

811

O241.43  
L73(3)

# 数值分析

李庆扬 王能超  
易大义 编



A0996317

华中科技大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

数值分析/李庆扬 王能超 易大义 编. —3版  
武汉:华中科技大学出版社, 1986年12月  
ISBN 7-5609-0081-X

- I. 数…  
II. ①李… ②王… ③易…  
III. 数值分析-高等学校-教材  
IV. TP3

数值分析

李庆扬 王能超 易大义 编

责任编辑:李立鹏  
责任校对:蔡晓瑚

封面设计:刘 卉  
责任监印:张正林

出版发行:华中科技大学出版社

武昌喻家山 邮编:430074 电话:(027)87545012

录 排:华中科技大学出版社照排室

印 刷:荆州市今印印务有限公司

开本:787×960 1/16

印张:16.75

字数:306 000

版次:1986年12月第3版

印次:2002年2月第27次印刷

印数:203 001—211 000

ISBN 7-5609-0081-X/TP·12

定价:18.00元

(本书若有印装质量问题,请向出版社发行部调换)

## 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。全书共分九章，第一、二、三章由李庆扬编写，第四、五、六章由王能超编写，第七、八、九章由易大义编写。

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，对本教材初稿进行了审查，1982年元月在上海交大召开的第二次计算数学教材审稿会，又对本书第一版提出了修改意见。会议考虑到理工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)。本书第二版就是根据新大纲的要求修改的，它保持了第一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

### 第三版说明

本书自1981年问世以来,为许多工科院校所采用,已先后出过两版,总发行量达四万余册.1985年5月召开的工科院校计算数学教材评议会(南北会议)确认本书“基本符合应用数学专业的要求,可作为数值分析课程的教材,建议作者加以修改后重新出版”.我们遵照这次会议的建议和要求再次进行了修订.新书在出版质量上有了显著的提高.编者诚挚地感谢华中工学院出版社的同志们,为本书的重版付出了辛勤的劳动.

编者

1986年12月

# 目 录

<b>第一章 绪论</b> .....	(1)
§ 1 数值分析的对象与特点 .....	(1)
§ 2 误差来源与误差分析的重要性 .....	(2)
§ 3 误差的基本概念 .....	(4)
3-1 误差与误差限(4) 3-2 相对误差与相对误差限(5)	
3-3 有效数字(5) 3-4 数值运算的误差估计(7)	
§ 4 数值运算中误差分析的方法与原则 .....	(8)
习题 .....	(12)
<b>第二章 插值法</b> .....	(13)
§ 1 引言 .....	(13)
§ 2 拉格朗日插值 .....	(14)
2-1 插值多项式的存在唯一性(14) 2-2 线性插值与抛物插值(15)	
2-3 拉格朗日插值多项式(16) 2-4 插值余项(17)	
§ 3 逐次线性插值法 .....	(20)
§ 4 均差与牛顿插值公式 .....	(21)
4-1 均差及其性质(21) 4-2 牛顿插值公式(23)	
§ 5 差分与等距节点插值公式 .....	(24)
5-1 差分及其性质(24) 5-2 等距节点插值公式(26)	
§ 6 埃尔米特插值 .....	(28)
§ 7 分段低次插值 .....	(30)
7-1 多项式插值的问题(30) 7-2 分段线性插值(31)	
7-3 分段三次埃尔米特插值(32)	
§ 8 三次样条插值 .....	(33)
8-1 三次样条函数(34) 8-2 三转角方程(34) 8-3 三弯矩方程(37)	
8-4 计算步骤与例题(38) 8-5 三次样条插值的收敛性(38)	
习题 .....	(40)
<b>第三章 函数逼近与计算</b> .....	(43)
§ 1 引言与预备知识 .....	(43)
1-1 问题的提出(43) 1-2 维尔斯特拉斯定理(44)	
1-3 连续函数空间 $C[a,b]$ (45)	
§ 2 最佳一致逼近多项式 .....	(45)

• 2 • 数值分析

2-1 最佳一致逼近多项式的存在性(45) 2-2 切比雪夫定理(46)

2-3 最佳一次逼近多项式(48) 2-4 里姆斯算法(49)

§ 3 最佳平方逼近 ..... (50)

3-1 内积空间(50) 3-2 函数的最佳平方逼近(53)

