十三五

普通高等教育“十三五”规划教材
普通高等院校数学精品教材

获教育部高等学校优秀教材二等奖
获全国优秀畅销书奖

数值分析 第5版

李庆扬　王能超　易大义　编

· 强调基本原理、基本理论，夯实基本素质
· 注重基本方法和技巧，提高应用能力
· 阐述严谨，脉络分明，深入浅出
· 反复锤炼，不断更新，长销30余年

华中科技大学出版社
http://www.hustp.com

普通高等教育“十三五”规划教材
普通高等院校数学精品教材

数值分析(第5版)

——数值算法分析与高效算法设计

李庆扬　王能超　易大义　编

华中科技大学出版社
中国·武汉

内 容 提 要

本书是为理工科院校各专业普遍开设的"数值分析"课程而编写的教材.其上篇内容包括插值与逼近、数值积分与数值微分、常微分方程与线性方程组的数值解法、矩阵的特征值与特征向量计算等.每章附有习题并在书末给出部分答案.

本书下篇(高效算法设计)以讲座形式介绍快速算法、并行算法与加速算法方面的几个典型案例,力图普及推广超级计算方面的基础知识.全书阐述严谨,脉络分明,深入浅出,便于教学.

本书可作为理工科院校应用数学、力学、物理、计算机等专业的教材,也可供从事科学计算的科技工作者参考.

图书在版编目(CIP)数据

数值分析/李庆扬,王能超,易大义编.—5版.—武汉:华中科技大学出版社,2018.4
ISBN 978-7-5680-3946-8

Ⅰ.①数…　Ⅱ.①李…　②王…　③易…　Ⅲ.①数值分析-高等学校-教材　Ⅳ.①O241

中国版本图书馆CIP数据核字(2018)第060527号

数值分析(第5版)
Shuzhi Fenxi

李庆扬　王能超　易大义　编

策划编辑:王汉江
责任编辑:王汉江
封面设计:原色设计
责任校对:张会军
责任监印:周治超
出版发行:华中科技大学出版社(中国·武汉)　电话:(027)81321913
武汉市东湖新技术开发区华工科技园　邮编:430223
录　排:武汉市洪山区佳年华文印部
印　刷:武汉华工鑫宏印务有限公司
开　本:710mm×1000mm　1/16
印　张:20
字　数:415千字
版　次:2018年4月第5版第1次印刷
定　价:39.80元

华中出版

本书若有印装质量问题,请向出版社营销中心调换
全国免费服务热线:400-6679-118　竭诚为您服务
版权所有　侵权必究

第5版前言

本书于1981年由华中科技大学出版社出版，至今已有37年.本书1988年获国家教委优秀教材二等奖，在国内为许多高校所选用.

今天，数值计算已进入超级计算的新时代，科技革命迅猛发展的新形势迫切要求普及推广高性能计算方面的新知识，鉴于这一认识本书推出第5版.

作为高效算法设计的关键技术，二分演化技术具有深邃的文化内涵，其设计思想新奇而玄妙，这方面内容可能尚未为人们所熟悉，笔者深信它处于算法设计学的前沿，因此选取快速算法设计、并行算法设计和加速算法设计方面的几个典型案例，汇集成讲座资料作为本书第10～13章，奉献给立志于从事高性能计算的读者参考.

本书中的第10～13章(讲座资料)由王能超撰写，错误与不当之处请读者不吝指正.

本书的再版，得到华中科技大学出版社的鼎力支持，在此表示衷心的感谢！

作者

2018年1月

第 2 版前言

1980 年 7 月在大连召开的工科院校“应用数学专业教学学术会议”，根据教育部直属工科院校“应用数学专业教学计划”制定了“数值分析”课大纲，并决定由清华大学、华中工学院、浙江大学合编试用教材. 本书就是根据这次会议的决定编写的. 全书共分 9 章，第 1～3 章由李庆扬编写，第 4～6 章由王能超编写，第 7～9 章由易大义编写. 教材初稿于 1980 年 12 月投交华中工学院出版社.

