 11 | 0.345 806 12 | 0.014 063 39 |
| 12 | −0.645 697 26 | 0.013 016 36 |
| 13 | 8.305 409 38 | 0.011 841 27 |
| 14 | −41.455 618 31 | 0.012 222 22 |

由表 1－1 中结果可见，按算法Ⅰ得到 $I_{10}^* < 0$，这显然是错的，因为对任意 $n \geqslant 0$，均有

$$I_n > \frac{1}{6(n+1)} > 0$$

而按算法Ⅱ计算，尽管 $I_{14}^*$ 取值精度不高，其误差限 $\varepsilon=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{75}-\frac{1}{90}\right)\approx 0.0011$，但递推计算得到的 $I_0^*$ 却有 8 位有效数字。为什么会出现这样的现象？下面的分析说明，这是舍入误差在计算过程中传播所引起的后果。

设 $I_0^*$ 有误差 $e_0$。假设计算过程中不产生新的舍入误差，则由式(1-17)得

$$e_n = I_n - I_n^* = -5I_{n-1}+5I_{n-1}^* = -5e_{n-1} \qquad (n=1,2,\cdots)$$

从而有

$$e_n = (-5)^n e_0 \tag{1-19}$$

即原始数据 $I_0^*$ 的误差 $e_0$ 经公式(1-17)计算一次，误差就扩大到 5 倍，因而由算法Ⅰ计算出的 $I_n^*$ 的误差应是 $e_0$ 的 $5^n$ 倍。在上例中，$I_0^*$ 有 8 位有效数字，故

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\times 10^{-8}$$

由式(1-19)得

$$\varepsilon_9 = 5^9\varepsilon_0 = \frac{10^9\times 10^{-8}}{2^{10}} = \frac{10}{1\,024} > \frac{1}{2}\times 10^{-2}$$

而 $I_9^*=0.030\,195\,88$，这说明 $I_9^*$ 已无一位有效数字。

完全类似地，按算法Ⅱ从 $I_k$ 计算 $I_{k-1}$，应有

$$e_{k-1} = \frac{-1}{5}e_k$$

从而有

$$e_0 = \left(-\frac{1}{5}\right)^n e_n$$

因此，从 $I_{14}^*$ 出发计算到 $I_0^*$ 时，其误差 $e_0$ 已缩小到 $\frac{e_{14}}{5^{14}}$。

上述事实说明，对于同一数学问题，使用的算法不同，效果也大不相同。称计算过程中舍入误差不增长的算法具有数值稳定性，否则就是数值不稳定的，在上例中，算法Ⅱ具有数值稳定性，而算法Ⅰ则是数值不稳定的。显然，只有选用数值稳定性好的算法，才能求得较准确的结果。

## §1.4 数值计算中应注意的问题

由于误差的影响，计算过程中可能出现一些坏现象，应尽量注意以下几个方面。

1. 避免两个相近的数相减

由式(1-11)，两数之差 $u=x-y$ 的相对误差为

$$e_r(u) = e_r(x-y) = \frac{e(x)-e(y)}{x-y}$$

当 $x$ 与 $y$ 很接近时，$u$ 的相对误差很大，有效数字位数将严重丢失。例如求 $x=\sqrt{1+10^{-7}}-1$ 的近似值时，如果运算过程中取 8 位有效数字，则得 $x\approx 0.5\times 10^{-7}$，只有一位有效数字。为了避免这种情形出现，常常改变计算公式。当然也可以通过在计算过程中多保留几位有效数字来改善计算效果，但不如前者有效。如若把 $x=\sqrt{1+10^{-7}}-1$ 变换成以下公式计算

$$x = \frac{10^{-7}}{\sqrt{1+10^{-7}}+1}$$

计算过程仍保留8位有效数字,则得 $x\approx0.499\,999\,99\times10^{-7}$,结果仍有8位有效数字。又如

**例3** 利用四位数学用表求 $x=1-\cos 2°$ 的近似值。

[解] 由查表得 $\cos 2°\approx0.999\,4$,于是

$$x=1-\cos 2°\approx1-0.999\,4=0.000\,6=x^*$$

且

$$|x-x^*|=|\cos 2°-0.999\,4|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4}$$

