信息与计算科学教学丛书

数值计算方法

涂俐兰　李德宜　主编

科 学 出 版 社

信息与计算科学教学丛书

数值计算方法

涂俐兰　李德宜　主编

科学出版社

北　京

内容简介

本书尝试将算法的理论分析、实验、案例三者综合起来. 内容包括绪论、非线性方程(组)的数值解法、线性方程组的直接法和迭代法、插值法、函数逼近、数值积分、常微分方程的数值解法、矩阵特征值计算. 本书突出了基本知识点和经典的算法分析. 在理论内容上有所减少，力求基本算法理论叙述简单明了.

从算法实现上看，本书凸显了实验的重要性；从案例分析来看，本书特别注重理论联系实际，挑选了不同学科的案例进行分析和求解.

本书可作为高等学校理工科研究生教材，也可作为数学系和工科本科生教材.

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/涂俐兰，李德宜主编. —北京：科学出版社，2016.6

(信息与计算科学教学丛书)

ISBN 978-7-03-049351-4

Ⅰ.①数… Ⅱ.①涂… ②李… Ⅲ.①数值计算－计算方法 Ⅳ.②O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 152183 号

责任编辑：王雨舸/责任校对：董艳辉

责任印制：彭　超/封面设计：苏　波

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100717

http://www.sciencep.com

湖北卓冠印务有限公司印刷

科学出版社发行　各地新华书店经销

*

开本：787×1092　1/16

2016 年 6 月第　一　版　印张：15

2016 年 6 月第一次印刷　字数：350 000

定价：33.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

前　言

数值计算方法是计算数学的一个主要部分，它研究用计算机求解各种数学问题的数值计算方法及其理论. 随着计算机技术的不断发展和普及，越来越多的问题靠数学解析解已经远远不能够满足要求，数值解在解决实际问题中的地位显得日益重要，因此，数值计算方法这门课程就得到了越来越多的重视. 目前，理论、实验、计算已经成为科学计算活动的三大方法，对从事工程与科技工作的人员，学习和掌握数值计算方法是非常必要的.

本书在研究生院的大力支持下，作者根据十多年的本科生和研究生教学实践中归纳出的讲义发展而成. 本书广泛吸取国内外一些相关书籍之所长，力求将教学内容与科学研究思想融为一体.

目前，数值计算方法相关书籍种类繁多，从内容编排上主要分为 4 类：①侧重于算法的理论分析；②侧重于算法的实现；③前面两者皆有，但缺少案例分析；④专门介绍案例分析. 本书试着把算法的理论分析、实验、案例三者综合起来. 基于此，本书主要有以下几个方面的特点.

从内容上看，本书覆盖了数值计算方法的所有基本理论知识. 包括引论、非线性方程(组)的数值求解、线性方程组的直接法和迭代法、插值法、函数逼近、数值积分、常微分方程的数值解、矩阵特征值计算. 作者编写本书的目的是，读者通过该课程的学习，掌握各种算法的理论，并由这些理论得出适合具体要求的算法，以及解决实际问题中满足各种要求的数值解，从而提高读者的实际应用能力. 由于本书要把算法的理论分析、实验、案例三者综合起来，这样，书中内容相对比较多. 为了防止内容过长而显得拖拉，本书精简了一部分内容，突出了基本知识点和经典的算法分析. 与其他教材相比，本书在理论内容上会有所减少，力求基本算法理论叙述简单、明了.

在算法实现方面，本书凸显了实验的重要性. 数值计算方法离不开应用计算机进行计算，免不了要和程序打交道，这也是数值计算方法的核心内容. 由于数值计算方法的通用软件是 MATLAB，所以在附录 B 中介绍了 MATLAB 中的基本命令，以便于读者查找. 同时，基于 MATLAB，本书对各章重要的算法都提供了对应的实验题，根据这些实验题，读者能够更好地加深对所学算法的理解，并能实际应用.

从案例分析来看，本书特别注重理论联系实际. 数值计算方法的最终目标是解决实际问题. 作者在多年的教学中发现，学生学习该课程很容易与实际脱钩. 基础知识都能够熟练掌握，可是一碰到实际问题，却无从下手. 为了让读者更容易理解和掌握，让本书更具有可读性、可操作性，本书挑选了不同学科的案例进行分析和求解. 由于实际案例分析都比较长，因此，本书把案例分析都放在附录 A 中，读者可以根据自己的需要阅读.