§ 4 正交多项式 ..... (55)

4-1 勒让德多项式(55) 4-2 切比雪夫多项式(58)

4-3 其他常用的正交多项式(60)

§ 5 函数按正交多项式展开 ..... (61)

§ 6 近似最佳一致逼近多项式 ..... (63)

6-1 截断切比雪夫级数(63) 6-2 拉格朗日插值余项的极小化(65)

6-3 泰勒级数项数的节约(67)

§ 7 曲线拟合的最小二乘法 ..... (68)

7-1 一般的最小二乘逼近(68) 7-2 用正交函数作最小二乘拟合(71)

7-3 多元最小二乘拟合(73)

§ 8 傅立叶逼近与快速傅立叶变换 ..... (74)

8-1 最佳平方三角逼近与三角插值(74) 8-2 快速傅氏变换(FFT)(76)

习题 ..... (80)

第四章 数值积分与数值微分 ..... (83)

§ 1 引言 ..... (83)

1-1 数值求积的基本思想(83) 1-2 代数精度的概念(84)

1-3 插值型的求积公式(84)

§ 2 牛顿-柯特斯公式 ..... (85)

2-1 柯特斯系数(85) 2-2 偶阶求积公式的代数精度(87)

2-3 几种低阶求积公式的余项(87) 2-4 复化求积法及其收敛法(88)

§ 3 龙贝格算法 ..... (90)

3-1 梯形法的递推化(90) 3-2 龙贝格公式(92)

3-3 李查逊外推加速法(93) 3-4 梯形法的余项展开式(95)

§ 4 高斯公式 ..... (96)

4-1 高斯点(97) 4-2 高斯-勒让德公式(98) 4-3 高斯公式的余项(99)

4-4 高斯公式的稳定性(99) 4-5 带权的高斯公式(100)

§ 5 数值微分 ..... (101)

5-1 中点方法(101) 5-2 插值型的求导公式(103)

5-3 实用的五点公式(105) 5-4 样条求导(106)

习题 ..... (106)

第五章 常微分方程数值解法 ..... (108)

§ 1 引言 ..... (108)

§ 2 尤拉方法 ..... (108)

2-1 尤拉公式(108)	2-2 后退的尤拉公式(110)	2-3 梯形公式(111)
2-4 改进的尤拉公式(112)	2-5 尤拉两步公式(113)	
§ 3 龙格-库塔方法	(115)	
3-1 泰勒级数法(115)	3-2 龙格-库塔方法的基本思想(116)	
3-3 二阶龙格-库塔方法(117)	3-4 三阶龙格-库塔方法(118)	
3-5 四阶龙格-库塔方法(119)	3-6 变步长的龙格-库塔方法(121)	
§ 4 单步法的收敛性和稳定性	(122)	
4-1 单步法的收敛性(122)	4-2 单步法的稳定性(124)	
§ 5 线性多步法	(126)	
5-1 基于数值积分的构造方法(126)	5-2 亚当姆斯显式公式(126)	
5-3 亚当姆斯隐式公式(127)	5-4 亚当姆斯预测-校正系统(128)	
5-5 基于泰勒展开的构造方法(130)	5-6 米尔尼公式(131)	
5-7 哈明公式(132)		
§ 6 方程组与高阶方程的情形	(133)	
6-1 一阶方程组(133)	6-2 化高阶方程组为一阶方程组(134)	
§ 7 边值问题的数值解法	(135)	
7-1 试射法(136)	7-2 差分方程的建立(136)	
7-3 差分问题的可解性(138)	7-4 差分方程的收敛性(139)	
习题	(141)	
<b>第六章 方程求根</b>	(143)	
§ 1 根的搜索	(143)	
1-1 逐步搜索法(143)	1-2 二分法(143)	
§ 2 迭代法	(145)	
2-1 迭代过程的收敛性(145)	2-2 迭代公式的加工(148)	
§ 3 牛顿法	(150)	
3-1 牛顿公式(150)	3-2 牛顿法的几何解释(151)	
3-3 牛顿法的局部收敛性(151)	3-4 牛顿法应用举例(153)	
3-5 牛顿下山法(154)		
§ 4 弦截法与抛物线法	(155)	
4-1 弦截法(155)	4-2 抛物线法(158)	
§ 5 代数方程求根	(160)	
5-1 多项式求值的秦九韶算法(160)	5-2 代数方程的牛顿法(161)	
5-3 劈因子法(161)		
习题	(163)	
<b>第七章 解线性方程组的直接方法</b>	(165)	
§ 1 引言	(165)	
§ 2 高斯消去法	(165)	