1981 年元月在杭州召开的工科院校计算数学第一次教材审稿会，对本书初稿进行了审查，1982 年元月在上海交通大学召开的第二次计算数学教材审稿会，又对本书第 1 版提出了修改意见. 会议考虑到理工科院校各专业普遍开设“数值分析”课的情况，重新修订了大纲(72 学时). 本书第 2 版就是根据新大纲的要求修改的，它保持了第 1 版的主要内容及特点，但选材更注意基本要求，减少了部分内容，增加了部分习题答案. 本书可作为理工科院校应用数学、力学、物理、计算机软件等专业大学生及其他专业研究生“数值分析”(或“计算方法”)课的教材，也可供学习“计算方法”的科技工作者参考.

我们对参加两次审稿会的同志表示衷心感谢，他们以认真负责的态度对本书提出了许多宝贵意见，对提高教材质量起了很大作用.

编　者

1982 年 7 月

试读结束：需要全本请在线购买： www.ertongbook.com

目　录

上篇　数值算法分析

第1章　绪论 …… (1)
1.1　数值分析研究的对象与特点 …… (1)
1.2　误差来源与误差分析的重要性 …… (2)
1.3　误差的基本概念 …… (4)
1.3.1　误差与误差限 …… (4)
1.3.2　相对误差与相对误差限 …… (5)
1.3.3　有效数字 …… (6)
1.3.4　数值运算的误差估计 …… (7)
1.4　数值运算中误差分析的方法与原则 …… (9)
1.4.1　要避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法 …… (9)
1.4.2　要避免两相近数相减 …… (10)
1.4.3　要防止大数"吃掉"小数 …… (11)
1.4.4　注意简化计算步骤,减少运算次数 …… (11)
小结 …… (12)
习题 …… (12)
第2章　插值法 …… (14)
2.1　引言 …… (14)
2.2　Lagrange 插值 …… (15)
2.2.1　插值多项式的存在唯一性 …… (15)
2.2.2　线性插值与抛物插值 …… (16)
2.2.3　Lagrange 插值多项式 …… (18)
2.2.4　插值余项 …… (19)
2.3　逐次线性插值法 …… (21)
2.4　差商与 Newton 插值公式 …… (23)
2.4.1　差商及其性质 …… (23)
2.4.2　Newton 插值公式 …… (24)
2.5　差分与等距节点插值公式 …… (26)
2.5.1　差分及其性质 …… (26)
2.5.2　等距节点插值公式 …… (28)
2.6　Hermite 插值 …… (29)

2.7 分段低次插值……(32)
2.7.1 多项式插值的问题 ……(32)
2.7.2 分段线性插值 ……(33)
2.7.3 分段三次 Hermite 插值 ……(34)
2.8 三次样条插值……(36)
2.8.1 三次样条函数 ……(36)
2.8.2 三转角方程 ……(37)
2.8.3 三弯矩方程 ……(39)
2.8.4 计算步骤与例题 ……(40)
2.8.5 三次样条插值的收敛性 ……(41)
小结 ……(42)
习题 ……(43)
第 3 章 函数逼近与计算 ……(45)
3.1 引言与预备知识……(45)
3.1.1 问题的提出 ……(45)
3.1.2 Weierstrass 定理 ……(46)
3.1.3 连续函数空间 C[a,b] ……(47)
3.2 最佳一致逼近多项式……(47)
3.2.1 最佳一致逼近多项式的存在性 ……(47)
3.2.2 Chebyshev 定理 ……(48)
3.2.3 最佳一次逼近多项式 ……(50)
3.3 最佳平方逼近……(52)
3.3.1 内积空间 ……(52)
3.3.2 函数的最佳平方逼近 ……(54)
3.4 正交多项式……(57)
3.4.1 正交化手续 ……(57)
3.4.2 Legendre 多项式 ……(57)
3.4.3 Chebyshev 多项式 ……(60)
3.4.4 其他常用的正交多项式 ……(62)
3.5 函数按正交多项式展开……(63)
3.6 曲线拟合的最小二乘法……(65)
3.6.1 一般的最小二乘逼近 ……(65)
3.6.2 用正交函数作最小二乘拟合 ……(69)
3.6.3 多元最小二乘拟合 ……(71)
3.7 Fourier 逼近与快速 Fourier 变换 ……(71)
3.7.1 最佳平方三角逼近与三角插值 ……(71)