特别地，为了让本书有更好的导向，书末附有参考文献. 因为本书更倾向于介绍数值计算方法中基本的知识点，很多深层次的内容没有介绍. 通过参考文献，读者可以很方便地查

找阅读文献，扩充知识面.

本书可作为高等学校理工科研究生的专用教材，也可作为数学系本科生教材. 如果学时较少，可适当删减书中某些章节内容和一些理论. 本书的各章虽具有一定的联系，但总的说来相对独立，适当删减并不影响本书的系统性. 本书也可作为科技工作者的参考书. 学习本书需要具备微积分、常微分方程和线性代数的基础知识.

本书由涂俐兰和李德宜统筹编排、统稿和定稿. 第 1 章、第 2 章、第 6 章和附录 A 由涂俐兰编写；第 4 章、第 7 章和第 8 章由徐树立编写；第 3 章由余长春编写；第 5 章和第 9 章由王文波编写；附录 B 由涂俐兰、徐树立、余长春、王文波共同编写.

本书获得学校研究生教材专项基金资助，学校研究生院对本书编写非常重视，始终给予大力的支持和鼓励. 在本书编写的中期，还组织大家详细地分析、比较内容的取舍，并给出很多建议和意见，在此，编者表示衷心的感谢.

限于作者的水平，本书难免有疏漏和不当之处，恳请读者和专家们指正.

作　者

2016 年 3 月

目　　录

第 1 章　绪　　论

1.1　数值计算方法的研究内容与特点

众所周知，用计算机求解科学技术问题通常需经历以下步骤：

根据实际问题建立数学模型 ⇒ 设计合适的数值计算方法 ⇒ 编制程序求出结果

通常，建立数学模型是应用数学的任务，而设计算法和编程实现却是数值计算方法的任务. 数值计算方法是计算数学科学的一个分支，它研究用计算机求解各种数学问题的数值计算方法及其理论与软件实现. 因此，数值计算方法是以数学问题为研究对象，只是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算法及其理论. 它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，又有应用广泛性与实际试验高度技术性的特点，是一门与计算机使用密切结合，实用性很强的数学课程. 在本书中，涉及的数学问题包括非线性方程的求解、线性代数问题（方程组和特征值问题）、逼近问题（函数的插值、逼近以及数值积分）、常微分方程问题.

数值计算方法的目的是用简单的算术运算求解复杂的数值问题，并开发和评估数值结果的方法，这些计算方法称为算法. 一个面向计算机，有可靠理论分析且计算复杂性好的算法就是一个好算法. 在本书中，理论分析主要是通过离散化、逼近、插值、迭代等方法求得原数学问题的近似解，也即数值解. 在求解的同时还包括误差分析、稳定性、收敛性等基本概念，它们刻画了算法的可靠性、准确性. 在设计算法的过程中，不能忽视的一个问题就是计算复杂性，它包含计算时间的复杂性与存储空间的复杂性两个方面. 在同一规模、同一精度条件下，计算时间少的算法为计算时间复杂性好，而占用存储空间少的算法为空间复杂性好.

综上所述，数值计算方法这门课程的主要内容是研究使用计算机求解各种数学问题的数值方法，对求得的解的精度进行评估，并且探讨如何在计算机上实现求解等. 而且，设计出来的数值方法应具有以下几个特点：

（1）算法要能面向计算机，要根据计算机的特点提供切实可行的有效算法.

（2）算法要有可靠的理论分析，要保证收敛性和数值稳定性，并能任意逼近并达到精确要求.

（3）算法要有好的时间复杂性和空间复杂性.

（4）算法要有数值实验，不能只是纸上谈兵，要通过数值试验证明是行之有效的.

因此，根据“数值计算方法”课程的特点，本书在编写时注重强调各种数学问题的解决方法的基本原理和思想，并强调与计算机的结合，重视误差分析、收敛性及稳定性的评估，同时，几乎对每种方法都列举了例子和实验，以便读者更好地掌握.

