工业和信息化部“十二五”规划教材

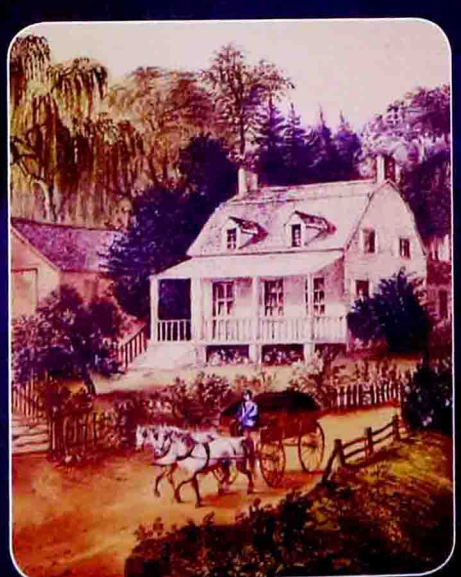
现代数值计算

（第2版）

Advanced Numerical Computing (2nd Edition)

同济大学计算数学教研室 编著

- 以必须够用为尺度，以实际应用为目的
- 以基本原理为基础，以基本技术为主线
- 以MATLAB为平台，加强学生的编程能力



名家系列

人民邮电出版社
POSTS & TELECOM PRESS

工业和信息化部“十二五”规划教材

现代数值计算

（第2版）

Advanced Numerical Computing (2nd Edition)

同济大学计算数学教研室 编著

名家系列

人民邮电出版社
北京

图书在版编目（CIP）数据

现代数值计算 / 同济大学计算数学教研室编著. -- 2版. -- 北京 : 人民邮电出版社, 2014.9
ISBN 978-7-115-35993-3

Ⅰ. ①现… Ⅱ. ①同… Ⅲ. ①数值计算－高等学校－教材 Ⅳ. ①O241

中国版本图书馆CIP数据核字(2014)第152988号

内 容 提 要

本书是同济大学计算数学教研室几位老师集体智慧的结晶，内容涉及数值计算的基本内容，如函数插值与函数逼近、线性与非线性方程（组）的求解、数值积分与微分、矩阵的特征值与特征向量的计算、常微分方程的近似数值解，还阐述了当今科学与工程研究中经常遇到的数值计算问题求解的新方法，如快速傅里叶变换、蒙特卡罗随机方法（高维积分计算）、数值求导的稳定算法、大型线性方程组的分块迭代算法等；在介绍一些重要的典型算法时，附上了在工程中广泛使用的 MATLAB 程序. 书后附有丰富的习题和数值实验题，并提供了配套的习题解答.

本书适合作为高等院校本科生和工科研究生“数值计算”课程的教材，也适合相关科研人员参考.

◆ 编　　著　同济大学计算数学教研室
责任编辑　武恩玉
责任印制　彭志环　杨林杰

◆ 人民邮电出版社出版发行　　北京市丰台区成寿寺路 11 号
邮编　100164　　电子邮件　315@ptpress.com.cn
网址　http://www.ptpress.com.cn
大厂聚鑫印刷有限责任公司印刷

◆ 开本：787×1092　1/16
印张：16.5　　2014 年 9 月第 2 版
字数：396 千字　　2014 年 9 月河北第 1 次印刷

定价：39.80 元

读者服务热线：(010)81055256　印装质量热线：(010)81055316
反盗版热线：(010)81055315
广告经营许可证：京崇工商广字第 0021 号

第 2 版前言

本次修订版, 作了如下的改动:

改正了第 1 版中的一些文字和公式错误, 将第 1 版中第 6 章向量范数的定义放到第 1 章的误差定义中, 使得可读性更强, 增加了第 3 章关于混合插值的误差估计和第 5 章中关于辛普森求积公式的证明, 增加了一些习题使得书的内容更加完整.

本次修订仍由同济大学计算数学教研室的有关教师集体完成. 其中第 1 章和第 7 章由陈雄达完成, 第 2 章和第 6 章由殷俊锋完成, 第 3 章和第 4 章由陈素琴完成, 第 5 章由徐承龙完成, 第 8 章由关晓飞完成, 第 9 章由王琤完成. 徐承龙阅读了全书, 提出了一些修改意见, 最后由陈雄达排版.