故近似值 $x^*=0.000\,6$ 有一位有效数字。

若改用公式

$$1-\cos 2°=2\sin^2 1°$$

计算,查表得 $\sin 1°\approx0.017\,5$,于是

$$x=2\sin^2 1°\approx2\times(0.017\,5)^2=0.612\,5\times10^{-3}=x^*$$

此时

$$|e(x^*)|=|4\sin 1° e(\sin 1°)|\leqslant4\times0.017\,5\times\frac{1}{2}\times10^{-4}<\frac{1}{2}\times10^{-5}$$

故 $x^*=0.612\,5\times10^{-3}$ 至少有2位有效数字。

一般地,当 $x$ 接近于零时,应作变换

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

当 $x$ 充分大时,应作变换

$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$$

$$\frac{1}{x}-\frac{1}{x+1}=\frac{1}{x(x+1)}$$

等等。

2. 避免大数“吃”小数的现象

计算机在进行运算时,首先要把参加运算的数对阶,即把两数都写成绝对值小于1而阶码相同的数。如 $a=10^9+1$,必须改写成

$$a=0.1\times10^{10}+0.000\,000\,000\,1\times10^{10}$$

如果计算机只能表示8位小数,则算出 $a=0.1\times10^{10}$,大数“吃”了小数。这种情形有时是允许的,有时则不允许。

**例4** 求二次方程

$$x^2-(10^9+1)x+10^9=0$$

的根。

[解] 利用因式分解容易求出,此方程的两个根为 $x_1=10^9$, $x_2=1$,但若用求根公式,则得

$$x=\frac{10^9+1\pm\sqrt{(10^9+1)^2-4\times10^9}}{2}$$

若用8位小数的计算机运算,由于对阶,有

$$10^9+1\approx10^9$$

$$\sqrt{(10^9+1)^2-4\times10^9}\approx10^9$$

这样求得 $x_1=10^9$, $x_2=0$,结果显然是错的。为避免这种情形出现,也可采用改变计算公式的方法。如将式

$$x_2=\frac{10^9+1-\sqrt{(10^9+1)^2-4\times10^9}}{2}$$

改变成

$$x_2=\frac{2\times10^9}{10^9+1+\sqrt{(10^9+1)^2-4\times10^9}}$$

则有

$$x_2\approx\frac{2\times10^9}{10^9+10^9}=1$$

此结果是准确的。

3. 避免除数的绝对值远小于被除数的绝对值

由式(1-13)

$$e\left(\frac{x}{y}\right)=\frac{ye(x)-xe(y)}{y^2}$$

故当$|y|\ll|x|$时,舍入误差可能增大很多。

4. 要简化计算,减少运算次数,提高效率

求一个问题的数值解往往有多种算法,不同的算法需要不同的计算量,而计算量的大小会影响误差的积累。例如,若选用级数

$$\ln2=1-\frac{1}{2}+\frac{1}{3}-\frac{1}{4}+\cdots+\frac{(-1)^{n-1}}{n}+\cdots$$

的前 $n$ 项部分和来计算 ln2 的近似值,截断误差为$\frac{1}{n+1}$。如果要求误差小于 $10^{-5}$,则 $n\geqslant10^5$,即要取前十万项求和。这样做不仅计算量大,而且舍入误差的积累将使有效数字丢失严重。如果利用级数

$$\ln\frac{1+x}{1-x}=2x\left(1+\frac{1}{3}x^2+\frac{1}{5}x^4+\cdots+\frac{x^{2n}}{2n+1}+\cdots\right)$$

来计算,当 $x=\frac{1}{3}$时有

$$\ln2=\frac{2}{3}\left[1+\frac{1}{3\times9}+\frac{1}{5\times9^2}+\cdots+\frac{1}{(2n+1)\times9^n}+\cdots\right]$$