• 4 • 数值分析

2-1 高斯消去法(165) 2-2 矩阵的三角分解(169) 2-3 计算量(170)

§ 3 高斯主元素消去法 ..... (171)

3-1 完全主元素消去法(173) 3-2 列主元素消去法(174)

3-3 高斯-若当消去法(176)

§ 4 高斯消去法的变形 ..... (178)

4-1 直接三角分解法(178) 4-2 平方根法(181) 4-3 追赶法(185)

§ 5 向量和矩阵的范数 ..... (186)

§ 6 误差分析 ..... (192)

6-1 矩阵的条件数(192) 6-2 舍入误差(196)

习题 ..... (198)

**第八章 解线性方程组的迭代法** ..... (202)

§ 1 引言 ..... (202)

§ 2 雅可比迭代法与高斯-塞德尔迭代法 ..... (204)

2-1 雅可比迭代法(204) 2-2 高斯-塞德尔迭代法(205)

§ 3 迭代法的收敛性 ..... (206)

§ 4 解线性方程组的超松弛迭代法 ..... (213)

习题 ..... (217)

**第九章 矩阵的特征值与特征向量计算** ..... (220)

§ 1 引言 ..... (220)

§ 2 幂法及反幂法 ..... (221)

2-1 幂法(221) 2-2 加速方法(225) 2-3 反幂法(227)

§ 3 雅可比方法 ..... (229)

3-1 引言(229) 3-2 雅可比方法(230) 3-3 雅可比过关法(235)

§ 4 豪斯荷尔德方法 ..... (236)

4-1 引言(236) 4-2 用正交相似变换约化矩阵(239)

§ 5 QR 算法 ..... (243)

5-1 引言(243) 5-2 QR 算法(245) 5-3 带原点位移的 QR 方法(248)

习题 ..... (252)

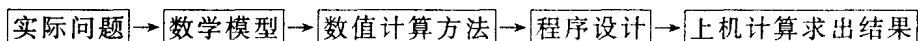
部分习题答案 ..... (254)



# 第一章 绪 论

## § 1 数值分析的对象与特点

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, 则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, 我们考察用计算机解决科学计算问题时经历的几个过程:



由实际问题的提出到上机求得问题解答的整个过程都可看作是应用数学的任务. 如果细分的话, 由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任务. 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任务, 也是数值分析研究的对象. 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、数值线代数、常微和偏微数值解等, 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, 着重研究数学问题的数值方法及其理论.

数值分析也称计算方法, 但不应片面地理解为各种数值方法的简单罗列和堆积, 同数学分析一样, 它也是一门内容丰富, 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, 是一门与计算机使用密切结合的实用性很强的数学课程. 为了说明它与纯数学课不同, 例如考虑线性方程组数值解, 在“线性代数”中只介绍解的存在唯一性及有关理论和精确解法, 在这些理论和方法还不能在计算机上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, 要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、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, 证明是行之有效的方法, 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, 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.这都建立在相应数学理论的基础上.

第三,要有好的计算复杂性,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,要有数值实验,即任何一个算法除了从理论上要满足上述三点外,还要通过数值试验证明是行之有效的.

根据“数值分析”的特点,学习时我们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,为了掌握本课的内容,还应做一定数量的理论分析与计算练习.由于本课内容包括了微积分、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.

## § 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.由于这种误差难于用数量表示,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,函数  $f(x)$  用泰勒(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,则数值方法的截断误差是  $R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1}$ .

有了求解数学问题的计算公式以后,用计算机做数值计算时,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 3.14159 近似代替  $\pi$ ,产生的误差

$$R = \pi - 3.14159 = 0.000026\cdots$$

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.对舍入误差通常只做一些定性分析.下面举例说明误差分析的重要性.