本书的修订工作得到了同济大学研究生院和数学系领导的大力支持, 同济大学计算数学教研室使用本书的全体教师提出了宝贵的意见, 以及人民邮电出版社武恩玉编辑对本次修订工作的热忱关心和支持, 我们深表感谢.

编　者

2014 年 1 月于同济大学

前　言

“数值分析” 课程是科学计算方面的重要基础课程之一, 承担着引导计算科学入门到介绍数值计算中各种基本算法的任务. 随着科学技术的快速发展, 对数值计算方面知识的要求也越来越高, 这就迫切需要一本适合于目前学生学习的教材. 本着这样的想法, 同济大学计算数学教研室的有关教师在原有教材的基础上编写了本书. 希望达到两个目的: 一是在课程中介绍数值计算领域中的基本思想、基本理论与基本算法, 如函数插值与函数逼近, 线性与非线性方程 (组) 的求解, 数值积分与微分, 矩阵的特征值与特征向量的计算, 微分方程的近似数值解; 二是适当地介绍一些当今科学与工程研究中遇到的数值计算问题求解的新方法, 如快速傅里叶变换, 高维积分的蒙特卡罗方法, 数值求导的稳定算法, 大型线性方程组的分块迭代算法等. 当然, 由于课时的限制, 我们只给出这些内容的一个初步介绍, 有兴趣者可以参阅有关的参考书. 本着实用的原则, 同时也由于课时限制的原因, 我们在介绍一些数学上比较深入的结论时, 往往省略了相关的理论证明. 在介绍一些重要的典型算法的同时, 附上了在工程中广泛使用的 MATLAB 程序. 以便于大家在修完此课程后能快速地上手做一些工程项目中的计算与编程问题.

全书共分 9 章, 由同济大学计算数学教研室有关任课教师集体编写. 其中第 1 章 “科学计算与 MATLAB” 和第 7 章 “非线性方程求根” 由陈雄达编写, 第 2 章 “线性方程组的直接解法” 和第 6 章 “线性方程组的迭代解法” 由殷俊锋编写, 第 3 章 “多项式插值与样条插值” 和第 4 章 “函数逼近” 由陈素琴编写, 第 5 章 “数值积分与数值微分” 由徐承龙编写, 第 8 章 “矩阵特征值与特征向量的计算” 和第 9 章 “常微分初边值问题数值解” 由王珍编写. 全书由徐承龙负责组织与协调, 陈雄达与殷俊锋负责本书的排版和校对. 本书适合作为高等院校本科生和工科研究生的教材与参考书, 需要读者掌握高等数学、线性代数和初步的概率方面的知识. 在编写过程中我们参考了同济大学数学教研室和国内外有关专家编写的相关教材, 在此表示感谢. 同济大学数学系和同济大学研究生院领导对本书的编写给予了大力支持, 为此我们表示深切的谢意.

由于编写时间和水平的限制, 本书不可避免出现错误, 我们殷切希望广大读者提出批评与修改建议.

编　者

2009 年 7 月于同济大学

目　录

表格目录

插图目录

程序目录

算法目录

第 1 章　科学计算与 MATLAB

§1.1　科学计算的意义

数值计算是随着计算机的出现和大规模计算的需求而发展起来的一门新兴学科. 数值计算主要考虑各种数学模型及其算法, 这些数学模型是为了解决各类应用领域, 特别是科学与工程计算领域的实际问题而提出的. 为此, 数值计算有时也称为科学计算、工程计算或科学工程计算. 随着科学技术的发展, 计算机的性能和算法的效率, 即计算机的硬件和软件水平都有了飞速的提高, 需要求解的实际问题规模也成倍扩大, 其中的数学模型日趋复杂. 通常, 这些数学模型是不能够精确地求解的, 这时需要简化模型并且提出相应的数值解法, 然后在计算机上编程实现, 求解这些问题并作实际检验. 随着硬件性能的提高和软件上各种高效算法的出现, 人类的计算能力迅猛提高, 并同时期待能解决一些超大规模的具有挑战性的问题, 如基因测序、全球天气模拟等. 对于同一个问题, 不同的算法在计算性能上可能相差百万倍甚至更多, 科学计算的主要任务就是设计高效可靠的数值算法. 例如：用一个每秒钟计算一亿次浮点运算的计算机求解一个 20 阶的线性代数方程组, 用克拉默 (Cramer) 法和行列式展开法计算至少需要 30 万年, 而用高斯消去法只不过用几秒钟而已. 这个事实说明了两个问题：一方面, 计算方法效率的提高速度往往比计算机性能的提高更快; 另一方面, 选择高效率的计算方法无疑是极其重要的.