1.2 误　　差

1.2.1 误差来源与分类

设 x 表示一个实际问题的精确解，x^* 表示在计算机上用某种数值计算方法求得的数值解．这里，精确解的含义是指理论意义上的一个客观量．精确解 x 和数值解 x^* 之间的误差来源于以下四个方面．

1）模型误差

实际问题与数学模型之间出现的误差称为模型误差．在用计算机解决科学计算问题之前要建立数学模型，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，即存在误差．由于模型误差很难用数量表示，通常都假定数学模型是合理的，也就是说，这种误差一般都可忽略不计，在本书中也不予讨论．

2）观测误差

在数学模型确定以后，通常会通过测量、实验等方法得到模型参数的取值，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．同样地，在本书中也不讨论这种误差．

3）截断误差（或方法误差）

当数学模型建立以后，不能得到精确解时，通常要用数值方法求它的数值解，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，要计算 $\sin x$ 在某点的函数值．一般是用它的 $n(n=2k+1)$ 次 Taylor（泰勒）多项式

$$P_n(x)=x-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^5}{5!}-\cdots+(-1)^k\frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!}$$

近似代替 $\sin x$ 来求解在某点的函数，而且它的截断误差为

$$|R_n(x)|=|\sin x-P_n(x)|=\left|\frac{\sin\left[\xi+\frac{(n+1)\pi}{2}\right]}{(n+1)!}x^{n+1}\right|\leqslant\frac{|x|^{n+1}}{(n+1)!},\quad \xi\text{ 在 }0\text{ 和 }x\text{ 之间}$$

4）舍入误差

有了数值方法以后，在用计算机实现时，由于计算机的字长有限或者十进制数转化为二进制的影响，输入数据和输出数据都可能产生误差，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

$$R=3.14159-\pi=-0.0000026\cdots$$

就是舍入误差．

本书探讨的是数学问题的数值解，所以对误差进行分析是非常重要的一个问题. 本书主要讨论数值方法的截断误差与舍入误差. 特别地，到目前为止舍入误差的定量估计尚无有效的分析方法，为确保数值计算的正确性通常只进行定性分析. 下面我们介绍误差的基本概念.

1.2.2 误差

定义 1.1 设 x 为准确值，x^* 为 x 的一个近似值，称 x^*-x 为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差，记为 e^* 或者 $e^*(x^*)$.

由于准确值 x 通常未知，误差 e^* 的准确值一般也计算不出来，为此，引入误差限来对误差进行估计.

定义 1.2 称满足 $|e^*|=|x^*-x|\leqslant\varepsilon^*$ 的正数 ε^* 为近似值 x^* 的绝对误差限.

一般地，若 $|x^*-x|\leqslant\varepsilon^*$，即

$$x^*-\varepsilon^*\leqslant x\leqslant x^*+\varepsilon^* \tag{1.1}$$

这个不等式有时也表示为 $x=x^*\pm\varepsilon^*$. 于是，虽然不知道准确值 x 具体等于多少，但是根据上式，仍然可以知道 x 的大致范围. 例如，用毫米刻度的米尺测量一个长度 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 mm，于是 $|x^*-x|\leqslant 0.5$ mm，准确值 $x=x^*\pm 0.5$.

误差限是误差绝对值的上界，显然，误差限不唯一，并且误差限越小，近似值越精确. 由于合适的误差限一般求不出来，实用中可以根据问题的特点选择合适的误差限即可. 通常，误差限取为获得该近似值仪器精度的半个单位.

绝对误差和误差限的大小都不能完全表示近似值的近似程度. 例如，有两个变量

$$x=8.203\pm1.001,\quad y=1000.112\pm1.001$$

则 $\varepsilon_x^*=\varepsilon_y^*=1.001$. 虽然 ε_y^* 和 ε_x^* 相等，但 $\dfrac{\varepsilon_y^*}{y^*}=\dfrac{1.001}{1\,000.112}=0.1\%$ 比 $\dfrac{\varepsilon_x^*}{x^*}=\dfrac{1.001}{8.203}=12.2\%$ 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，在做误差分析的时候，除考虑误差的大小外，还应考虑准确值 x 的大小.

定义 1.3 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，记为 e_r^*.