3.7.2 快速 Fourier 变换 …… (74)
小结 …… (77)
习题 …… (77)
第 4 章 数值积分与数值微分 …… (80)
4.1 引言 …… (80)
4.1.1 数值求积的基本思想 …… (80)
4.1.2 代数精度的概念 …… (81)
4.1.3 插值型的求积公式 …… (82)
4.2 Newton-Cotes 公式 …… (82)
4.2.1 Cotes 系数 …… (82)
4.2.2 偶阶求积公式的代数精度 …… (84)
4.2.3 几种低阶求积公式的余项 …… (85)
4.2.4 复化求积法及其收敛性 …… (86)
4.3 Romberg 算法 …… (88)
4.3.1 梯形法的递推化 …… (88)
4.3.2 Romberg 公式 …… (89)
4.3.3 Richardson 外推加速法 …… (91)
4.3.4 梯形法的余项展开式 …… (92)
4.4 Gauss 公式 …… (93)
4.4.1 Gauss 点 …… (94)
4.4.2 Gauss-Legendre 公式 …… (95)
4.4.3 Gauss 公式的余项 …… (96)
4.4.4 Gauss 公式的稳定性 …… (96)
4.4.5 带权的 Gauss 公式 …… (97)
4.5 数值微分 …… (99)
4.5.1 中点方法 …… (99)
4.5.2 插值型的求导公式 …… (100)
4.5.3 实用的五点公式 …… (102)
4.5.4 样条求导 …… (103)
小结 …… (104)
习题 …… (104)
第 5 章 常微分方程数值解法 …… (106)
5.1 引言 …… (106)
5.2 Euler 方法 …… (106)
5.2.1 Euler 格式 …… (106)
5.2.2 后退的 Euler 格式 …… (108)

5.2.3 梯形格式………………………………………………………………(109)
5.2.4 改进的 Euler 格式……………………………………………………(110)
5.2.5 Euler 两步格式 ………………………………………………………(111)
5.3 Runge-Kutta 方法 ……………………………………………………(113)
5.3.1 Taylor 级数法 …………………………………………………………(113)
5.3.2 Runge-Kutta 方法的基本思想…………………………………………(114)
5.3.3 二阶 Runge-Kutta 方法 ………………………………………………(115)
5.3.4 三阶 Runge-Kutta 方法 ………………………………………………(116)
5.3.5 四阶 Runge-Kutta 方法 ………………………………………………(118)
5.3.6 变步长的 Runge-Kutta 方法 …………………………………………(119)
5.4 单步法的收敛性和稳定性 ………………………………………………(120)
5.4.1 单步法的收敛性………………………………………………………(120)
5.4.2 单步法的稳定性………………………………………………………(122)
5.5 线性多步法 ……………………………………………………………(124)
5.5.1 基于数值积分的构造方法……………………………………………(124)
5.5.2 Adams 显式格式 ………………………………………………………(125)
5.5.3 Adams 隐式格式 ………………………………………………………(126)
5.5.4 Adams 预测-校正系统 …………………………………………………(127)
5.5.5 基于 Taylor 展开的构造方法 …………………………………………(128)
5.5.6 Milne 格式 ……………………………………………………………(130)
5.5.7 Hamming 格式 …………………………………………………………(131)
5.6 方程组与高阶方程的情形 ………………………………………………(132)
5.6.1 一阶方程组……………………………………………………………(132)
5.6.2 化高阶方程组为一阶方程组…………………………………………(133)
5.7 边值问题的数值解法 ……………………………………………………(134)
5.7.1 试射法…………………………………………………………………(135)
5.7.2 差分方程的建立………………………………………………………(135)
5.7.3 差分问题的可解性……………………………………………………(137)
5.7.4 差分方法的收敛性……………………………………………………(138)
小结…………………………………………………………………………(140)
习题…………………………………………………………………………(140)
第 6 章 方程求根……………………………………………………………(142)
6.1 根的搜索 …………………………………………………………………(142)
6.1.1 逐步搜索法……………………………………………………………(142)
6.1.2 二分法…………………………………………………………………(142)
6.2 迭代法 ……………………………………………………………………(144)

