应用数值分析

Applied Numerical Analysis

王开荣　杨大地　编著

高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

应用数值分析

YINGYONG SHUZHI FENXI

Applied Numerical Analysis

高等教育出版社·北京
HIGHER EDUCATION PRESS BEIJING

内容简介

本书系统地介绍了数值计算的基本概念、常用算法及有关的理论分析和应用，概念叙述清晰，语言通俗易懂，力求内容完整和算法实用。

全书包括数值线性代数、数值逼近、微分方程数值求解和将 MATLAB 软件应用于基本数值计算问题等内容。每章在给出典型例题的同时还配备了一定数量的习题，并在书后给出习题的提示和解答。另外，对部分例题和习题还给出了 MATLAB 的计算演示。

本书可作为工科类硕士研究生和数学类专业本科少学时的数值分析课程的教科书，还可供工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

应用数值分析/王开荣，杨大地编著．—北京：高等教育出版社，2010.7

ISBN 978-7-04-029738-6

Ⅰ.①应… Ⅱ.①王… ②杨… Ⅲ.①数值计算-研究生-教材 Ⅳ.①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2010）第 082546 号

策划编辑 张长虹
责任绘图 黄建英
责任印制 张泽业

出版发行	高等教育出版社	**购书热线**	010-58581118
社　　址	北京市西城区德外大街 4 号	**咨询电话**	400-810-0598
邮政编码	100120	**网　　址**	http://www.hep.edu.cn http://www.hep.com.cn
		网上订购	http://www.landraco.com http://www.landraco.com.cn
经　　销	蓝色畅想图书发行有限公司		
印　　刷	北京市文林印务有限公司	**畅想教育**	http://www.widedu.com
开　　本	787×960　1/16	**版　　次**	2010 年 7 月第 1 版
印　　张	18.5	**印　　次**	2010 年 7 月第 1 次印刷
字　　数	340 000	**定　　价**	29.10 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题，请到所购图书销售部门联系调换。

物料号　29738-00

前　言

在高等学校的各类数学课程中,数值分析与科学计算课程有着十分重要的地位和作用。当前科学计算已经成为各门自然科学、工程技术科学和经济管理科学不可或缺的手段,而数值分析是科学计算的核心,也是理工科本科生和研究生应当具备的基本能力。因为许多工程应用问题的数学模型是无法求得解析解的,需要用数值计算方法在计算机上进行近似计算。因此,数值分析的教材就应更多地面向应用,培养算法意识和计算能力,研究数学问题的数值解法,特别是常用工具软件的使用。

本书是结合多年来的教学实践,通过多次试用、修改后整理而成的。与同类其他教材不同,本书增加了部分应用性较强的内容,力求做到内容完整和算法实用,以适应工科硕士研究生和数学类专业本科少学时数值分析课程的学习特点。

本书编写时特别注重课程体系的完整性、应用性和内容的可读性。为此,在系统介绍基础理论的同时,省略了一些繁琐艰深的证明过程,主要侧重于算法的叙述和算例分析。行文时注重通俗易懂,对专业术语尽量作通俗的解释,以增强本书的可读性。

学习本书所必需的数学基础是微积分、线性代数和常微分方程,这是一般理工科大学生都已具备的。为便于自学,各章后均附有习题,书后有习题参考答案和提示。为便于上机计算实习,本书第 11 章介绍了功能强大的工具软件 MATLAB,对书中涉及的大部分算法都编写了程序或提供了命令。为便于读者直接使用,对书中的部分例题和习题给出了 MATLAB 的计算演示,这是作者为提高本书应用性而进行的一种尝试,希望能得到师生们的认可。

本教材的出版得到了高等教育出版社的张长虹、董达英的指正和帮助,在此表示衷心的感谢。鉴于作者的水平,书中的问题和不足之处在所难免。诚盼得到同行和读者的批评指正,以期本书修订时得以改进和提高。

王开荣　杨大地
2009 年 12 月于重庆大学

目　　录

第1章 数值计算中的误差

用数学解决实际问题,首先需要建立数学模型.但很多数学模型是无法求得解析解的,需要用数值分析的方法并借助计算机做近似计算,于是会产生近似解与精确解之间的误差.分析误差的来源和对误差进行控制是数值分析的重要工作之一.

§1.1 误差的来源与分类

1.1.1 误差的来源与分类

$$\text{误差}\begin{cases}\text{固有误差}\begin{cases}\text{模型误差}\\\text{测量误差}\end{cases}\\\text{计算误差}\begin{cases}\text{截断误差}\\\text{舍入误差}\end{cases}\end{cases}$$

固有误差:求解工程问题的数学模型本身所具有的误差,是无法避免的.

