研究生教学用书

实用数值分析

▶ 杜迎春　编著

化学工业出版社

本书重点介绍科学与工程计算中遇到的数学模型和数据处理问题数值计算方法，主要内容包括：非线性方程的解法，线性和非线性方程组的解法，常微分方程及方程组的解法，插值法，曲线拟合，数值积分与数值微分等。

全书在不影响理论完整性的基础上力求深入浅出，着重于应用，便于教学和自学。对介绍的实用方法均配有 Qbasic 计算程序和适量的例题及解题过程分析和计算结果。

本书可作为工科非计算机和非数学专业的硕士研究生、本科生《数值分析》或《计算方法》等课程的教材或教学参考书，也可供科技工作者参考。

图书在版编目（CIP）数据

实用数值分析/杜迎春编著. —北京：化学工业出版社，2007.7
研究生教学用书
ISBN 978-7-122-00765-0

Ⅰ.实… Ⅱ.杜… Ⅲ.数值计算-研究生-教材
Ⅳ.0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2007）第 097780 号

责任编辑：唐旭华　　文字编辑：云　雷
责任校对：宋　夏　　装帧设计：张　辉

出版发行：化学工业出版社（北京市东城区青年湖南街 13 号　邮政编码 100011）
印　　刷：北京市振南印刷有限责任公司
装　　订：三河市宇新装订厂
720mm×1000mm　1/16　印张 15¼　字数 317 千字　2007 年 9 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询：010-64518888（传真：010-64519686）　售后服务：010-64518899
网　　址：http://www.cip.com.cn
凡购买本书，如有缺损质量问题，本社销售中心负责调换。

定　　价：25.00 元

前　　言

随着现代科学技术的发展和计算机的广泛使用，科学计算作为三大现代科学研究方法之一，已成为科学研究与工程设计的重要手段，越来越多领域的科研人员和工程技术人员需要掌握和应用数值分析提供的数学原理和计算方法，进行本学科的科学与工程问题的分析与求解。

早在 20 世纪 90 年代，作者开始为研究生讲授“数值分析”课不久，从北京晚报上看到了一篇仅几百字的小文章，标题吸引了我，叫做“数学技术是未来高科技制高点”。文章从第一次海湾战争，数字式高清晰电视的开发，百分之百数字化设计的波音“777 型”飞机等实例出发，提出了“未来高科技的核心是数学技术”的观点。文章的观点我深为赞同，每年的绪论课都要为学生念这篇文章。它的作者是北京大学张筑生教授。张先生是北大的第一个博士，一直致力于数学专业本科生数学基础课的教学，还拖着抱病之躯连续五年担任中国数学奥林匹克竞赛国家队主教练，带领的中国队连拿五届总分第一。十几年之后在写这篇文字时我才知道，张先生不幸于 2002 年去世，在此深表悼念。

作者十余年工科硕士研究生“数值分析”课的教学实践。深知数学功底的先天不足使工科学生在读理论性强的大部头专著时的困惑，同时作为化学工程专业的硕士生导师，在后续讲授的专业课《化学反应器理论》和指导研究生毕业论文过程中，要求学生使用数值分析的原理、方法，解决所遇到的有关数学模拟、实验数据回归问题，使作者无论站在教授数值分析的立场还是使用数值分析的立场，都认为对于工科学生此课的特点应是理论与实际密切结合，使学生能在后续课程、毕业论文和今后的科研或工程设计工作中应用。本书编写的初衷是使本校工科硕士研究生“数值分析”课有一本适用的教材，既有一定理论深度，又切合非数学专业工科学生知识结构的特点和今后工作需要；既将重要的数值方法阐述清楚，又为学习者提供有效的程序段，方便学习者自行编制程序，使学习者具有实际应用能力。

本书适用于以下读者。

（1）在试图探索客观规律的科学实验中获得了大量实验数据，希望能由这些离散数据进一步得到更多、更深层次信息的读者，这些信息包括得到这些观测到的离散数据所揭示的接近于客观实际的数学规律，得到未观测区域的可能的数值和这些离散数据的微分或者积分。

（2）需要建立描述实际科学与工程技术工作实践中涉及的过程产生的数学模型而且需要求解这些模型的读者。这些模型可能是复杂的诸如含超越函数或递推过程的单个非线性方程，高阶的线性方程组，非线性方程组，微分方程或方程组。