6.2.1 迭代过程的收敛性……(144)
6.2.2 迭代公式的加工……(147)
6.3 Newton 法……(149)
6.3.1 Newton 公式……(149)
6.3.2 Newton 法的几何解释……(150)
6.3.3 Newton 法的局部收敛性……(151)
6.3.4 Newton 法应用举例……(152)
6.3.5 Newton 下山法……(153)
6.4 弦截法与抛物线法……(154)
6.4.1 弦截法……(155)
6.4.2 抛物线法……(156)
6.5 代数方程求根……(158)
6.5.1 多项式求值的秦九韶算法……(158)
6.5.2 代数方程的 Newton 法……(159)
6.5.3 劈因子法……(160)
小结……(162)
习题……(162)
第 7 章 解线性方程组的直接方法……(164)
7.1 引言……(164)
7.2 Gauss 消去法……(164)
7.2.1 消元手续……(165)
7.2.2 矩阵的三角分解……(168)
7.2.3 计算量……(170)
7.3 Gauss 主元素消去法……(171)
7.3.1 完全主元素消去法……(172)
7.3.2 列主元素消去法……(173)
7.3.3 Gauss-Jordan 消去法……(175)
7.4 Gauss 消去法的变形……(178)
7.4.1 直接三角分解法……(178)
7.4.2 平方根法……(181)
7.4.3 追赶法……(184)
7.5 向量和矩阵的范数……(186)
7.6 误差分析……(192)
7.6.1 矩阵的条件数……(192)
7.6.2 舍入误差……(197)
小结……(198)

习题…………………………………………………………………………………………（198）
第 8 章　解线性方程组的迭代法…………………………………………………（202）
8.1　引言 ……………………………………………………………………………（202）
8.2　Jacobi 迭代法与 Gauss-Seidel 迭代法 ……………………………………（204）
8.2.1　Jacobi 迭代法……………………………………………………………（204）
8.2.2　Gauss-Seidel 迭代法……………………………………………………（205）
8.3　迭代法的收敛性 …………………………………………………………（206）
8.4　解线性方程组的超松弛迭代法 …………………………………………（213）
小结…………………………………………………………………………………（217）
习题…………………………………………………………………………………（217）
第 9 章　矩阵的特征值与特征向量计算………………………………………（220）
9.1　引言 ……………………………………………………………………………（220）
9.2　幂法及反幂法 ………………………………………………………………（222）
9.2.1　幂法…………………………………………………………………………（222）
9.2.2　加速方法……………………………………………………………………（225）
9.2.3　反幂法………………………………………………………………………（227）
9.3　Householder 方法 …………………………………………………………（230）
9.3.1　引言…………………………………………………………………………（230）
9.3.2　用正交相似变换约化矩阵………………………………………………（232）
9.4　QR 算法 ……………………………………………………………………（237）
9.4.1　引言…………………………………………………………………………（237）
9.4.2　QR 算法……………………………………………………………………（239）
9.4.3　带原点位移的 QR 方法…………………………………………………（242）
小结…………………………………………………………………………………（246）
习题…………………………………………………………………………………（246）

下篇　高效算法设计

* **第 10 章　快速算法设计:快速 Walsh 变换**…………………………………（248）
10.1　美的 Walsh 函数 …………………………………………………………（248）
10.1.1　微积分的逼近法…………………………………………………………（248）
10.1.2　Walsh 函数的复杂性……………………………………………………（249）
10.1.3　Walsh 分析的数学美……………………………………………………（250）
10.2　Walsh 函数代数化 ………………………………………………………（251）
10.2.1　时基上的二分集…………………………………………………………（251）
10.2.2　Walsh 函数的矩阵表示…………………………………………………（252）