求解科学与工程计算领域中的问题一般要经历以下几个过程. 首先根据实际问题构造相应的数学模型, 把它转换为可以计算的问题, 称为**数值问题**; 其次根据问题特点选择计算方法并编制程序; 最后在计算机上求解. 科学计算的主要研究内容是提出数值问题, 设计高效的算法, 并探讨全过程中各种误差对近似解的影响. 数值问题要求对有限个输入数据计算得出有限个输出数据, 这些输出数据通常称为数值解, 或者也可以理解为近似解. **数值算法**则是求解问题数值解的方法, 它是由有限个明确无歧义的操作组成的对输入数据的变换, 其中每一个操作都是计算机能够完成的, 例如, 仅包含加减乘除的运算. 一个算法只有在保证可靠的前提下才有可能评价其性能的好坏, 通俗地讲, 可靠性方面包含诸如算法的收敛性、稳定性、误差估计等多方面的内容. 评价一个算法的优劣应该考虑其时间复杂度 (即占用的计算机时间)、空间复杂度 (即占用的计算机存储空间) 以及逻辑复杂度 (即程序开发周期长短及维护的难易程度).

由于各种科学计算问题最后通常都归结为求解一些基本的问题, 所以数值算法领域的许多工作者为这些基本问题设计了一些相对固定的高效算法, 并把它们设计成简单且容易调用的功能函数并形成软件包. 但由于实际问题的复杂性及算法自身的适应性, 调用者必须自行选择适合自己问题的功能函数. 现代数值计算领域流行的软件有 Maple、Mathematica、MATLAB 等, 但不仅限于这些软件, 更多软件可以在网上查询(`http://www.netlib.org`), 其中, MATLAB 软件是在工程计算界广泛使用的深受计算工作者和工程师喜爱的软件之一. MATLAB 的官方网站是 `http://www.mathworks.com`.

鉴于实际问题的复杂性, 通常将一个实际问题具体分解为一系列的子问题进行研究. 数值工作者把这些子问题归纳总结为数学上不同的几类问题. 本课程主要涉及以下几方面的问题: 第 1 章余下部分为数值计算的基本知识及 MATLAB 软件简介, 其后各章内容包括函数的插值与逼近、数值积分与数值微分、线性方程组的直接解法和迭代解法、非线性方程组的求解、矩阵特征值问题的求解以及常微分方程的数值解.

§1.2 误差基础知识

人们常用相对误差、绝对误差或有效数字来说明一个近似值的准确程度. 这些概念在科学计算中被广泛应用, 下面我们对有关概念作一介绍.

§1.2.1 误差的来源

我们把通过任何途径得到的数据或模型与真实情况之间的差异称为**误差**. 误差的来源经常是多方面的. 在建立数学模型的过程中, 不可避免要忽略一些次要的因素, 因而数学模型往往只是对实际问题的一种近似的表达, 这两者之间的差异我们称为**模型误差**. 同时数学模型中可能包含一些参数, 它们可以通过仪器观测得到或通过经验得到, 这种数据间的误差我们称为**观测误差**. 数值分析通常假定数学模型真实地反映了客观实际, 直接处理已经归纳总结出来的数值问题, 因而这两类误差在数值分析中并不常见. 数学模型问题通常要转化为数值问题才能被求解, 经常使用的转化手段往往有离散化、有限展开等方式. 我们称这种数值问题与数学模型之间的误差为**截断误差**或**方法误差**, 通常引起方法误差的原因在于我们必须在有限的步骤内在计算机上得到结果. 在用计算机实现数值方法的过程中, 由于计算机表示的浮点数是固定的有限字长, 因此计算机并不能精确地表示所有的数, 这样, 不仅原始输入数据有误差, 中间计算的数据及最终输出结果也必然有误差. 这种因为计算机有限字长引起的误差称为**舍入误差**, 原始数据的误差导致最终结果也有误差的过程称为**误差传播**.