本书的特色是：①本书对介绍的全部实用方法均配有 Qbasic 语言编制的计算子程序，读者只需根据实际问题编写主程序和函数子程序即可轻松进行计算；②每

章均配有适量的例题及解题过程分析和计算结果，方便读者更深入地理解所介绍的理论及方法，同时对各方法进行比较，了解各自的适用性；③对涉及的数学知识进行简单回顾和归纳，如误差、矩阵、差分和差商等，使读者可以不再查阅其它书籍；④为了方便读者查阅英文参考文献，给出了常用术语的英文。

由于作者水平有限，书中难免存在不妥之处，恳请读者批评指正。

编者

2007 年 6 月

目　　录

1　绪论 ………………………………………………………………………… 1

1.1　数值分析的任务与特点 ……………………………………………… 1

1.2　误差 ……………………………………………………………………… 4

1.3　泰勒级数 ………………………………………………………………… 9

1.4　重要的 Qbasic 程序段 ……………………………………………… 11

思考题与习题 ……………………………………………………………… 12

2　非线性方程的数值解法 ………………………………………………… 14

2.1　问题的描述与基本思路 ……………………………………………… 14

2.2　根的隔离与初值估计 ………………………………………………… 15

2.3　简单迭代法 …………………………………………………………… 18

2.4　Aitken 迭代法 ………………………………………………………… 23

2.5　Newton 法 ……………………………………………………………… 25

2.6　Newton 下山法 ………………………………………………………… 29

2.7　弦位法 …………………………………………………………………… 31

2.8　迭代法的收敛阶 ……………………………………………………… 35

2.9　Lin-Bairstow 法 ……………………………………………………… 36

思考题与习题 ……………………………………………………………… 42

3　线性方程组的直接解法 ………………………………………………… 44

3.1　引言 ……………………………………………………………………… 44

3.2　Gauss 消去法 …………………………………………………………… 47

3.3　Gauss 主元素消去法 ………………………………………………… 51

3.4　追赶法 …………………………………………………………………… 57

3.5　Gauss-Jordan 消去法 ………………………………………………… 61

3.6　LU 分解法 ……………………………………………………………… 66

3.7　LDL^T 分解法 ………………………………………………………… 71

思考题与习题 ……………………………………………………………… 75

4　方程组的迭代解法 ……………………………………………………… 77

4.1　引言 ……………………………………………………………………… 77

4.2　解线性方程组的简单迭代法 ………………………………………… 80

4.3 解线性方程组的 Gauss-Seidel 法 …… 86
4.4 解线性方程组的逐次超松弛法 …… 89
4.5 解非线性方程组的 Jacobi 迭代法 …… 92
4.6 解非线性方程组的 Gauss-Seidel 迭代法 …… 96
4.7 解非线性方程组的 Newton-Raphson 法 …… 98
思考题与习题 …… 102

5 插值法 …… 105
5.1 基本概念 …… 105
5.2 Lagrange 插值法 …… 107
5.3 分段插值 …… 113
5.4 Newton 插值 …… 117
5.5 等距节点插值 …… 121
5.6 三次样条插值 …… 124
5.7 数值微分 …… 130
思考题与习题 …… 133

6 最小二乘法与曲线拟合 …… 135
6.1 前言 …… 135
6.2 直线拟合 …… 137
6.3 多项式拟合 …… 145
6.4 线性最小二乘法 …… 149
6.5 非线性最小二乘法 …… 154
思考题与习题 …… 159

7 数值积分 …… 162
7.1 引言 …… 162
7.2 Newton-Cotes 求积公式 …… 164
7.3 复化求积公式 …… 168
7.4 数值积分的精度与误差 …… 173
7.5 加速求积公式 …… 177
7.6 Gauss-Legendre 求积公式 …… 183
思考题与习题 …… 190

8 常微分方程的数值解法 …… 191
8.1 引言 …… 191
8.2 Euler 法与改进的 Euler 法 …… 193
8.3 Runge-Kutta 法 …… 200
8.4 Adams 法 …… 204

8.5 常微分方程组及高阶常微分方程初值问题的数值解法 …………………… 210
8.6 常微分方程边值问题的数值解法 …………………………………………… 219
思考题与习题 ……………………………………………………………………… 230

参考文献 ………………………………………………………………………… 232

1 绪　　论

1.1 数值分析的任务与特点

1.1.1 数值分析的任务

1.1.1.1 数值分析与科学技术

数学是自然科学与工程技术的基础，高新技术的核心是数学技术。随着知识经济和信息社会的到来，作为现代科学研究方法三大组成部分之一的科学计算正越来越受到重视。大量用于科学研究和工程设计的实验被数学模型的研究逐步取代。随着社会的进步，从事科学技术工作的人员必须了解和掌握科学计算的有关知识。