取前 5 项之和作为近似值,产生的截断误差为

$$\begin{aligned}e&=\frac{2}{3}\left(\frac{1}{11\times9^5}+\frac{1}{13\times9^6}+\frac{1}{15\times9^7}+\cdots\right)\\&<\frac{2}{3}\times\frac{1}{11\times9^5}\left(1+\frac{1}{9}+\frac{1}{9^2}+\cdots\right)\\&=\frac{2}{3\times11\times9^5}\times\frac{1}{1-\frac{1}{9}}\\&=\frac{1}{12\times11\times9^4}<\frac{1}{10^5}\end{aligned}$$

显然,第二种算法比第一种算法有效。

又如计算多项式

$$P_n(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0 \tag{1-20}$$

的值。若直接按式(1-20)计算,共需作$\frac{n(n+1)}{2}$次乘法与 $n$ 次加法。若按秦九韶算法

$$\begin{cases} u_n = a_n \\ u_k = xu_{k+1} + a_k \qquad (k = n-1, n-2, \cdots 1, 0) \\ P_n(x) = u_0 \end{cases} \tag{1-21}$$

计算，即将式(1-20)改写成如下形式

$$P_n(x) = a_0 + x\{a_1 + x[\cdots x(a_{n-2} + x(a_{n-1} + a_n x))\cdots]\} \tag{1-22}$$

则只需作 $n$ 次乘法和 $n$ 次加法。由以上例子可以看出选择合适的公式，简化计算十分重要。

5. 选用数值稳定性好的算法

# 习　题　一

1. 按四舍五入原则，求下列各数的具有四位有效数字的近似值：

168.957，3.000 45，73.225 0，0.001 526 32

2. 设下列各数均为经过四舍五入后得到的近似值，试求各数的绝对误差限和相对误差限。

$a = 3\,580, b = 0.004\,76, c = 2\,958 \times 10^{-2}, d = 0.143\,0 \times 10^8$

3. 已知 $a = 1.203\,1, b = 0.978$ 是经过四舍五入后得到的近似值，问 $a+b, a \times b$ 有几位有效数字？

4. 设 $x > 0$，$x$ 的相对误差为 $\delta$，求 $\ln x$ 的绝对误差。

5. 求 $\sqrt{2}$ 的近似值 $x^*$，使其相对误差不超过 0.1%。

6. 要使 $\sqrt{20}$ 的近似值有小于 0.1% 的相对误差，要取几位有效数字？

7. 正方形的边长约 100 cm，问测量边长时误差应多大，才能保证面积的误差不超过 1 $\text{cm}^2$？

8. 计算球的体积，为使其相对误差限为 1%，问测量半径 $R$ 时，相对误差最大为多少？

9. 设 $s = \frac{1}{2}gt^2$，假定 $g$ 是准确的，而对 $t$ 的测量有 $\pm 0.1$ s 的误差，试证当 $t$ 增大时，$s$ 的绝对误差增大而相对误差却减小。

10. 已知 $\sqrt{168} \approx 12.961$ 有 5 位有效数字，试求方程

$$x^2 - 26x + 1 = 0$$

的两个根及它们的误差限和相对误差限。

11. 已知 $\sqrt{783} \approx 27.983$ 有 5 位有效数字，试求方程

$$x^2 - 56x + 1 = 0$$

的两个根，使它们至少有 4 位有效数字。

12. 设 $I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n e^x dx$，求证：

(1) $I_n = 1 - nI_{n-1} \qquad (n = 0, 1, 2\cdots)$

(2) 利用(1)中的公式正向递推计算时误差逐步增大；反向递推计算时误差逐步减小。

# 数值实验

13. 利用循环语句，计算数列 $\sqrt{5}, \sqrt{\sqrt{5}}, \sqrt{\sqrt{\sqrt{5}}}, \cdots$ 的极限，要求误差小于 $10^{-8}$。