试读结束：需要全本请在线购买： www.ertongbook.com

10.3 Walsh 阵的二分演化 …………………………………… (252)
10.3.1 矩阵的对称性复制 …………………………………… (253)
10.3.2 Walsh 阵的演化生成 ………………………………… (253)
10.3.3 Walsh 阵的演化机制 ………………………………… (254)
10.3.4 Hadamard 阵的演化生成 …………………………… (255)
10.4 快速变换 FWT ……………………………………………… (257)
10.4.1 FWT 的设计思想 …………………………………… (257)
10.4.2 FWT 的演化机制 …………………………………… (258)
10.4.3 FWT 的计算流程 …………………………………… (259)
10.4.4 FWT 的算法实现 …………………………………… (261)
小结 ……………………………………………………………… (262)
*第 11 章 并行算法设计:递推计算并行化 …………………… (263)
11.1 什么是并行计算 ……………………………………………… (263)
11.1.1 一则寓言故事 ……………………………………… (263)
11.1.2 同步并行算法的设计策略 ………………………… (264)
11.2 叠加计算 ……………………………………………………… (265)
11.2.1 倍增技术 …………………………………………… (265)
11.2.2 二分手续 …………………………………………… (267)
11.2.3 数列求和的二分法 ………………………………… (268)
11.2.4 多项式求值的二分法 ……………………………… (269)
11.2.5 二分算法的效能分析 ……………………………… (270)
11.2.6 二分算法的基本特征 ……………………………… (271)
11.3 一阶线性递推 ………………………………………………… (272)
11.3.1 相关链的二分手续 ………………………………… (272)
11.3.2 算式的建立 ………………………………………… (273)
11.3.3 二分算法的效能分析 ……………………………… (275)
11.4 三对角方程组 ………………………………………………… (275)
11.4.1 相关链的二分手续 ………………………………… (276)
11.4.2 算式的建立 ………………………………………… (277)
小结 ……………………………………………………………… (279)
*第 12 章 加速算法设计:重差加速技术 ……………………… (281)
12.1 千古疑案 ……………………………………………………… (281)
12.1.1 阿基米德的“穷竭法” ……………………………… (281)
12.1.2 祖冲之“缀术”之谜 ………………………………… (281)
12.2 神来之笔 ……………………………………………………… (282)

12.2.1 数学史上一篇千古奇文 ……………………………………… (282)
12.2.2 “一飞冲天”的“刘徽神算” ……………………………………… (283)
12.3 奇光异彩……………………………………………………………… (284)
12.3.1 刘徽的新视野 ……………………………………………………… (285)
12.3.2 偏差比中传出好“消息” ………………………………………… (286)
12.3.3 只要做一次“俯冲” ……………………………………………… (286)
12.3.4 差之毫厘，失之千里……………………………………………… (287)
12.3.5 “缀术”再剖析 ……………………………………………………… (288)
12.3.6 平庸的新纪录 ……………………………………………………… (289)
12.4 万能引擎……………………………………………………………… (291)
12.4.1 逼近加速的重差公设 ……………………………………………… (292)
12.4.2 重差加速法则 ……………………………………………………… (292)
12.4.3 重差加速的逻辑推理 ……………………………………………… (293)
第 13 章 总览 ……………………………………………………………… (294)
13.1 算法重在设计………………………………………………………… (294)
13.1.1 算法设计关系到科学计算的成败 ………………………………… (294)
13.1.2 算法设计追求简单与统一 ………………………………………… (295)
13.2 直接法的缩减技术…………………………………………………… (295)
13.2.1 数列求和的累加算法 ……………………………………………… (295)
13.2.2 缩减技术的设计机理 ……………………………………………… (296)
13.2.3 多项式求值的秦九韶算法 ………………………………………… (297)
13.3 迭代法的校正技术…………………………………………………… (298)
13.3.1 开方算法 …………………………………………………………… (298)
13.3.2 校正技术的设计机理 ……………………………………………… (299)
13.4 迭代优化的超松弛技术……………………………………………… (300)
13.4.1 超松弛技术的设计机理 …………………………………………… (300)
13.4.2 刘徽的“割圆术” ………………………………………………… (300)
13.5 递推加速的二分技术………………………………………………… (301)
13.5.1 “结绳记数”的快速算法 ………………………………………… (301)
13.5.2 二分技术的设计机理 ……………………………………………… (302)
小结…………………………………………………………………………… (303)
部分习题答案……………………………………………………………… (305)
参考文献…………………………………………………………………… (308)