数值分析（Numerical analysis）曾经且至今仍可见到的名称是数值方法（Numerical method）和计算方法（Computation method）。计算方法是最古老的数学之一，早期作为数学分析（Mathematical analysis）的补充，可以求解其所不能求解的数学问题。但由于它计算过程的进行依赖于计算工具这一特殊性而一直不能得以广泛应用，也限制了其自身的发展。20 世纪 50 年代电子数字计算机问世及后来的迅速发展，使计算方法的广泛应用成为可能，反过来又刺激了计算方法自身的理论及算法的不断发展和成熟，使之成为一个日趋完善的独立的数学学科——数值分析。同数学分析一样，它也是一门内容丰富，研究方法深刻，有自身理论体系的学科，不同的是它既有纯数学的高度抽象性与严密的科学性的特点，又有应用的广泛性和实际试验的高度技术性的特点。

数值分析的研究对象是从各学科的科学或工程问题抽象归纳出来的数学问题，是研究利用计算工具（即计算机）得出数学问题数值解的方法与算法的科学。现代科学与工程发展的一个重要标志是数学模型化，而运用数学工具求解实际问题的主要途径是通过数学模型化进行的。

1.1.1.2 数学模型

数学模型（Mathematical model）是实际科学与工程过程中各个变量之间定量关系的总称。数学模型的建立是各个学科的任务。它需要经过对实际过程的“去粗取精、去伪存真、由此及彼、由表及里”的分析，首先建立物理模型。对物理模型中的变量采用某种或某些衡算的手段找出其定量关系，而得到的若干数学表达式即为描述该过程的数学模型。它们可能是代数方程(组）与超越方程(组)、常微分方程(组)、偏微分方程(组）和积分方程(组)。

求解这些数学模型是数学学科的任务。数学分析只能求解其中的很少部分，其解称之为解析解（Analytical solution)，而大多数需要用数值解法，其解称之为数值解（Numerical solution)。利用计算机数值分析为这些问题的求解提供了方便、

快捷的方法。

早在 1671 年，著名的数学家莱布尼兹（Leibniz）说过："让一些杰出的人才像奴隶般的把时间浪费在计算上是不值得的"。现在他的这种把科学家从奴隶般的计算中解放出来的愿望由计算机与数值分析的结合而实现了。

1.1.1.3 模型化方法示例

下面仅举出圆柱形水箱给、排水问题说明数学模型化（Mathematical modeling）的方法。

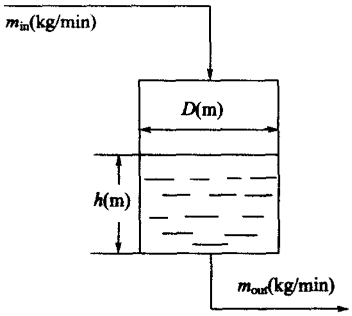

图 1.1 圆柱形水箱的给、排水问题

【例 1.1】 如图 1.1 所示的圆柱形水箱水位高度为 h(m)，直径为 D(m)，流入水量为 m_{in}(kg/min)，流出水量为 m_{out}(kg/min)。已知初始即 $t=0$ 时，$h=h_0$，求水位高度与时间的关系 $h(t)$。

解 ① 模型的建立 取时间微元 dt，经此时间间隔水位高度变化为 dh，对整个水箱进行物料衡算，有

$$\underbrace{m_{in}\,dt}_{\text{进入量}}=\underbrace{m_{out}\,dt}_{\text{流出量}}+\underbrace{\rho\frac{\pi}{4}D^2\,dh}_{\text{累积量}}$$

式中，ρ 为水的密度（kg/m^3）。整理后有

$$\begin{cases}\dfrac{dh}{dt}=\dfrac{4}{\rho\pi D^2}(m_{in}-m_{out})\\ h_{|t=0}=h_0\end{cases}$$

不难看出，这是常微分方程的初值问题。

② 模型的求解 当 m_{in} 和 m_{out} 为 t 的简单函数时，微分方程可用解析积分求解。如

$$m_{in}-m_{out}=\text{常数}$$

则解析解为
$$h(t)=h_0+\frac{4}{\rho\pi D^2}(m_{in}-m_{out})t$$

但当 m_{in} 和 m_{out} 与 t 有复杂的函数关系时，或 m_{in} 和 m_{out} 与 h 有复杂的函数关系时，解析解法可能不能求解，而要用数值法求出数值解。