模型误差(model error):在建立数学模型时,往往要忽视很多次要的因素,将模型"简单化"和"理想化",于是产生了误差.如重力公式 $G=mg$ 中的重力加速度 g 在用数值表示时就带有误差.

测量误差(observational error):数学模型中的参数多数是通过测量得到的,测量过程受工具、方法、观察者的主观因素、不可预料的随机干扰等影响必然带入误差.

计算误差(calculated error):用数值方法求得的近似解与精确解之间的误差,它可以通过选择好的数学模型,选择好的计算方法来加以控制.数值分析的任务就是选择较好的计算公式,编制较好的算法和程序,使求解工程应用问题的计算误差被控制在最小的范围内.

截断误差(truncation error):数学模型常难于直接求解,需要近似替代,简化为易于求解的问题,这种简化带入的误差称为方法误差或截断误差.

例 1.1 计算 $\sin x,\ x\in\left[0,\frac{\pi}{4}\right]$.

解 由 Taylor 公式有：

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \cdots \tag{1.1}$$

将该无穷级数按精度要求进行“截断”，如取 $n=3$ 有：

$$\sin 0.5 \approx 0.5 - \frac{0.5^3}{3!} + \frac{0.5^5}{5!} - \frac{0.5^7}{7!} = 0.479426$$

由 Taylor 公式的余项得误差为：

$$|E| = \left|(-1)^4 \frac{\xi^9}{9!}\right| \leqslant \frac{\left(\frac{\pi}{4}\right)^9}{362880} = 3.13 \times 10^{-7}, \quad \xi \in \left[0, \frac{\pi}{4}\right] \tag{1.2}$$

舍入误差(tounding error)：由于计算机一般只能进行有限位的小数运算，初始参数或中间结果都必须进行四舍五入才能运算，这必然产生舍入误差. 如

$$\frac{2}{3} \approx 0.66666667, \quad \pi \approx 3.14159265$$

在数值分析课程中主要讨论的是计算误差，在讲到各种算法时，通过数学方法可推导出截断误差限的公式(如(1.2)式)；舍入误差的产生常常带有很大的随机性，讨论起来比较困难，在问题本身呈病态或算法稳定性不好时，它可能成为计算误差的主要部分. 至于测量误差，常常将其视为初始数据的误差.

1.1.2 误差的基本概念

定义 1.1 设 x^* 是精确值(一般是不知道的)，x 是它的一个近似值，称

$$E = x - x^*$$

为近似值 x 的绝对误差(absolute error)，简称为误差.

由于 x^* 一般是不知道的，所以误差就无法准确计算，只能估计其绝对值的最小上限，称之为近似值 x 的绝对误差限，常记为 ε，即 $|x-x^*| \leqslant \varepsilon$，在工程应用中常记为 $x = x^* \pm \varepsilon$.

绝对误差不能完全刻画近似值的性态，如：A 商品原价 100 元，现价为 95 元；B 商品原价 10 元，现价为 5 元；购买哪种商品，顾客在心理上觉得更划算？

定义 1.2 称绝对误差与精确值的比值

$$\frac{E}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*}$$

为近似值 x 的相对误差(relative error)，记作 RE.

相对误差是无量纲单位，常用百分比表示，也只能估计出相对误差限 ε_r：

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|x^*|} \geqslant \frac{|x - x^*|}{|x^*|} = |RE|$$

由于精确值 x^* 不知道，常用 x 代替 x^* 作分母，此时的相对误差限为

$\varepsilon_r = \dfrac{\varepsilon}{|x|}$.

定义 1.3 若近似值 x 的误差限 ε 是它某一位数字的半个单位,就称 x 准确到该位. 且从该位数字起直到左端第一个非零数字为止的所有数字称为 x 的有效数字(significant digits).

通常所说的 n 位有效数字是指从左端第一位非零数字往右数至第 $n+1$ 位数字,并对第 $n+1$ 位数字进行四舍五入而得到的近似数.

例 1.2 按舍入原则,分别写出下列各数具有 5 位有效数字的近似数.

① 287.9325;② 0.03785551;③ 8.000033;④ 2.718281828459045;⑤ 2.765450.

解 ① 287.9325≈287.93.

② 0.03785551≈0.037856.

③ 8.000033≈8.0000.

④ 2.718281828459045≈2.7183.