上篇　数值算法分析

第1章　绪　　论

1.1　数值分析研究的对象与特点

数值分析是研究各种数学问题求解的数值计算方法.在电子计算机成为数值计算的主要工具以后,人们迫切要求研究适合于计算机使用的数值计算方法.为了更具体地说明数值分析的研究对象,我们来考察用计算机解决科学计算问题时所经历的过程(见图 1.1).

实际问题 → 数学模型 → 数值计算方法 → 程序设计 → 上机计算求得结果

图 1.1

由实际问题的提出到上机计算求得结果,整个过程都可看作应用数学的研究对象.如果细分的话,针对实际问题应用有关科学知识和数学理论建立数学模型这一过程,通常作为应用数学的研究对象,而根据数学模型提出求解的数值计算方法直到编出程序上机算出结果这一过程,则是计算数学的研究对象,也是数值分析的研究对象.因此,数值分析就是研究用计算机解决数学问题的数值方法及其理论,它的内容包括函数的数值逼近、数值微分与数值积分、非线性方程数值解、数值线性代数、微分方程数值解等,它们都是以数学问题为研究对象的.因此,数值分析是数学的一个分支,只是它不像纯数学那样只研究数学本身的理论,而是把理论与计算紧密结合起来,着重研究数学问题的数值方法及其理论.

数值分析也称为计算方法,但不应片面地将它理解为各种数值方法的简单罗列和堆积.同数学分析一样,它内容丰富,研究方法深刻,有自身理论体系的课程,既有纯数学的高度抽象性与严密科学性的特点,又有应用的广泛性与实际试验的高度技术性的特点,是一门与计算机应用密切结合的、实用性很强的数学课程.它与纯数学课程不同,例如,在考虑线性方程组数值解时,“线性代数”中只介绍解存在的唯一性及有关理论和精确解法,运用这些理论和方法,无法在计算机上求解上百个未知数的方程组,更不用说求解十几万个未知数的方程组了.求解这类问题还应根据方程特点,研究适合计算机使用的、满足精度要求的、计算省时间的有效算法及其相关的理

论；在实现这些算法时往往还要根据计算机容量、字长、速度等指标，研究具体求解步骤和程序设计技巧；有的方法在理论上虽不够严格，但通过实际计算、对比分析等手段，只要能证明它们是行之有效的方法，也应采用. 这些就是数值分析具有的特点，概括起来有四点.

第一，面向计算机，要根据计算机特点提供实际可行的有效算法，即算法只能包括加、减、乘、除运算和逻辑运算，它们都是计算机能直接处理的.

第二，有可靠的理论分析，能任意逼近并达到精度要求，对近似算法要保证收敛性和数值稳定性，还要对误差进行分析. 这些都要建立在相应数学理论的基础上.

第三，有好的计算复杂性. 时间复杂性好是指节省时间，空间复杂性好是指节省存储量，这也是建立算法要研究的问题，它关系到算法能否在计算机上实现.

第四，有数值实验. 任何一个算法，除了从理论上要满足上述三点外，还要通过数值实验证明它是行之有效的.

根据“数值分析”的特点，学习时首先要注意掌握方法的基本原理和思想，要注意方法处理的技巧及其与计算机的结合，要重视误差分析、收敛性及稳定性的基本理论；其次，要通过例子，学习使用各种数值方法解决实际计算问题；最后，为了掌握本课程的内容，还应做一定数量的理论分析与计算练习. 由于本课程内容包括了微积分、代数、常微分方程的数值方法，读者必须掌握这几门课的基本内容才能学好这一课程.