1.1.2 数值分析的特点

数值分析有如下表象。

① 解的形式是数值的，故称之为数值方法（Numerical method）、数值分析。例如常微分方程的初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{dy}{dx}=f(x,y),\ x\in[x_0,x_n]\\ y(x_0)=y_0\end{cases}$$

其解析解为数学表达式 $y=y(x)$，而数值解为如下数值形式

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
y	y_0	y_1	y_2	$\cdots$	y_n

② 求解的方式是逐步逼近的（Successive approximation），故也曾称之为逼近方法（Approximation method）。

③ 求解手段是将连续函数离散化，即数值化。

④ 解的最终结果是近似解（Approximation solution），故也称为近似计算（Approximation calculation）。

数值分析的计算过程有如下特点。

① 规律性强，如果交给计算机，它就会照此规律进行运算。

② 运算要反复多次，不便于手工计算。

③ 解的最终形式和解的中间过程均以数值形式记录，记录的位数十分重要。

④ 近似解的精确程度与运算次数有关。

以上特点使数值方法的运算过程不利于手工进行，而应辅以计算工具——计算机来完成，故也称为计算数学（Computational mathematics）。

基于以上分析，借助于数值分析和计算机求解实际问题的步骤为：①建立数学模型；②选择数值分析方法或算法；③编制计算机程序；④上机计算。

要说明的是，目前用于科学计算的数学软件包已有多种，而且版本不断地更新。如由美国 Math works 公司开发的 Matlab 和 Wolfram Research 公司开发的 Mathematica 等软件包，它们均具有强大的数学运算能力。但对其的使用应在掌握了数值分析基础知识及实际应用能力的前提下才能有效的进行。而且对于特定的过程，自己编制的程序效率会更高，更为实用。本书中的计算机语言采用了易于学习、界面友好的 Qbasic 算法语言，在各实用的数值方法后附有编制好的模块内子程序及计算的例题以供读者练习。本课程的学习者应具备高等数学、线性代数和计算机语言的有关知识。

1.1.3 算法的基本概念

数值分析采用了计算机为其计算工具，但计算机本身只能机械地执行人的指令，它不会主动地思维，也没有任何创造性。因此在计算机解决实际问题之前，要进行程序设计，而在进行程序设计之前，应先进行算法的设计。算法是指求解数学问题的准确而完整的描述。

1.1.3.1 算法的一般特征

(1) 能行性（effectiveness）

算法的能行性包括两个方面：一是算法中的每一个步骤必须是能实现的。例如，在实数的范围内不允许出现一个负数的开平方运算；不允许出现分母为 0 的情况。二是算法执行的结果要能得到预期的目的。

(2) 确定性（definiteness）

算法的确定性，是指算法中的每一个步骤都必须是有明确定义的，不允许有模棱两可的解释，也不允许有多义性。

(3) 有穷性 (finiteness)

算法的有穷性是指算法应能在有限的时间内执行完，即算法应能在执行了有限步骤后终止。例如，算法遇到数学公式中的无穷级数，只能取其有限项进行计算。而且算法还应有合理的执行时间，执行时间过长的算法就失去了实用价值。

(4) 算法必须拥有足够的信息

通常，算法中的各种运算总是要施加到各运算对象上的，而这些对象又可能处于某种初始状态，这是算法执行的起点或依据。因此，算法执行的结果总是与初始数据有关，不同的输入会有不同的结果输出。

综上所述，所谓算法是一组严谨定义运算顺序的规则，每一个规则都是明确的且是有效的，整个顺序将在有限的次数下终止。

1.1.3.2 算法的复杂度 (Complexity) 和最优性 (Optimum)

(1) 算法的时间复杂度

所谓算法的时间复杂度，是指执行该算法的计算工作量，即算法的时间代价。算法的有穷性已包括了对时间复杂度的最低要求。在解决一个实际问题时，可能存在几种算法，需要的计算工作量也是不同的，我们希望计算工作量越小越好。衡量计算工作量的最简单而方便的方法是用同型号计算机的执行时间来度量。