§1.2.2 误差度量

假设 x 是真值, $\bar{x}$ 是它的近似值, 则称 $\Delta x = x - \bar{x}$ 为该近似值的**绝对误差**, 或简称**误差**. 一般说来, 真值通常是求不出来的, 因此我们也不可能知道 Δx 的值, 而只能有如下估计:

$$|\Delta x| = |x - \bar{x}| \leqslant \varepsilon, \tag{1.1}$$

数 ε 称为**绝对误差限**或**误差限**. 于是有

$$\bar{x} - \varepsilon \leqslant x \leqslant \bar{x} + \varepsilon, \tag{1.2}$$

在工程上也记作 $x = \bar{x} \pm \varepsilon$. 误差限给出了真值的范围, 但并不能很好地表示近似值的精确程度. 例如测量珠峰高度为 8848m, 误差不超过 1m; 在测量运动员身高时就绝对不可以用这个误差限, 否则结果是没有任何意义的. 同样的误差限对于不同的数据, 其反映近似真实的程度可以完全相反, 因此必须同时考虑真值的大小.

若 x 是不为零的真值, $\bar{x}$ 是它的近似值, 则称 $\delta x = \Delta x/x = (x - \bar{x})/x$ 为该近似值的相对误差 (真值为零的情况没有定义). 若可求得某数 ε_r 满足

$$|\delta x| = \frac{|x - \bar{x}|}{|x|} \leqslant \varepsilon_r, \tag{1.3}$$

则称 ε_r 为**相对误差限**. 由于真值难以求出, 假如 $\bar{x}$ 也非零, 通常也使用 $\delta x = \Delta x/\bar{x}$.

§1.2.3 有效数字

当 x 有很多位数字, 为规定其近似数的表示法, 使得用它表示的近似数自身就指明了相对误差的大小, 我们引入有效数字的概念.

设十进制数有如下的标准形式:

$$x = \pm 10^m \times 0.x_1x_2\cdots x_nx_{n+1}\cdots, \tag{1.4}$$

其中 m 为整数, $\{x_i\} \subseteq \{0,1,2,\cdots,9\}$ 且 $x_1 \neq 0$. 对 x 四舍五入保留 n 位数字, 得到近似值 $\bar{x}$:

$$\bar{x} = \begin{cases} \pm 10^m \times 0.x_1x_2\cdots x_n, & x_{n+1} \leqslant 4, \\ \pm 10^m \times 0.x_1x_2\cdots(x_n+1), & x_{n+1} \geqslant 5. \end{cases} \tag{1.5}$$

容易证明, 四舍五入近似数的误差限满足

$$|x-\bar{x}| \leqslant 10^m \times \left(\frac{1}{2}\times 10^{-n}\right) = \frac{1}{2}\times 10^{m-n}. \tag{1.6}$$

设 x 的近似值 $\bar{x}$ 有如下标准形式

$$\bar{x} = \pm 10^m \times 0.x_1x_2\cdots x_n\cdots x_p, \tag{1.7}$$

其中 m 为整数, $\{x_i\} \subseteq \{0,1,2,\cdots,9\}$ 且 $x_1 \neq 0$, $p \geqslant n$. 如果有

$$|x-\bar{x}| \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{m-n}, \tag{1.8}$$

则称 $\bar{x}$ 为 x 的具有 n 位有效数字的近似数, 其中 x_1, x_2, $\cdots$, x_n 分别称为第 1 位到第 n 位**有效数字**. 当 $p=n$ 时, 称 $\bar{x}$ 为有效数, 即全由有效数字组成的数是有效数. 有效数的误差限是末位数单位的一半, 其本身就体现了误差界, 因此有效数末尾是不可以随便添加零的.

§1.2.4 向量的误差

某些问题的解可能是一个 n 维向量 $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$. 为了度量向量的误差, 我们引入向量的**范数**.