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

由分部积分可得计算  $I_n$  的递推公式

$$I_n = 1 - nI_{n-1} \quad (n=1,2,\dots), \quad I_0 = e^{-1} \int_0^1 e^x dx = 1 - e^{-1}; \quad (2.1)$$

若计算出  $I_0$ , 代入(2.1)式,可逐次求出  $I_1, I_2, \dots$  的值.要算出  $I_0$  就要先计算  $e^{-1}$ , 若用泰勒多项式展开部分和

$$e^{-1} \approx 1 + (-1) + \frac{(-1)^2}{2!} + \dots + \frac{(-1)^k}{k!},$$

并取  $k=7$ , 用4位小数计算, 则得  $e^{-1} \approx 0.3679$ , 截断误差  $R_7 = |e^{-1} - 0.3679| \leq \frac{1}{8!} < \frac{1}{4} \times 10^{-4}$ . 计算过程中小数点后第5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  $I_0 \approx 0.6321 = \tilde{I}_0$  时, 用(2.1)式递推的计算公式为

$$(A) \begin{cases} \tilde{I}_0 = 0.6321; \\ \tilde{I}_n = 1 - n\tilde{I}_{n-1} \quad (n=1,2,\dots), \end{cases}$$

计算结果见表1-1的  $\tilde{I}_n$  列. 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(A)算)	$I_n^*$ (用(B)算)	$n$	$\tilde{I}_n$ (用(A)算)	$I_n^*$ (用(B)算)
0	0.6321	0.6321	5	0.1480	0.1455
1	0.3679 ↓	0.3679	6	0.1120 ↓	0.1268
2	0.2642	0.2643	7	0.2160	0.1121
3	0.2074	0.2073	8	-0.728	0.1035 ↑
4	0.1704	0.1708 ↓	9	7.552	0.0684

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

$$\frac{e^{-1}}{n+1} = e^{-1} (\min_{0 \leq x \leq 1} e^x) \int_0^1 x^n dx < I_n < e^{-1} (\max_{0 \leq x \leq 1} e^x) \int_0^1 x^n dx = \frac{1}{n+1}.$$

因此, 当  $n$  较大时, 用  $\tilde{I}_n$  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, 那么什么原因使计算结果错误呢? 主要就是初值  $\tilde{I}_0$  有误差  $E_0 = I_0 - \tilde{I}_0$ , 由此引起以后各步计算的误差  $E_n = I_n - \tilde{I}_n$  满足关系  $E = -nE_{n-1}$  ( $n=1,2,\dots$ ). 容易推得

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

这说明  $\tilde{I}_0$  有误差  $E_0$ , 则  $\tilde{I}_n$  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  $\tilde{I}_8$  完全不能近似  $I_8$  了.

我们现在换一种计算方案. 由 (2.2) 取  $n=9$ , 得  $\frac{e^{-1}}{10} < I_9 < \frac{1}{10}$ ,

我们粗略取  $I_9 \approx \frac{1}{2} \left( \frac{1}{10} + \frac{e^{-1}}{10} \right) = 0.0684 = I_9^*$ , 然后将公式 (2.1) 倒过来算, 即由  $I_9^*$  算出  $I_8^*, I_7^*, \dots, I_1^*$ , 公式为

$$(B) \begin{cases} I_9^* = 0.0684, \\ I_{n-1}^* = \frac{1}{n} (1 - I_n^*) \quad (n = 9, 8, \dots, 1); \end{cases}$$

计算结果见表 1-1 的  $I_n^*$  列. 我们发现  $I_0^*$  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  $E_n^*$  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  $\tilde{I}_0$  相当准确, 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, 我们仍应重视计算过程中的误差分析.

### § 3 误差的基本概念

#### 3-1 误差与误差限

**定义 1** 设  $x$  为准确值,  $x^*$  为  $x$  的一个近似值, 称  $e^* = x^* - x$  为近似值的绝对误差, 简称误差.

注意这样定义的误差  $e^*$  可正可负, 当绝对误差为正时近似值偏大, 叫**强近似值**; 当绝对误差为负时近似值偏小, 叫**弱近似值**.

通常我们不能算出准确值  $x$ , 也不能算出误差  $e^*$  的准确值, 只能根据测量工具或计算情况估计出误差的绝对值不超过某正数  $\epsilon^*$ , 也就是误差绝对值的一个上界.  $\epsilon^*$  叫做近似值的误差限, 它总是正数. 例如, 用毫米刻度的米尺测量一长度  $x$ , 读出和该长度接近的刻度  $x^*$ ,  $x^*$  是  $x$  的近似值, 它的误差限是 0.5 毫米, 于是  $|x^* - x| \leq 0.5$  毫米; 如读出的长度为 765 毫米, 则有  $|765 - x| \leq 0.5$ . 从这不等式我们仍不知道准确的  $x$  是多少, 但知  $764.5 \leq x \leq 765.5$ , 说明  $x$  在区间  $[764.5, 765.5]$  内.