(2) 算法的空间复杂度

一个算法的空间复杂度是指执行这个算法所需要的内存空间。这包括算法所处理的数据所占据的内存空间，算法程序所占据的内存空间以及算法在执行过程中所需要的额外空间。额外空间又包括算法程序执行过程中的工作单元和某种数据结构所需要的附加存储空间。

(3) 算法的最优性

对于一个实际问题来说，如果规定了算法所允许采用的运算类型，则所有可能的算法构成了一个解决该问题的算法类。如果在被考虑的算法类中，没有一个算法在最坏的情况下比现有算法执行更少的基本运算，则称现有算法在最坏情况下是最优的。同样，可以定义算法在平均情况下的最优性。

简而言之，求解一个问题，并达到给定的精度，需要的时间复杂度和空间复杂度均最小的算法是最优的。实际上找到一个最优算法是很困难的，可能花费的时间远远超过执行算法的时间。因此通常能找到较优的算法就可以了。

1.2 误差

科学与工程计算中，人们会遇到两类数值，一类是精确反映实际情况的，称为准确值，精确值 (Exact value) 或真值 (True value)。如精馏塔的板数为 30 块，数 30 即为准确值。另一类则不同，称为近似值 (Approximation value)。如测量某实验台的长度为 180cm，180 即为近似值。一个量的准确值与近似值的差称为误差 (Error)。数值分析求得的是数学模型的近似解，必然与真值存在误差，因此有必要了解近似值误差的范围。

1.2.1 误差的来源

产生误差的原因是多种多样的，主要可分为四类。

(1) 数学模型误差（Error of mathematical model）

前已述及，在建立数学模型的过程中，为简化起见，会忽略一些次要的影响因素，从而使建立的数学模型与实际过程存在一定差异，这就是数学模型误差。例如例 1.1 的问题中，如果水箱有微小的渗漏，建立模型时未加以考虑，求得的水位高度与实际高度就有微小的差别，且随时间的延长而增大。

(2) 观测误差（Observation error）

在数学模型中往往有若干参数或常数是靠观测得到的，例如例 1.1 中初始水位高度 h_0 即为观测而来的。观测值与真值之间的误差称为观测误差。观测误差与观测仪器及观测者有密切关系。另外有些不是得自实验的数据，也可能有不可避免的误差，如圆周率 π，只能用 3.14，3.14159 或更多位数表示，但无论如何也不能得到其精确值，因为 π 是个超越数（Transcendent number）。

(3) 截断误差（Truncation error）

在某些数学处理中用有限项代替无限项时，会产生截断误差，例如正弦函数的级数展开式为

$$\sin x=\frac{x}{1}-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^5}{5!}-\frac{x^7}{7!}+\cdots$$

若仅取前 4 项代替整个无穷项，即截去了第五项及以后的各项，所造成的误差即为截断误差。另外如 1.1.2 所述，数值计算方法是一种近似方法，一般只能得到模型的近似解，也称为截断误差。

(4) 舍入误差（Round-off error）

数值计算中，无论最终结果还是中间过程均以数值形式记录，而计算机记录数值的有效数字位数是有限的，单精度型仅为 7 位，双精度型也只有 15 位，对于超出的位数只能按四舍五入的规则（Symmetric rounding）记入有限位，这就造成了舍入误差。

显然，以上误差中前两类误差与数值方法并无关系，而后两类误差正是数值计算不可避免会产生的，也正是需要特别关注的问题之一。

1.2.2 误差的表示

误差有不同的表示方法，适用于不同的场合。这里主要介绍绝对误差、相对误差和有效数字。

(1) 绝对误差和绝对误差限

定义 1.1 设 x^* 是某量的准确值，x 是 x^* 的一个近似值，称

$$e=x^*-x \tag{1.1}$$

为近似值 x 的绝对误差（Absolute error），简称误差（Error）。

由于 x^* 通常是未知的，故 e 的数值一般也是不能求出的。例如例 1.1 中，如果使用最小刻度为 cm 的米尺，测量出水箱初始水位为 110.7cm，因 h_0 的准确值是未知的，110.7 的绝对误差也是无法求得的。为此引入绝对误差限的概念。

定义 1.2 称满足

$$|e| = |x^* - x| \leqslant \varepsilon \tag{1.2}$$

的正数 ε 为近似值 x 的绝对误差限（Bound of absolute error）。

在实际问题中，e 虽然难以求得，但 ε 一般容易确定。例如上例中使用最小刻度为 cm 的米尺，测量初始水位高度 h_0 的绝对误差限为 0.5cm。绝对误差限给出了 x^* 所在的范围，是判断误差的更为有效的判据。通常也将 ε 称为精度（Accuracy）。