定义 1.2.1 *对任意 n 维向量 $\boldsymbol{x}$, 若对应非负实数 $\|\boldsymbol{x}\|$, 且满足*

(1) $\|x\| \geqslant 0$, *当且仅当* $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ *时等号成立*;

(2) *对任意实数* α, $\|\alpha\boldsymbol{x}\| = |\alpha| \cdot \|\boldsymbol{x}\|$;

(3) *对任意的 n 维向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$*, $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\|$,

*则称 $\|\boldsymbol{x}\|$ 为向量 $\boldsymbol{x}$ 的**范数**.*

设 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$, 定义

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{x}\|_1 &= |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n|, \\ \|\boldsymbol{x}\|_2 &= \sqrt{|x_1|^2 + |x_2|^2 + \cdots + |x_n|^2}, \\ \|\boldsymbol{x}\|_\infty &= \max_{1\leqslant i\leqslant n} |x_i|, \end{aligned}$$

为向量的**1 范数**、**2 范数**和**无穷范数**.

易证, 这三个范数都满足上述范数的三条性质.

譬如, 对于向量的 2 范数 $\|\boldsymbol{x}\|_2$, 前两条性质显然成立.

对于性质 3, 使用柯西不等式, 有

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|_2^2=\sum_{i=1}^{n}|x_i+y_i|^2 &\leqslant \sum_{i=1}^{n}|x_i|^2+2\sum_{i=1}^{n}|x_i|\cdot|y_i|+\sum_{i=1}^{n}|y_i|^2\\ &\leqslant \|\boldsymbol{x}\|_2^2+2\|\boldsymbol{x}\|_2\cdot\|\boldsymbol{y}\|_2+\|\boldsymbol{y}\|_2^2\\ &=(\|\boldsymbol{x}\|_2+\|\boldsymbol{y}\|_2)^2.\end{aligned}$$

即性质 3 成立, 所以 $\|\boldsymbol{x}\|_2$ 是一个向量范数.

若向量 $\boldsymbol{x}$ 有近似值 $\bar{\boldsymbol{x}}$, 则定义该近似向量误差为 $\|\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}}\|$, 这里范数可根据实际需要选取。

一般地, 向量的相对误差 $\|\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}}\|/\|\boldsymbol{x}\|$ 并不能直接解读出各分量的有效位。如令 $\boldsymbol{x}=(1.000,0.001)^{\mathrm{T}}$, $\bar{\boldsymbol{x}}=(0.999,0.002)^{\mathrm{T}}$, 则采用无穷范数时 $\|\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}}\|_\infty/\|\boldsymbol{x}\|_\infty=0.001$. 但是 $\boldsymbol{x}$ 第二个分量误差达到了 100%.

§1.2.5 计算机的浮点数系

计算机内部通常使用**浮点数**进行实数的运算. 计算机的浮点数是仅有有限字长的二进制数, 大部分实数存入计算机时需要做四舍五入, 由此引起的误差称为**舍入误差**. 一个浮点数的表示由正负号、小数形式的尾数以及为确定小数点位置的阶三部分组成. 例如单精度实数用 32 位的二进制表示, 其中符号占 1 位, 尾数占 23 位, 阶数占 8 位. 这样一个规范化的计算机单精度数 (零除外) 可以写成如下形式:

$$\pm 2^p\times(0.\alpha_1\alpha_2\alpha_3\cdots\alpha_{23})_2,\quad |p|\leqslant 2^7-1,\quad p\in Z,\alpha_i\in\{0,1\}. \tag{1.9}$$

上面记号中, Z 表示整数集. 二进制的非零数字只有 1, 所以 $\alpha_1=1$. 阶数的 8 位中须有 1 位表示阶数的符号, 所以阶数的值占 7 位. 凡是能够写成上述形式的数称为机器数. 设机器数 a 有上述形式, 则与之相邻的机器数为 $b=a+2^{p-23}$ 和 $c=a-2^{p-23}$. 这样, 区间 (c,a) 和 (a,b) 中的数无法准确表示, 计算机通常按规定用与之最近的机器数表示.