对于一般情形  $|x^* - x| \leq \epsilon^*$ , 即  $x^* - \epsilon^* \leq x \leq x^* + \epsilon^*$ , 这个不等式有时也表示为

$$x = x^* \pm \epsilon^*.$$

### 3-2 相对误差与相对误差限

误差限的大小还不能完全表示近似值的好坏. 例如, 有两个量  $x = 10 \pm 1$ ,  $y = 1000 \pm 5$ , 则

$$x^* = 10, \quad \epsilon_x^* = 1, \quad y^* = 1000, \quad \epsilon_y^* = 5.$$

虽然  $\epsilon_y^*$  比  $\epsilon_x^*$  大 4 倍, 但  $\epsilon_y^*/y^* = \frac{5}{1000} = 0.5\%$  比  $\epsilon_x^*/x^* = \frac{1}{10} = 10\%$  要小得多, 这说明  $y^*$  近似  $y$  的程度比  $x^*$  近似  $x$  的程度要好得多. 所以, 除考虑误差的大小外, 还应考虑准确值  $x$  本身的大小. 我们把近似值的误差  $e^*$  与准确值  $x$  的比值

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

称为近似值  $x^*$  的相对误差, 记作  $e_r^*$ .

在实际计算中, 由于真值  $x$  总是不知道的, 通常取  $e_r^* = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$

作为  $x^*$  的相对误差, 条件是  $e_r^* = \frac{e^*}{x^*}$  较小, 此时

$$\frac{e^*}{x} - \frac{e^*}{x^*} = \frac{e^*(x^* - x)}{x^*x} = \frac{(e^*)^2}{x^*(x^* - e^*)} = \frac{(e^*/x^*)^2}{1 - (e^*/x^*)}$$

是  $e_r^*$  的平方项级, 故可忽略不计.

相对误差也可正可负, 它的绝对值上界叫做相对误差限, 记作  $\epsilon_r^*$ :  $\epsilon_r^* = \frac{\epsilon^*}{|x^*|}$ .

据定义, 上例  $\frac{\epsilon_x^*}{|x^*|} = 10\%$  与  $\frac{\epsilon_y^*}{|y^*|} = 0.5\%$  分别为  $x$  与  $y$  的相对误差限, 可见  $y^*$  近似  $y$  的程度比  $x^*$  近似  $x$  的程度好.

### 3-3 有效数字

当准确值  $x$  有多位数时, 常常按四舍五入的原则得到  $x$  的前几位近似值  $x^*$ , 例如

$$x = \pi = 3.14159265\dots$$

取 3 位  $x_3^* = 3.14$ ,  $\epsilon_3^* \leq 0.002$ ; 取 5 位  $x_5^* = 3.1416$ ,  $\epsilon_5^* \leq 0.000008$ ,

它们的误差都不超过末位数字的半个单位, 即

$$|\pi - 3.14| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}, \quad |\pi - 3.1416| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}.$$

若近似值  $x^*$  的误差限是某一位的半个单位, 该位到  $x^*$  的第一位非零数字共有  $n$  位, 我们就说  $x^*$  有  $n$  位有效数字. 如取  $x^* = 3.14$  作  $\pi$  的近似值,  $x^*$  就有 3 位有效数字; 取  $x^* = 3.1416$  作  $\pi$  的近似值,  $x^*$  就有 5 位有效数字.  $x^*$  有  $n$  位有效数字可写成

标准形式

$$x^* = \pm 10^m \times (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}), \quad (3.1)$$

其中,  $a_1$  是 1 到 9 中的一个数字,  $a_2, \cdots, a_n$  是 0 到 9 中的一个数字,  $m$  为整数, 且

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1} \quad (3.2)$$

**例 2** 按四舍五入原则写出下列各数具有 5 位有效数字的近似数:

$$187.9325, 0.03785551, 8.000033, 2.7182818.$$

按定义, 上述各数具有 5 位有效数字的近似数分别是

$$187.93, 0.037856, 8.0000, 2.7183.$$

注意  $x=8.000033$  的 5 位有效数字近似数是 8.0000 而不是 8, 因为 8 只有 1 位有效数字.