（2）相对误差和相对误差限

绝对误差不能完善地反映近似值 x 的近似程度。例如两个量的准确值分别为 1000 和 10，近似值分别为 999 和 9，两者绝对误差相同，均为 1。但显然前者的近似程度较后者好得多。为了反映这种近似程度，引入了相对误差的概念。

定义 1.3 称

$$e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*} \tag{1.3}$$

为近似值 x 的相对误差（Relative error）。相对误差的数值越接近 0，则近似程度越高。比较前述两个量，其相对误差分别为 0.001 和 0.1。

与绝对误差类似，由于 x^* 通常是未知的，相对误差也不易确定，需引入相对误差限的概念。

定义 1.4 称满足

$$|e_r| = \left|\frac{x^* - x}{x^*}\right| = \left|\frac{e}{x^*}\right| \leqslant \varepsilon_r \tag{1.4}$$

的正数 ε_r 为 x 的相对误差限（Bound of relative error）。

由于分母的 x^* 也是未知的，常将其用 x 代替，即

$$|e_r| = \left|\frac{x^* - x}{x^*}\right| \approx \left|\frac{e}{x}\right| \leqslant \varepsilon_r \tag{1.5}$$

（3）有效数字

定义 1.5 设近似值 $x = \pm 10^k \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n$（这里 $a_1 \neq 0$，$a_2 \sim a_n$ 可为 $0,1,\cdots,9$），k 为整数，如果有

$$|e| = |x^* - x| \leqslant 0.5 \times 10^{k-n} \tag{1.6}$$

则称 x 为 x^* 的具有 n 位有效数字（Significant figure or digit）的近似值。显然，当 k 一定时，有效数字位数 n 越多，绝对误差越小。上式还表明，绝对误差限为末位有效数字的半个单位。

【例 1.2】 考虑 $\pi = 3.1415926\cdots$ 的两个近似值 $x_1 = 3.14$ 和 $x_2 = 3.1416$ 的有效数字和绝对误差限。

解 $x_1 = 0.314 \times 10^1$，$k = 1$，$n = 3$，3 位有效数字；

$x_2 = 0.31416 \times 10^1$，$k = 1$，$n = 5$，5 位有效数字。

$|\pi - x_1| = |3.1415926\cdots - 3.14| = 0.15926\cdots \times 10^{-2} \leqslant 0.5 \times 10^{-2}$

$|\pi - x_2| = |3.1415926\cdots - 3.1416| = 0.735\cdots \times 10^{-5} \leqslant 0.5 \times 10^{-4}$

1.2.3 误差的传递与算法的稳定性

1.2.3.1 四则运算中误差的传递

关于四则运算中误差的传递（Error propagation），特别要注意的是当两个相近的数相减和除数绝对值较小时误差的放大，下面分别给予讨论。

① 两个相近的数相减，会严重丢失有效数字位数，增大相对误差。这可通过相对误差的概念予以说明。设

$$y^* = x^* - A$$

x^*，A 为准确值，x,y 为近似值，假设 A 无误差，则 y 的相对误差

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

$$= \frac{x^* - x}{y} = \frac{x^* - x}{x - A} = \frac{e_x}{x - A}$$

从这个结果可以看出，当 x 的绝对误差 e_x 一定，x 与 A 接近时，分母减小，y 的相对误差增加，而相对误差的增加会减少有效数字位数。为了避免这种情况的发生，往往需要对含有减法运算的公式做适当的处理。下面举一些有关的变换的例子。

当 x_1 接近 x_2 时，　$\lg x_1 - \lg x_2 = \lg\left(\dfrac{x_1}{x_2}\right)$

当 x 接近于 0 时，　$\dfrac{1-\cos x}{\sin x} = \dfrac{\sin x}{1+\cos x}$

当 x 充分大时，　$\sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \dfrac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$