相对误差的绝对值越小，近似程度越高. 所以前面的例子中，y^* 的近似程度要比 x^* 的近似程度高得多. 但是，在实际计算中，由于准确值 x 总是不知道的，通常用近似值 x^* 来代替 x 计算相对误差，即用

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

作为 x^* 的相对误差. 在这里，必须满足条件：$e_r^*=\dfrac{e^*}{x^*}$ 较小. 因为

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

是 e_r^* 的平方项级，故可忽略不计.

定义 1.4 称满足 $e_r^* = \left|\frac{x^* - x}{x^*}\right| \leqslant \varepsilon_r^*$ 的正数 ε_r^* 为 x^* 的相对误差限，记为 ε_r^*.

根据定义 1.4，上例中 $\frac{\varepsilon_y^*}{y^*} = \frac{1.001}{1\,000.112} = 0.1\%$ 与 $\frac{\varepsilon_x^*}{x^*} = \frac{1.001}{8.203} = 12.2\%$ 分别为 y 与 x 的相对误差限，可见相对误差限能更好地反映两个数据的近似程度.

1.2.3 有效数字

在对实际的数值计算方法做误差分析时，除了可以用前面所述的绝对误差、相对误差以及它们的误差限来表征，还可以用有效数字来表示准确值和近似值之间的近似程度.

定义 1.5 若近似值 x^* 的误差限是其某一位的半个单位，就说近似值 x^* 准确到该位；由该位自右向左数到 x^* 的第一位非零数字若有 n 位，就说 x^* 有 n 位有效数字.

例如，对 $x = 3.141\,592\,6\cdots$，分别取近似值 $x_1^* = 3.14$ 和 $x_2^* = 3.141\,6$，且有误差估计

$$|e(x_1^*)| = |\pi - x_1^*| = |0.0015926\cdots| \leqslant 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

$$|e(x_2^*)| = |\pi - x_2^*| = |-0.0000073\cdots| \leqslant 0.00005 = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

按照定义 1.5 可判别：x_1^* 有三位有效数字，而 x_2^* 有五位有效数字.

上述定义相对来说比较抽象，以下是有效数字的另一种表述.

定义 1.6 若 x 的近似值 x^* 可表为

$$x^* = \pm 10^m \times (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}) \tag{1.2}$$

其中 a_i $(i=1,2,\cdots,n)$ 是 0 到 9 中的一个数字，$a_1 \neq 0$，m 为整数，且

$$|x - x^*| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1} \tag{1.3}$$

则称 x^* 有 n 位有效数字.

例 1.1 仍然以上述 $x = 3.141\,592\,6\cdots$ 为例，若有近似值 $x_1^* = 3.14$ 和 $x_2^* = 3.141\,5$，求 x_1^* 和 x_2^* 的有效数字.

解 对于 $x_1^* = 3.14 = 3.14 \times 10^0$，且 $m=0$，再由

$$|e(x_1^*)| = |\pi - x_1^*| = |0.0015926\cdots| = 0.15926 \times 10^{-2} \leqslant 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

根据(1.3)式，有 $m-n+1 = -2 \Rightarrow n=3$，即 x_1^* 有三位有效数字.

对于 $x_2^* = 3.141\,5 = 3.141\,5 \times 10^0$，有 $m=0$，再由

$$|e(x_2^*)| = |\pi - x_2^*| = |-0.000\,092\,6\cdots| \leqslant 0.000\,5 = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

根据(1.3)式，有 $m-n+1 = -3 \Rightarrow n=4$，即 x_2^* 有四位有效数字.

例 1.2 如果以米/秒^2 $(\mathrm{m/s^2})$ 为单位，重力常量 $g \approx 9.80\ \mathrm{m/s^2}$. 若以 $\mathrm{km/s^2}$ 为单位，$g \approx 0.009\,80\ \mathrm{km/s^2}$，它们都具有 3 位有效数字. 按第一种写法，根据(1.3)式，这里 $m=0$，$n=3$

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

按第二种写法，$m=-3$，$n=3$

$$|g-0.00980|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-5}$$

这里，虽然它们的写法不同，但都具有三位有效数字. 至于绝对误差限，由于单位不同结果也不同，

$$\varepsilon_1^*=\frac{1}{2}\times10^{-2}\ \mathrm{m/s^2},\quad \varepsilon_2^*=\frac{1}{2}\times10^{-5}\ \mathrm{km/s^2}$$

但是相对误差相同，因为

$$\varepsilon_r^*=0.005/9.80=0.000\,005/0.009\,80$$

定义 1.6 描述了有效数字和绝对误差限之间的关系，那么对于有效数字与相对误差限的关系，有下面的定理 1.1.