1.2 误差来源与误差分析的重要性

用计算机解决科学计算问题首先要建立数学模型，它是对被描述的实际问题进行抽象、简化而得到的，因而是近似的. 我们把数学模型与实际问题之间出现的这种误差称为**模型误差**. 只有实际问题提法正确，建立数学模型时又抽象、简化得合理，才能得到好的结果. 由于这种误差难以用数量表示，通常都假定数学模型是合理的，这种误差可忽略不计，在“数值分析”中不予讨论. 在数学模型中往往还有一些根据观测得到的物理量，如温度、长度、电压等，这些参量显然也包含误差. 这种由观测产生的误差称为**观测误差**，在“数值分析”中也不讨论这种误差. 数值分析只研究用数值方法求解数学模型产生的误差.

当数学模型不能得到精确解时，通常要用数值方法求它的近似解，其近似解与精确解之间的误差称为**截断误差**或**方法误差**. 例如，当函数 $f(x)$ 用 Taylor 多项式

$$P_n(x)=f(0)+\frac{f'(0)}{1!}x+\frac{f''(0)}{2!}x^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n$$

近似代替时，数值方法的截断误差是

$$R_n(x)=f(x)-P_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1},\quad \xi\text{ 在 }x\text{ 与 }0\text{ 之间.}$$

有了求解数学问题的计算公式以后，用计算机进行数值计算时，由于计算机的字长有限，原始数据在计算机上表示会产生误差，计算过程又可能产生新的误差，这种误差称为**舍入误差**，例如，用3.141 59近似代替π，产生的误差

$$R=\pi-3.141\,59=0.000\,002\,6\cdots$$

就是舍入误差.

在"数值分析"中除了研究数学问题的算法外，还要研究计算结果的误差是否满足精度要求，这就是误差估计问题. 本书主要讨论算法的截断误差与舍入误差，对舍入误差通常只作一些定性分析. 下面举例说明误差分析的重要性.

例 1.1 计算 $I_n=\mathrm{e}^{-1}\int_0^1 x^n\mathrm{e}^x\mathrm{d}x\ (n=0,1,\cdots)$，并估计误差.

解 由分部积分可得计算 I_n 的递推公式

$$I_n=1-nI_{n-1}\quad(n=1,2,\cdots),\tag{1.2.1}$$

$$I_0=\mathrm{e}^{-1}\int_0^1\mathrm{e}^x\mathrm{d}x=1-\mathrm{e}^{-1}.$$

若计算出 I_0，代入式(1.2.1)，可逐次求出 $I_1,I_2,\cdots$ 的值. 要算出 I_0 就要先计算 e^{-1}，若用 Taylor 多项式展开部分和

$$\mathrm{e}^{-1}\approx1+(-1)+\frac{(-1)^2}{2!}+\cdots+\frac{(-1)^k}{k!},$$

并取 $k=7$，用四位小数计算，则得 $\mathrm{e}^{-1}\approx0.367\,9$，截断误差

$$R_7=|\mathrm{e}^{-1}-0.367\,9|\leqslant\frac{1}{8!}<\frac{1}{4}\times10^{-4}.$$

计算过程中小数点后第五位的数字按四舍五入原则舍入，由此产生的舍入误差这里先不讨论. 当初值取为 $I_0\approx0.632\,1=\tilde{I}_0$ 时，用式(1.2.1)递推的计算公式为

$$\text{方案(A)}\qquad\begin{cases}\tilde{I}_0=0.632\,1,\\ \tilde{I}_n=1-n\tilde{I}_{n-1}\quad(n=1,2,\cdots).\end{cases}$$

计算结果如表1.1的 $\tilde{I}_n$ 列所示. 用 $\tilde{I}_0$ 近似 I_0 产生的误差 $E_0=I_0-\tilde{I}_0$ 就是初值误差，它对后面计算结果是有影响的.