② 除数绝对值较小时，商的绝对误差会增大。假设

$$z^* = \frac{x^*}{y^*}$$

其中，x^*、y^* 的近似值分别为 x、y，则 z^* 的近似值为

$$z = \frac{x}{y}$$

由此可得到 z 的绝对误差为

$$e_z = z^* - z = \frac{x}{y} - \frac{x^*}{y^*} = \frac{xy^* - x^*y}{yy^*} = \frac{xy^* - x^*y^* - x^*y + x^*y^*}{yy^*}$$

$$= \frac{y^*(x - x^*) - x^*(y - y^*)}{yy^*} = \frac{y^*e_x - x^*e_y}{yy^*}$$

将分母的 y^* 用近似值 y 代替，则有

$$e_z \approx \frac{y^*e_x - x^*e_y}{y^2}$$

从此式可看出，两个数相除时，分母绝对值越小，商的绝对误差越大。

1.2.3.2 算法的稳定性

在数值运算过程中，初值的误差和运算过程的舍入误差在不同的计算途径中的传递是不同的，对计算结果的影响也不同，这就是算法的稳定性（Stability）问

题。下面举例说明。

【例 1.3】 计算下列积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x, n = 0,1,\cdots,20 \tag{1.7}$$

为了便于计算，对以上积分做如下变换。由式(1.7) 可得

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

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

且有 $$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5}\mathrm{d}x = \ln(6/5) = 0.1813216$$

如此可得到如下递推公式

$$I_0 = 0.1813216$$

$$I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1},\ n = 1,2,\cdots,20 \tag{1.8}$$

对此递推算法，可编程上机计算，用 Qbasic 单精度型计算得到表 1.1 所列结果。

表 1.1 例 1.3 用式(1.8) 计算的结果

n	I_n	n	I_n	n	I_n
0	0.1823216	7	1.839031×10^{-2}	14	222.0667
1	8.839203×10^{-2}	8	3.304847×10^{-2}	15	−1110.267
2	5.803983×10^{-2}	9	-5.413125×10^{-2}	16	5551.396
3	4.313410×10^{-2}	10	0.3706563	17	−27756.92
4	3.432907×10^{-2}	11	−1.762372	18	138784.7
5	2.865466×10^{-2}	12	8.895195	19	−693923.3
6	2.489337×10^{-2}	13	−44.39905	20	3469617

根据被积函数的性质，有

$$0 < I_n < I_{n-1}$$

即 $$0 < I_{20} < I_{19} < \cdots < I_2 < I_1 < I_0$$

但表 1.1 中数据从 I_8 开始，不仅有正有负，而且绝对值随着 n 的增加而迅速增加，无疑是错误的结果。下面改用由 I_{20} 向 n 减少的方向递推。首先要估算 I_{20} 的值。

因为 $$I_n < I_{n-1}$$

所以 $$5I_{n-1} < I_n + 5I_{n-1} < 6I_{n-1}$$

又因为

$$I_n + 5I_{n-1} = \frac{1}{n}$$

所以 $$5I_{n-1} < \frac{1}{n} < 6I_{n-1}$$

即 $$\frac{1}{6n} < I_{n-1} < \frac{1}{5n}$$

取$\frac{1}{6\times21}$与$\frac{1}{5\times21}$的平均值为I_{20}的近似值，即

$$I_{20}\approx\frac{1}{2}\left(\frac{1}{6\times21}+\frac{1}{5\times21}\right)=8.730159\times10^{-3}$$

则新的沿 n 减少的方向进行的递推公式为

$$\begin{aligned}&I_{20}=8.730159\times10^{-3}\\&I_{n-1}=\frac{1}{5n}-\frac{1}{5}I_n,n=20,19,\cdots,1\end{aligned}\tag{1.9}$$

上机计算的结果见表 1.2，结果是正确的。

表 1.2 例 1.3 用式(1.9) 计算的结果

n	$I_n\times10^3$	n	$I_n\times10^2$	n	$I_n\times10^2$
20	8.730159	13	1.203987	6	2.432491
19	8.253968	12	1.297664	5	2.846835
18	8.875522	11	1.407134	4	3.430633
17	9.336007	10	1.536755	3	4.313873
16	9.897505	9	1.692649	2	5.803892
15	10.52052	8	1.883692	1	8.839221
14	11.22923	7	2.123261	0	0.1823216

从同一递推公式，只是沿不同的方向得到的结果为什么有如此大的差别呢？原因如下。

对于式(1.8)，如果 I_0 的误差为 e_0，则 I_1 的误差为 $-5e_0$，I_2 的误差放大到 $(-5)^2e_0$，I_n 的误差为 $(-5)^ne_0$，误差呈指数增加。而对于式(1.9)，I_{20}的误差若为 e_{20}，则 I_{19}的误差为 $(-1/5)e_{20}$，至 I_n 为 $(-1/5)^{20-n}e_{20}$，至 I_0 时为 $(-1/5)^ne_{20}$，误差就微乎其微了。