定理 1.1 设近似值 x^* 可表示为

$$x^*=\pm10^m\times(a_1+a_2\times10^{-1}+\cdots+a_l\times10^{-(l-1)})\tag{1.4}$$

其中，a_i $(i=1,2,\cdots,l)$是 0 到 9 中的一个数字，$a_1\neq0$，m 为整数，若 x^* 具有 n 位有效数字，则其相对误差限

$$\varepsilon_r^*\leqslant\frac{1}{2a_1}\times10^{-(n-1)}\tag{1.5}$$

反之，若 x^* 的相对误差限

$$\varepsilon_r^*\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{-(n-1)}\tag{1.6}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证明 当 x^* 具有 n 位有效数字时

$$\varepsilon_r^*=\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leqslant\frac{0.5\times10^{m-n+1}}{a_1\times10^m}=\frac{1}{2a_1}\times10^{-n+1}$$

反之，由

$$|x-x^*|=|x^*|\varepsilon_r^*<(a_1+1)\times10^m\times\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{-n+1}=0.5\times10^{m-n+1}$$

故 x^* 至少具有 n 位有效数字. □

关于有效数字与误差，要注意以下几个地方：

(1) 用四舍五入的方法取精确值的前 n 位作为近似值，则 x^* 必有 n 位有效数字.

(2) 有效数字位数相同的两个近似值，绝对误差限不一定相同.

(3) 相对误差与相对误差限都是无量纲的，而绝对误差与绝对误差限是有量纲的.

(4) 如无特别声明，科技文本的数字、实验报告的数字以及媒体公布的统计数字，对于作者与读者，均认为是有效数字. 至于准确值，被认为是具有无穷位有效数字.

(5) 有效位数与小数点后有多少位数无关.

(6) 从(1.3)式可得到具有 n 位有效数字的近似数 x^*，其绝对值误差限为

$$\varepsilon^*=\frac{1}{2}\times10^{m-n+1}$$

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，近似值的精度越高.

(7) 定理 1.1 说明，有效位数越多，相对误差限越小.

例 1.3 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.

解 设要取 n 位有效数字，由定理 1.1，相对误差限

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

由于 $\sqrt{20}=4.4\cdots$，知 $a_1=4$，故只要取 $n=4$，就有

$$\varepsilon_r^* \leqslant 0.125 \times 10^{-3} < 10^{-3} = 0.1\%$$

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%. 此时由开方表可取 $\sqrt{20} \approx 4.472$.

1.2.4 数值计算的误差分析

在计算机算法中，数值计算本质上是加、减、乘、除四则运算，带有误差的近似值经过四则运算后，误差也会随着有变化，而且也满足一定的运算规律. 设两个近似值 x_1^* 与 x_2^* 的误差限分别为 $\varepsilon(x_1^*)$ 及 $\varepsilon(x_2^*)$，则对它们进行四则运算得到的误差限分别满足以下不等式

$$\begin{aligned}
&\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) \approx \varepsilon(x_1^*) + \varepsilon(x_2^*) \\
&\varepsilon(x_1^* x_2^*) \approx |x_1^*|\varepsilon(x_2^*) + |x_2^*|\varepsilon(x_1^*) \\
&\varepsilon\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) \approx \frac{|x_1^*|\varepsilon(x_2^*) + |x_2^*|\varepsilon(x_1^*)}{|x_2^*|^2}, \quad x_2^* \neq 0
\end{aligned} \tag{1.7}$$

更一般地，当自变量有误差限时，需要分析函数值所产生的误差. 例如，计算一元函数 $f(x)$在 x 处的值时，往往用 x 的近似值为 x^* 计算出 $f(x)$的近似值 $f(x^*)$. 要分析近似值 $f(x^*)$的误差，可设其绝对误差为 $e(f(x^*))$，误差限为 $\varepsilon(f(x^*))$，若 $f(x)$在 x^* 的领域内二阶连续可微，由 Taylor 展开

$$-e(f(x^*)) = f(x) - f(x^*) = f'(x^*)(x-x^*) + \frac{f''(\xi)}{2}(x-x^*)^2, \quad \xi \text{ 介于 } x, x^* \text{ 之间}$$