⑤ 取近似值 2.7655 得绝对误差限:$\varepsilon = |2.7655 - 2.765450| = |0.00005| = 0.00005$;若取近似值 2.7654,其绝对误差限:$\varepsilon = |2.7654 - 2.765450| = |-0.00005| = 0.00005$.

补充规则:在一个冗长的计算中,为避免舍入误差累积过大,当需取舍的数字为 5 时,常使近似数的最后数字为偶数,故有近似值:2.765450≈2.7654.

相对误差与有效数字的关系十分密切. 定性地讲,相对误差越小,有效数字就越多,反之亦成立. 定量地讲,有如下两个定理.

定理 1.1 设近似值 $x = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m$ 有 n 位有效数字,则其相对误差限

$$\varepsilon_r \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1} \tag{1.3}$$

证明略.

定理 1.2 设近似值 $x = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m$ 的相对误差限

$$\varepsilon_r \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} \tag{1.4}$$

则它至少有 n 位有效数字.

证

$$|x| \leqslant (a_1+1) \times 10^{m-1}$$

$$|x - x^*| = \frac{|x - x^*|}{|x|} \times |x|$$

$$\leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} \times (a_1+1) \times 10^{m-1} = 0.5 \times 10^{m-n}$$

由定义 1.3 知 x 有 n 位有效数字.

对有效数字的观察比估计相对误差容易得多,如监测到有效数字在算法中

的某一步突然变少，就意味着相对误差在这一步突然扩大，这就是计算出问题的地方.

例 1.3 用 4 位浮点数计算 $\frac{1}{759}-\frac{1}{760}$，假设已知数为精确值.

解 原式 $=0.1318\times10^{-2}-0.1316\times10^{-2}=0.2\times10^{-5}$

计算结果只剩 1 位有效数字，有效数字大量损失造成相对误差的扩大. 若通分后再计算：

$$原式=\frac{1}{759\times760}=\frac{1}{0.5768\times10^{6}}=0.1734\times10^{-5}$$

就能得到 4 位有效数字的计算结果.

1.1.3 误差的分析方法

向前误差分析法(forward error analysis)：从初始数据出发，随着计算过程的进行，将每次计算产生的误差存储并累积起来，得到最后计算结果的误差. 但工程计算一般不用此方法.

向后误差分析法(backward error analysis)：将计算过程中计算误差的产生归结为初始数据的影响. 即假设初始数据存在某一误差(扰动)，并使这一误差的影响等效于计算过程中所产生的计算误差. 数值分析常用的是该误差分析方法，并由此选择较好的计算公式和算法.

§1.2 数值运算时误差的传播

当参与运算的数据带有误差时，计算结果也必然带有误差，需要关注的问题是计算结果的误差与原始误差相比是否会扩大.

1.2.1 一元函数计算的误差传播

设 x 是 x^* 的近似值，则计算结果误差 $E(f(x))=f(x)-f(x^*)$，由 Taylor 公式

$$f(x^*)=f(x)+f'(x)(x^*-x)+\frac{f''(\xi)}{2}(x^*-x)^2$$

$$E(f(x))=f'(x)(x-x^*)-\frac{f''(\xi)}{2}(x-x^*)^2$$

$$|E(f(x))|\leqslant\varepsilon(f(x))\leqslant|f'(x)|\varepsilon(x)+\left|\frac{f''(\xi)}{2}\right|\varepsilon^2(x)$$

忽略第二项高阶无穷小之后，可得函数 $f(x)$ 的误差限估计式

$$\varepsilon(f(x))\approx|f'(x)|\varepsilon(x) \tag{1.5}$$

1.2.2 多元函数计算的误差传播

若 $x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*$ 的近似值分别是 $x_1,x_2,\cdots,x_n$，则多元函数的精确值为：

$$A^* = f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$$

近似值为
$$A = f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$$

误差
$$E(A) = A - A^* = f(x_1,x_2,\cdots,x_n) - f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$$

$$|A - A^*| = |f(x_1,x_2,\cdots,x_n) - f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)|$$

$$\leqslant \sum_{k=1}^{n}\left|\frac{\partial f(x_1,x_2,\cdots,x_n)}{\partial x_k}\right| |x_k - x_k^*| + O((\Delta x)^2)$$

其中 $\Delta x = \max\limits_{1\leqslant k\leqslant n}|x_k - x_k^*|$，略去高阶项后有：

$$\varepsilon(A) \approx \sum_{k=1}^{n}\left|\frac{\partial f(x_1,x_2,\cdots,x_n)}{\partial x_k}\right|\varepsilon(x_k) \tag{1.6}$$