**例 3** 重力常数  $g$ , 如果以  $\text{m/s}^2$  为单位,  $g \approx 9.80 \text{m/s}^2$ ; 若以  $\text{km/s}^2$  为单位,  $g \approx 0.00980 \text{km/s}^2$ , 它们都具有 3 位有效数字, 因为按第一种写法

$$|g - 9.80| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2},$$

据 (3.1), 这里  $m=0, n=3$ ; 按第二种写法  $|g - 0.00980| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-5}$ ,

这里  $m=-3, n=3$ . 它们虽然写法不同, 但都具有 3 位有效数字. 至于绝对误差限, 由于单位不同结果也不同,  $\epsilon_1^* = \frac{1}{2} \times 10^{-2} \text{m/s}^2, \epsilon_2^* = \frac{1}{2} \times 10^{-5} \text{km/s}^2$ , 而相对误差都是

$$\epsilon_r^* = 0.005/9.80 = 0.000005/0.00980.$$

注意相对误差与相对误差限是无量纲的, 而绝对误差与误差限是有量纲的.

例 3 说明有效位数与小数点后有多少位数无关. 然而, 从 (3.2) 可得到具有  $n$  位有效数字的近似数  $x^*$ , 其绝对误差限为

$$\epsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1},$$

在  $m$  相同的情况下,  $n$  越大则  $10^{m-n+1}$  越小, 故有效位数越多, 绝对误差限越小.

至于有效数字与相对误差限的关系, 有

**定理 1** 用 (3.1) 表示的近似数  $x^*$ , 若  $x^*$  具有  $n$  位有效数字, 则其相对误差限为

$$\epsilon_r^* \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)};$$

反之, 若  $x^*$  的相对误差限  $\epsilon_r^* \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$ , 则  $x^*$  至少具有  $n$  位有效数字.

**证明** 由 (3.1) 可得  $a_1 \times 10^m \leq |x^*| \leq (a_1+1) \times 10^m$ , 当  $x^*$  有  $n$  位有效数字时

$$\epsilon_r^* = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{0.5 \times 10^{m-n+1}}{a_1 \times 10^m} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1};$$

反之, 由  $|x - x^*| = |x^*| \epsilon_r^* \leq (a_1+1) \times 10^m \times \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} = 0.5 \times 10^{m-n+1}$ ,

故  $x^*$  有  $n$  位有效数字. 定理证完.

定理说明, 有效位数越多, 相对误差限越小.

例 4 要使  $\sqrt{20}$  的近似值的相对误差限小于  $0.1\%$ , 要取几位有效数字?

由定理 1,  $\epsilon_r^* \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$ . 由于  $\sqrt{20} = 4.4, \dots$ , 知  $a_1 = 4$ , 故只要取  $n = 4$ , 就有

$$\epsilon_r^* \leq 0.125 \times 10^{-3} < 10^{-3} = 0.1\%,$$

即只要对  $\sqrt{20}$  的近似值取 4 位有效数字, 其相对误差限就小于  $0.1\%$ . 此时由开方表得  $\sqrt{20} \approx 4.472$ .

### 3-4 数值运算的误差估计

两个近似数  $x_1^*$  与  $x_2^*$ , 其误差限分别为  $\epsilon(x_1^*)$  及  $\epsilon(x_2^*)$ , 它们进行加、减、乘、除运算得到的误差限分别为

$$\begin{aligned} \epsilon(x_1^* \pm x_2^*) &= \epsilon(x_1^*) \pm \epsilon(x_2^*); \\ \epsilon(x_1^*/x_2^*) &\approx |x_1^*| \epsilon(x_2^*) + |x_2^*| \epsilon(x_1^*); \\ \epsilon(x_1^*/x_2^*) &\approx \frac{|x_1^*| \epsilon(x_2^*) + |x_2^*| \epsilon(x_1^*)}{|x_2^*|^2} (x_2^* \neq 0). \end{aligned}$$