设实数 x 在机器中的浮点 (float) 表示为 $fl(x)$, 我们把 $x-fl(x)$ 称为**舍入误差**. 如当 $x\in\left[\frac{c+a}{2},\frac{a+b}{2}\right)=[a-2^{p-1-23},a+2^{p-1-23})$ 时, 用 a 表示 x, 记为 $fl(x)=a$. 其相对误差满足

$$|\varepsilon_r|=\left|\frac{x-fl(x)}{fl(x)}\right|\leqslant\frac{2^{p-1-23}}{2^{p-1}}=2^{-23}\approx 10^{-6.9}. \tag{1.10}$$

上式表明单精度实数有 6~7 位有效数字.

二进制阶数最高为 2^7-1, 相应于十进制的阶数 38, 即 $(2^7-1)\lg 2$. 因此单精度实数 (零除外) 的数量级不大于 10^{38} 且不小于 10^{-38}. 当输入数据、输出数据或中间数据太大而无法表示时, 计算过程将会非正常停止, 此现象称为**上溢**(overflow); 当数据太小而只能用零表示时, 计算机将此数置零, 精度损失, 此现象称为**下溢**(underflow). 下溢并不总是有害的, 在做浮点运算时, 我们需要考虑数据运算可能产生的上溢及有害的下溢.

§1.2.6 一个实例

下面我们通过一个简单的例子来说明, 一个实际问题从提出到解决过程中出现的各种误差.

例 1.2.1 有一艘驳船, 宽度为 5m, 欲驶过一个河渠. 该河渠有一个直角弯道, 形状和尺寸如图 1-1 所示. 试问, 要驶过这个河渠, 驳船的长度不能超过多少米?

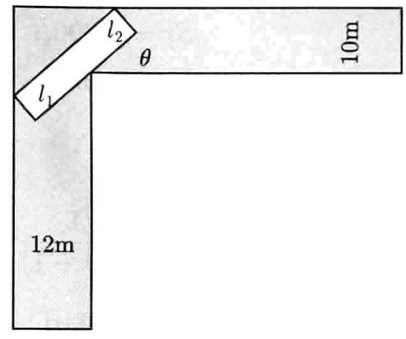


图 1-1 河渠的图形

解: 易知, 驳船的长度有如下关系

$$l = l_1 + l_2 = \frac{10 - 5\cos\theta}{\sin\theta} + \frac{12 - 5\sin\theta}{\cos\theta} = f(\theta), \quad (1.11)$$

式中, l_1, l_2 分别为直角拐角处到船两头的距离. 驳船如若能通过河渠, 则其最大长度应是上式右端函数的最小值. 因此, 该问题就转化为求解极小化问题

$$\min f(\theta) = \frac{10 - 5\cos\theta}{\sin\theta} + \frac{12 - 5\sin\theta}{\cos\theta}, \quad (1.12)$$

或者, 求解非线性函数零点的问题

$$f'(\theta) = \frac{5 - 10\cos\theta}{\sin^2\theta} + \frac{12\sin\theta - 5}{\cos^2\theta} = 0. \quad (1.13)$$

可以证明, 对于任意 $\theta \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right)$, $f''(\theta) > 0$. 因此 (1.12) 式的极小点即是 (1.13) 式的零点, 这两者完全等价. 通过本教材将要介绍的近似计算方法, 我们可以知道上述两个问题的解为

$$\theta^* = 0.73, \quad f(\theta^*) = 21. \quad (1.14)$$

因此, 驳船的长度不能超过 21m.

从实际的角度出发, 我们知道, 一艘驳船能不能通过河渠应该是一个复杂的问题: 驳船不完全是长方形的, 而且可能和水深也有关系. 我们把它简化为长方形的, 并且只在二维平面内考虑该问题, 这就造成了模型误差. 我们无法精确求解极小化问题 (1.12) 式或求零点问题 (1.13) 式, 用近似求解的方法代替精确求解的方法, 造成了方法误差. 测量的数据, 如 5m、10m、12m 等, 都带有误差, 称为观测误差. 因此, 结论中的数据也只给出了两位有效数字, 是一个近似的答案. 由于初始数据的误差导致最终答数的误差, 这个过程就是误差的传播过程.