表 1.1

n	$\tilde{I}_n$(用方案(A)计算)	I_n^*(用方案(B)计算)	n	$\tilde{I}_n$(用方案(A)计算)	I_n^*(用方案(B)计算)
0	0.632 1	0.632 1	5	0.148 0	0.145 5
1	0.367 9	0.367 9	6	0.112 0	0.126 8
2	0.264 2	0.264 3	7	0.216 0	0.112 1
3	0.207 4	0.207 3	8	−0.728	0.103 5
4	0.170 4	0.170 8	9	7.552	0.068 4

从表1.1可以看到，$\widetilde{I}_8$ 出现负值，这与一切 $I_n>0$ 相矛盾. 实际上，由积分估值得

$$\frac{\mathrm{e}^{-1}}{n+1}=\mathrm{e}^{-1}\left(\min_{0\leqslant x\leqslant 1}\mathrm{e}^{x}\right)\int_0^1 x^n\mathrm{d}x<I_n<\mathrm{e}^{-1}\left(\max_{0\leqslant x\leqslant 1}\mathrm{e}^{x}\right)\int_0^1 x^n\mathrm{d}x=\frac{1}{n+1}. \tag{1.2.2}$$

因此，当 n 较大时，用 $\widetilde{I}_n$ 近似 I_n 显然是不正确的. 这里，计算公式与每步计算都是正确的，那么，是什么原因使计算结果错误呢？主要就是初值 $\widetilde{I}_0$ 有误差 $E_0=I_0-\widetilde{I}_0$，由此引起以后各步计算的误差 $E_n=I_n-\widetilde{I}_n$ 满足关系 $E_n=-nE_{n-1}(n=1,2,\cdots)$. 容易推得

$$E_n=(-1)^n n!E_0,$$

这说明 $\widetilde{I}_0$ 有误差 E_0，则 $\widetilde{I}_n$ 就是 E_0 的 $n!$ 倍误差. 例如，$n=8$，若 $|E_0|=\frac{1}{2}\times 10^{-4}$，则 $|E_8|=8!\times|E_0|>2$. 这就说明 $\widetilde{I}_8$ 完全不能近似 I_8 了.

我们现在换一种计算方案. 由式(1.2.2)取 $n=9$，得

$$\frac{\mathrm{e}^{-1}}{10}<I_9<\frac{1}{10},$$

粗略取
$$I_9\approx\frac{1}{2}\left(\frac{1}{10}+\frac{\mathrm{e}^{-1}}{10}\right)=0.068\ 4=I_9^*,$$

然后将式(1.2.1)倒过来算，即由 I_9^* 算出 $I_8^*, I_7^*, \cdots, I_1^*$，公式为

方案(B)
$$\begin{cases} I_9^*=0.068\ 4, \\ I_{n-1}^*=\dfrac{1}{n}(1-I_n^*) \quad (n=9,8,\cdots,1). \end{cases}$$

计算结果如表1.1中的 I_n^* 列所示. 可以发现，I_0^* 与 I_0 的误差不超过 10^{-4}. 由于 $|E_0^*|=\frac{1}{n!}|E_n^*|$，$E_0^*$ 比 E_n^* 缩小了 $n!$ 倍，因此，尽管 E_9^* 较大，但由于误差逐步缩小，故可用 I_n^* 近似 I_n. 反之，当用方案(A)计算时，尽管初值 $\widetilde{I}_0$ 相当准确，但由于误差传播是逐步扩大的，因而计算结果不可靠. 此例说明，在数值计算中如不注意误差分析，用了类似于方案(A)的计算公式，就会出现"差之毫厘，失之千里"的错误结果. 尽管数值计算中估计误差比较困难，但仍应重视计算过程中的误差分析.

1.3 误差的基本概念

1.3.1 误差与误差限

定义 1.1 设 x 为准确值，x^* 为 x 的一个近似值，称 $e^*=x^*-x$ 为近似值的绝

试读结束：需要全本请在线购买： www.ertongbook.com