更一般情况是, 当自变量有误差时计算函数值也产生误差, 其误差限可利用函数的泰勒展开式进行估计. 设  $f(x)$  是一元函数,  $x$  的近似值为  $x^*$ , 以  $f(x^*)$  近似  $f(x)$ , 其误差限记作  $\epsilon(f(x^*))$ , 可用泰勒展开

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

$\xi$  介于  $x, x^*$  之间,

取绝对值得

$$|f(x) - f(x^*)| \leq |f'(x^*)| \epsilon(x^*) + \frac{|f''(\xi)|}{2} \epsilon^2(x^*).$$

假定  $f'(x^*)$  与  $f''(x^*)$  的比值不太大, 可忽略  $\epsilon(x^*)$  的高阶项, 于是可得计算函数的误差限

$$\epsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)| \epsilon(x^*).$$

当  $f$  为多元函数时, 如计算  $A = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ .

如果  $x_1, x_2, \dots, x_n$  的近似值为  $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$ , 则  $A$  的近似值为  $A^* = f(x_1^*, \dots, x_n^*)$ , 于是函数值  $A^*$  的误差  $e(A^*)$  由泰勒展开得

$$\begin{aligned} e(A^*) &= A^* - A = f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) - f(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ &\approx \sum_{k=1}^n \left( \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_k} \right) (x_k^* - x_k) \\ &= \sum_{k=1}^n \left( \frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* e_k^*, \end{aligned}$$

于是误差限 
$$\epsilon(A^*) \approx \sum_{k=1}^n \left| \left( \frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \right| \epsilon(x_k^*); \quad (3.3)$$

而  $A^*$  的相对误差限为

$$\epsilon_r^* = \epsilon_r(A^*) = \frac{\epsilon(A^*)}{|A^*|} \approx \sum_{k=1}^k \left| \left( \frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \right| \frac{\epsilon(x_k^*)}{|A^*|}. \quad (3.4)$$

**例 5** 已测得某场地长  $l$  的值为  $l^* = 110\text{m}$ , 宽  $d$  的值为  $d^* = 80\text{m}$ , 已知  $|l - l^*| \leq 0.2\text{m}$ ,  $|d - d^*| \leq 0.1\text{m}$ . 试求面积  $S = ld$  的绝对误差限与相对误差限.

**解** 因  $s = ld$ ,  $\frac{\partial s}{\partial l} = d$ ,  $\frac{\partial s}{\partial d} = l$ , 由 (3.3) 知

$$\epsilon(s^*) \approx \left| \left( \frac{\partial s}{\partial l} \right)^* \right| \epsilon(l^*) + \left| \left( \frac{\partial s}{\partial d} \right)^* \right| \epsilon(d^*),$$

其中  $\left( \frac{\partial s}{\partial l} \right)^* = d^* = 80\text{m}$ ,  $\left( \frac{\partial s}{\partial d} \right)^* = l^* = 110\text{m}$ ,

而  $\epsilon(l^*) = 0.2\text{m}$ ,  $\epsilon(d^*) = 0.1\text{m}$ ,

于是绝对误差限

$$\epsilon(s^*) \approx 80 \times (0.2) + 110 \times (0.1) = 27(\text{m}^2);$$

相对误差限 
$$\epsilon_r(s^*) = \frac{\epsilon(s^*)}{|s^*|} = \frac{\epsilon(s^*)}{l^* d^*} \approx \frac{27}{8800} = 0.31\%.$$

## § 4 数值运算中误差分析的方法与原则

数值运算中的误差分析是个很重要而复杂的问题, 上节讨论了不精确数据运算结果的误差限, 它只适用于简单情形, 然而一个工程或科学计算问题往往要运算千万次, 由于每步运算都有误差, 如果每步都做误差分析是不可能的, 也不科学, 因为误差积累有正有负, 绝对值有大有小, 都按最坏情况估计误差限得到的结果比实际误差大得多, 这种保守的误差估计不反映实际误差积累. 考虑到误差分布的随机性, 有人用概率统计方法, 将数据和运算中的舍入误差视为适合某种分布的随机变量, 然后确定计算结果的误差分布, 这样得到的误差估计更接近实际, 这种方法称为概率分析法.

60 年代以后对舍入误差分析提出了一些新方法, 较重要的有以下两种.