如 1.2.1 所讨论的，在实际过程中参与运算的各种数一般都带有一定的误差，这些误差或者是初值本身就有的固有误差，如观测误差、估算误差，或者受计算机有效数字位数限制而造成的舍入误差。这些误差（也称为摄动 Perturbation）均会随运算过程进行而不断地传播下去，对后面的结果产生一定的影响。所谓稳定性问题，就是指误差的传播或积累是否受到控制的问题。如果计算结果对初始数据的误差及运算过程的舍入误差不敏感，则可认为相应的算法是稳定的，否则就是不稳定的。在例 1.3 中由递推公式(1.8) 所确定的算法是不稳定的，而由递推公式(1.9) 所确定的算法是稳定的。因此在确定一个算法时，必须考虑算法的稳定性问题。

1.3 泰勒级数

定义 1.6 若函数 $f(x)$ 在 x_0 的某个邻域内 $n+1$ 阶的导数存在，则在这个邻域内

$$f(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2+\cdots+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0)(x-x_0)^n+R_n(x)\tag{1.10}$$

其中
$$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1}, \xi\in[x,x_0] \tag{1.11}$$
将式(1.10)称作函数 $f(x)$ 在 x_0 处的泰勒级数（Taylor series）展开式，$R_n(x)$ 是余项。

显然，用式(1.10)等号右边的 $n+1$ 项代替 $f(x)$ 所带来的截断误差为 $R_n(x)$，其误差限为 ε，有
$$|R_n(x)|\leqslant\varepsilon=\frac{1}{(n+1)!}\max_{\theta\in[x_0,x]}|f^{(n+1)}(\theta)||(x-x_0)^{n+1}| \tag{1.12}$$
数值分析中常常遇到采用泰勒级数的前 $n+1$ 项近似函数 $f(x)$ 的情况。如果仅取前两项，则
$$f(x)\approx f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)$$
也就是用线性函数近似非线性函数。

对于二元函数 $f(x,y)$ 在 (x_0,y_0) 处进行泰勒级数展开，有
$$\begin{aligned}f(x,y)=&f(x_0,y_0)+\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\Big|_{x_0,y_0}(x-x_0)+\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\Big|_{x_0,y_0}(y-y_0)+\\&\frac{\partial f^2(x,y)}{\partial x^2}\Big|_{x_0,y_0}(x-x_0)^2+\frac{\partial f^2(x,y)}{\partial y^2}\Big|_{x_0,y_0}(y-y_0)^2+\\&\frac{\partial f^2(x,y)}{\partial x\partial y}\Big|_{x_0,y_0}(x-x_0)(y-y_0)+\cdots\end{aligned} \tag{1.13}$$
对于常微分方程的初值问题
$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=f(x,y)\\ y(x_0)=y_0\end{cases}$$
其解为 $y=y(x)$，则函数 $y(x)$ 在 x_0 处的泰勒级数展开式为
$$\begin{aligned}y(x)&=y(x_0)+hy'(x_0)+\frac{1}{2}h^2y''(x_0)+\frac{1}{6}h^3y'''(x_0)+O(h^4)\\&=y_0+hf(x_0,y_0)+\frac{1}{2}h^2f'(x_0,y_0)+\frac{1}{6}h^3y'''(x_0)+O(h^4)\\&=y_0+hf+\frac{1}{2}h^2\left[\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}+\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}f(x,y)\right]\Big|_{x_0,y_0}+\\&\quad\frac{1}{6}h^3\left[\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}+\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}f(x,y)\right]'\Big|_{x_0,y_0}+O(h^4)\\&=y_0+hf+\frac{1}{2}h^2(f_x+ff_y)+\frac{1}{6}h^3(f_{xx}+2ff_{xy}+f^2f_{yy}+f_xf_y+ff_y^2)+O(h^4)\end{aligned} \tag{1.14}$$
这里
$$h=x-x_0$$
$$f=f(x_0,y_0),\qquad f_x=\frac{\partial f(x_0,y_0)}{\partial x},\qquad f_{xx}=\frac{\partial^2 f(x_0,y_0)}{\partial x^2}$$
$$f_{xy}=\frac{\partial^2 f(x_0,y_0)}{\partial x\partial y},\ f_y=\frac{\partial f(x_0,y_0)}{\partial y},\qquad f_{yy}=\frac{\partial^2 f(x_0,y_0)}{\partial y^2}$$