取绝对值，得

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

当 $f'(x^*) \neq 0$，假定$\left|\dfrac{f'(x^*)}{f''(x^*)}\right|$不太大，则可忽略 $\varepsilon(x^*)$的高阶项，于是可得计算函数的绝对误差和误差限分别为

$$e(f(x^*)) \approx f'(x^*)e(x^*), \quad \varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)|\varepsilon(x^*)$$

同理，当 f 为多元函数时，例如，计算函数值 $y=f(x_1, x_2)$. 如果 x_1, x_2 的近似值为 x_1^*，x_2^*，则 y 的近似值为 $y^*=f(x_1^*, x_2^*)$. 于是由二元函数的 Taylor 展开式，得函数值 y^* 的误差 $e(y^*)$为

$$e(y^*) = y^* - y = f(x_1^*, x_2^*) - f(x_1, x_2) \approx \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_1}e(x_1^*) + \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_2}e(x_2^*) \tag{1.8}$$

于是误差限

$$\varepsilon(y^*) \approx \left|\frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_1}\right|\varepsilon(x_1^*) + \left|\frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_2}\right|\varepsilon(x_2^*) \tag{1.9}$$

例 1.4 设有一长方体水池，测得其长、宽、深分别为 50 m±0.01 m，25 m±0.01 m， 20 m±0.01 m. 试求该水池的容积,并给出绝对误差限和相对误差限.

解 令 x,y,z 分别表示长方体水池的长、宽和深,令 V 表示长方体水池的容积,有 $V=xyz$. 由题意,近似值和误差限分别为

$$x^*=50,\quad y^*=25,\quad z^*=20,\quad \varepsilon(x^*)=\varepsilon(y^*)=\varepsilon(z^*)=0.01$$

所以,所求的容积的近似值为

$$V^*=x^*y^*z^*=2\,500(\mathrm{m}^3)$$

又因为

$$\begin{aligned}e(V^*)&\approx\frac{\partial V}{\partial x}e(x^*)+\frac{\partial V}{\partial y}e(y^*)+\frac{\partial V}{\partial z}e(z^*)\\&\approx y^*z^*e(x^*)+x^*z^*e(y^*)+x^*y^*e(z^*)\end{aligned}$$

所以,绝对误差限

$$\begin{aligned}\varepsilon(V^*)&\approx\frac{\partial V}{\partial x}\varepsilon(x^*)+\frac{\partial V}{\partial y}\varepsilon(y^*)+\frac{\partial V}{\partial z}\varepsilon(z^*)\\&\approx y^*z^*\varepsilon(x^*)+x^*z^*\varepsilon(y^*)+x^*y^*\varepsilon(z^*)\\&=25\times20\times0.01+50\times20\times0.01+50\times25\times0.01\\&=27.50(\mathrm{m}^3)\end{aligned}$$

且相对误差限

$$\varepsilon_r(V^*)=\frac{\varepsilon(V^*)}{V^*}\approx\frac{27.50}{2\,500}\approx0.11\%$$

1.3 数值稳定性与避免误差危害

数值运算中的误差分析是个很重要而复杂的问题,由前所述,可知数值计算方法的目标是求出可靠的高精度的数值解. 求解结果是否可靠,或者说,输出数据精度是否高,是由多方面的原因造成的. 它可能是问题本身的结构不合理,使得不论使用哪种方法,输出数据对输入数据的扰动总是非常敏感;也可能是算法设计有问题,使得算法的执行对输入数据误差和计算过程中的舍入误差产生严重的积累. 为了更好地做误差分析,对于前者,本节引入"病态问题"和"条件数"的概念,后者,我们介绍"算法数值稳定性",最后,给出避免误差危害的几个原则.

1.3.1 条件数和病态问题

定义 1.7 计算函数值 $f(x)$时,若 x 有扰动(即误差)$\Delta x=x-x^*$,x^* 的相对误差为 $\frac{\Delta x}{x}$,函数值 $f(x^*)$的相对误差为$\frac{f(x)-f(x^*)}{f(x)}$,则称因变量相对误差与自变量的相对误差的比值

$$\frac{|f(x)-f(x^*)/f(x)|}{|\Delta x/x|}\approx\left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right| \tag{1.10}$$

为计算函数值问题的**条件数**,并记为 C 或者 Cond.