当函数是二元函数时，公式成为：

$$\varepsilon(f(x,y)) \approx \left|\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right|\varepsilon(x) + \left|\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right|\varepsilon(y) \tag{1.7}$$

1.2.3 四则运算中的误差传播

四则运算可以看做是二元函数运算，由(1.7)可得四则运算后的误差限公式

$$\varepsilon(x \pm y) = \varepsilon(x) + \varepsilon(y) \tag{1.8}$$

$$\varepsilon(x \cdot y) \approx |y|\varepsilon(x) + |x|\varepsilon(y) \tag{1.9}$$

$$\varepsilon\left(\frac{x}{y}\right) \approx \frac{|y|\varepsilon(x) + |x|\varepsilon(y)}{y^2} \quad (y \neq 0) \tag{1.10}$$

§1.3 数值计算时应注意的问题

为尽量减少数值计算中的误差，通常应采用以下的一些简单原则.

1.3.1 避免相近的数作减法运算

相近的数作减法运算将严重损失有效数字，从而导致很大的相对误差. 由公式(1.8)有 $\varepsilon(x-y) = \varepsilon(x) + \varepsilon(y)$，可推出

$$\varepsilon_r(x - y) = \frac{\varepsilon(x - y)}{|x - y|} = \frac{|x|}{|x - y|}\cdot\frac{\varepsilon(x)}{|x|} + \frac{|y|}{|x - y|}\cdot\frac{\varepsilon(y)}{|y|}$$

$$= \frac{|x|}{|x-y|} \cdot \varepsilon_r(x) + \frac{|y|}{|x-y|} \cdot \varepsilon_r(y)$$

当 x, y 相近时，$|x-y|$ 接近于零，$\frac{|x|}{|x-y|}$ 和 $\frac{|y|}{|x-y|}$ 将变得很大，所以 $\varepsilon_r(x-y)$ 将比 $\varepsilon_r(x)$ 或 $\varepsilon_r(y)$ 大很多，即相对误差将显著扩大.

例 1.4 取四位有效数字，计算 $x^* - y^*$ 近似值.

(1) $x^* = 18.496$，$y^* = 17.208$；　　(2) $x^* = 18.496$，$y^* = 18.493$

解 (1) 取四位有效数字得 x^*, y^* 的近似值分别为：$x = 18.50$；$y = 17.21$.

$$x - y = 18.50 - 17.21 = 1.29$$

而 $$x^* - y^* = 18.496 - 17.208 = 1.288$$

绝对误差限 $$\varepsilon = |1.29 - 1.288| = 0.002$$

相对误差限 $$\varepsilon_r = \frac{|1.29 - 1.288|}{|1.29|} = 0.16\%$$

(2) 取四位有效数字得 x^*, y^* 的近似值分别为 $x = 18.50$，$y = 18.49$，故

$$x - y = 18.50 - 18.49 = 0.01$$

而 $$x^* - y^* = 18.496 - 18.493 = 0.003$$

绝对误差限 $$\varepsilon = |0.01 - 0.003| = 0.007$$

相对误差限 $$\varepsilon_r = \frac{|0.01 - 0.003|}{|0.01|} = 70\%$$

避免方法：① 增加有效数字；② 化为等价形式，如

$$\frac{\sqrt{x+h} - \sqrt{x-h}}{2h} = \frac{1}{\sqrt{x+h} + \sqrt{x-h}}$$

1.3.2 避免分式中分母的绝对值远小于分子的绝对值

由公式(1.10)

$$\varepsilon\left(\frac{x}{y}\right) = \frac{|y|\varepsilon(x) + |x|\varepsilon(y)}{y^2} \approx \frac{|x|}{y^2}\varepsilon(y) + \frac{1}{|y|}\varepsilon(x)$$

若 $|y| \ll |x|$，则 $\frac{|x|}{y^2} \ll 1$，此时 $\varepsilon\left(\frac{x}{y}\right)$ 将比 $\varepsilon(y)$ 扩大很多. 也即当 $|y| \ll |x|$ 时计算 $\frac{x}{y}$，分子中的误差将使整个分式的绝对误差显著地扩大. 下一章中解线性方程组的主元法就是针对此种情况设计的.

1.3.3 防止大数“吃”小数

由于加减法必须进行对位，使大量数据的累加运算中可能出现大数“吃掉”小数现象.