§1.2.7 数值计算中应注意的几个问题

舍入误差在实际计算中几乎是不可避免的, 定量地分析舍入误差的积累过程往往都是非常繁杂的. 一个可行的方法是研究舍入误差是否能够得到有效的控制, 不会影响到计算结果的实际效用. 一个算法, 如果在一定的条件下, 其舍入误差在整个运算过程中能够得到有效控制或者舍入误差的增长不影响产生可靠的结果, 则称该算法是**数值稳定**的, 否则称为数值不稳定的.

例 1.2.2 计算 $S_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x$, 其中 $n = 0, 1, 2, \cdots, 8$.

解: 由于

$$S_n + 5S_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x+5}\mathrm{d}x = \frac{1}{n}, \quad (1.15)$$

取 $S_0 = \ln 6 - \ln 5 = 0.182$, 利用公式 $S_n = \frac{1}{n} - 5S_{n-1}$, 可以逐步得到如下的数值, 计算过程

中所有的数精确到小数点后 3 位：

$$\begin{aligned} &S_1 = 0.090, \quad S_2 = 0.050, \quad S_3 = 0.083, \quad S_4 = -0.165, \\ &S_5 = 1.025, \quad S_6 = -4.958, \quad S_7 = 24.933, \quad S_8 = -124.540. \end{aligned} \tag{1.16}$$

通过简单的积分估计, 有

$$\frac{1}{6(n+1)} = \int_0^1 \frac{x^n}{6}\mathrm{d}x \leqslant S_n \leqslant \int_0^1 \frac{x^n}{5}\mathrm{d}x = \frac{1}{5(n+1)}. \tag{1.17}$$

所以上述的 8 个计算结果中, 那些负数或者大于 1 的结果都是不可接受的. 当然, 其他结果也可能有比较大的误差.

下面我们分析造成这种现象的原因. 假设 S_n 的真值为 S_n^*, 误差为 ε_n, 即 $\varepsilon_n = S_n^* - S_n$. 对于真值, 我们也有关系式 $S_n^* + 5S_{n-1}^* = \frac{1}{n}$. 综合两个递推等式, 有

$$\varepsilon_n = -5\varepsilon_{n-1}. \tag{1.18}$$

这就意味着哪怕开始只有一点点误差, 就算整个过程都保留很长的小数位, 只要 n 足够大. 按照这种每计算一步误差增长 5 倍的方式, 所得的结果总是不可信的. 因此整个算法是数值不稳定的.

换一种方式, 若我们把计算方式改为

$$S_{n-1} = \frac{1}{5n} - \frac{1}{5}S_n, \quad n = 8, 7, \cdots, 1. \tag{1.19}$$

则误差就会以每计算一步缩小到 1/5 的方式进行. 用这样的方式计算, 可以先用上面的估计式计算出 S_8：

$$S_8 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{6\times 9} + \frac{1}{5\times 9}\right) \approx 0.020. \tag{1.20}$$

逐步计算有

$$\begin{aligned} &S_7 = 0.021, \quad S_6 = 0.024, \quad S_5 = 0.028, \quad S_4 = 0.034, \\ &S_3 = 0.043, \quad S_2 = 0.058, \quad S_1 = 0.088, \quad S_0 = 0.182. \end{aligned} \tag{1.21}$$

这样的计算结果和实际是很相近的. 对 S_8 不同的估计方式, 最后得到的结果也相似：只需对递推计算公式进行同样的误差分析就可以得到这个结论.

误差的传播在一些实际的问题中经常是很复杂的, 不像上面的例子那样可以得到一个误差传播的具体的公式. 事实上, 这个误差传播的具体公式需要假定 $1/n$ 的计算是完全精确的.

通过对误差传播规律的简单分析, 下面我们指出在数值计算中应该注意的基本问题.

§1.2.7.1 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. 例如计算

$$y = \sqrt{x+1} - \sqrt{x}, \tag{1.22}$$

其中 x 是比较大的数, 例如 $x = 1000$. 取 4 位有效数字计算, 有

$$y = \sqrt{1001} - \sqrt{1000} = 31.64 - 31.62 = 0.02. \tag{1.23}$$