一、向后误差分析法是把新算出的量由某个公式表达, 它仅含基本算术运算, 如假定  $a_1, a_2, \dots, a_n$  是前面已算出的量或原始数据, 新算出量

$$x = g(a_1, a_2, \dots, a_n).$$

若  $a_i$  的摄动为  $\epsilon_i$ , 使得由浮点运算得出结果为

$$x_{fl} = g(a_1 + \epsilon_1, \dots, a_n + \epsilon_n),$$

则可根据  $\epsilon_i$  的界由摄动理论估计最后舍入误差  $|x - x_{fl}|$  的界. 威克逊(Wilkinson)将



这种方法应用于数值代数(矩阵运算)的误差分析,取得较好效果。

二、区间分析法是把参加运算的数,  $x, y, z, \dots$  都看成区间量  $X, Y, Z, \dots$ , 根据区间运算规则求得最后结果的近似值及误差限. 例如,  $x, y$  的近似数为  $\alpha, \beta$ , 由于  $|x - \alpha| \leq \delta\alpha, |y - \beta| \leq \delta\beta$ , 则  $x \in [\alpha - \delta\alpha, \alpha + \delta\alpha] = X, y \in [\beta - \delta\beta, \beta + \delta\beta] = Y$ , 若计算  $z = x * y$  ( $*$  为运算符号), 由  $Z = X * Y = [\underline{z}, \bar{z}] = [z - \delta z, z + \delta z]$ , 则  $z$  为所求近似值, 而  $\delta z$  则为误差限。

上面简略介绍了误差分析的几种方法, 但都不是十分有效的, 目前解决这一问题常常是针对不同类型问题逐个进行分析, 由于定量分析常常是很困难的, 因此对误差积累问题进行定性分析就有重要意义, 这就要引入数值稳定性概念. 我们把运算过程舍入误差不增长的计算公式称为数值稳定的, 否则是不稳定的, 如例 1 给出的两种计算方案中公式(A)由于初值有误差, 在计算过程中这一误差逐渐增大, 故不稳定. 而公式(B)虽然初值也有误差, 但计算过程误差不增长, 故(B)是数值稳定的. 研究一个计算公式是否稳定, 只要假定初始值有误差  $\epsilon_0$ , 中间不再产生新误差, 考察由  $\epsilon_0$  引起的误差积累是否增长, 如不增长就认为是稳定的, 否则不稳定. 对稳定的计算公式不具体估计舍入误差积累也可相信它是可用的, 误差限不会太大. 而对不稳定的公式通常就不能使用, 如要使用也只能计算步数少并注意对误差积累进行控制. 在本课中对各种计算过程都只研究它的稳定性, 而不具体估计舍入误差. 这里只提出数值运算中应注意的若干原则, 它有助于鉴别计算结果的可靠性并防止误差危害的现象产生。

### 1. 要避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法

用绝对值小的数作除数舍入误差会增大, 如计算  $\frac{x}{y}$ , 若  $0 < |y| \ll |x|$ , 则可能对计算结果带来严重影响, 应尽量避免。

例 6 线性方程组 
$$\begin{cases} 0.00001x_1 + x_2 = 1; \\ 2x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$
 的准确解为

$$x_1 = \frac{200000}{399999} = 0.50000125;$$

$$x_2 = \frac{199998}{199999} = 0.999995.$$

现在四位浮点十进制数(仿机器实际计算)下用消去法求解, 上述方程写成

$$\begin{cases} 10^{-4} \cdot 0.1000x_1 + 10^1 \cdot 0.1000x_2 = 10^1 \cdot 0.1000; \\ 10^1 \cdot 0.2000x_1 + 10^1 \cdot 0.1000x_2 = 10^1 \cdot 0.2000. \end{cases}$$

若用  $(10^{-4} \cdot 0.1000)/2$  除第一方程减第二方程, 则出现用小的数除大的数, 得

$$\begin{cases} 10^{-4} \cdot 0.1000x_1 + 10^1 \cdot 0.1000x_2 = 10^1 \cdot 0.1000; \\ 10^6 \cdot 0.2000x_2 = 10^6 \cdot 0.2000, \end{cases}$$

由此解出  $x_1 = 0, x_2 = 10^1 \cdot 0.1000 = 1$ , 显然严重失真。

若反过来用第二个方程消去第一个方程中含  $x_1$  的项, 则避免了大数被小数除,