自变量相对误差一般不会太大,如果条件数 C_p 很大,将引起函数值相对误差很大,出

现这种情况的问题就是病态问题.

定义 1.8 对一个数值问题自身,如果输入数据(初始数据)有微小扰动,引起输出数据(即问题解)相对误差很大,这个数值问题就称为**病态问题**. 病态问题也称为**坏条件**问题.

一般情况下,条件数 Cond≥10 就认为是病态,Cond 越大病态越严重.

例 1.5 求解线性方程数组

$$\begin{cases} x+\alpha y=1 \\ \alpha x+\ \ y=0 \end{cases} \tag{1.11}$$

解 由题意,发现:当 $\alpha=1$ 时,系数行列式为零,方程无解;但当 $\alpha\neq1$ 时,解为

$$x=\frac{1}{1-\alpha^2},\quad y=-\frac{\alpha}{1-\alpha^2}$$

假设 $\alpha\approx1$,且输入数据 α 有微小扰动,则解的误差很大. 譬如,取 $\alpha=0.99$,则解为 $x\approx50.25$;如果 α 的误差取 0.001,即 $\alpha^*\approx0.991$,则解为 $x^*\approx55.81$. 误差 $|x^*-x|\approx5.56$ 很大,表明此时线性方程组(1.11)是病态的. 实际上,根据(1.10)式和函数 $x=\dfrac{1}{1-\alpha^2}$,可求得条件数

$$\text{Cond}=\left|\frac{\alpha x'(\alpha)}{x(\alpha)}\right|_{\alpha=0.99}=\left|\frac{2\alpha^2}{1-\alpha^2}\right|_{\alpha=0.99}\approx100$$

表明条件数很大,故问题是病态的.

因为实际问题的数据都是近似的或经过计算机做了舍入处理的,这都会引起原始数据或输入数据的扰动. 若所求解的问题正好是病态问题,则采用通常算法计算就会出现很隐蔽的错误,导致不良后果. 因此,在做科学计算时,要特别注意所求问题是否为病态问题. 而且,病态问题不是计算方法引起的,是数值问题自身固有的,因此,对数值问题首先要分清问题是否病态. 若为病态问题,就必须采取相应的特殊方法以减少误差危害.

1.3.2 算法的数值稳定性

定义 1.9 一个算法如果输入数据有误差,而在计算过程中舍入误差不增长,则称此算法是**数值稳定**的;否则称此算法为**不稳定**的.

例 1.6 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 由分部积分法可得递推公式

$$\begin{cases} I_n=1-nI_{n-1}, \quad n=1,2,\cdots \\ I_0=1-\mathrm{e}^{-x} \end{cases} \tag{1.12}$$

对上式,先求出 I_0,再逐次求出 $I_1,I_2,\cdots$的值. 要计算 I_0 就要先计算 e^{-1},若用 e^{-1}的 Taylor 展开式中的前 8 项部分和近似

$$\mathrm{e}^{-1}\approx1+(-1)+\frac{(-1)^2}{2!}+\cdots+\frac{(-1)^7}{7!}$$

则得 $\mathrm{e}^{-1}\approx0.3679$(取 4 位小数),且截断误差 $R_7=|\mathrm{e}^{-1}-0.3679|\leqslant\dfrac{1}{8!}<\dfrac{1}{4}\times10^{-4}$. 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. 从而求得的 $I_0\approx0.6321=\tilde{I}_0$ 时,用(1.12)式的计算公式为

$$
\text{(A)}\ \begin{cases} \tilde{I}_n = 1 - n\tilde{I}_{n-1} \quad (n=1,2,\cdots) \\ \tilde{I}_0 = 0.6321 \end{cases} \tag{1.13}
$$

计算结果见表 1-1 的 $\tilde{I}_n$ 列.

表 1-1　计算结果

n	$\tilde{I}_n$(用(A)计算)	I_n^*(用(B)计算)	n	$\tilde{I}_n$(用(A)计算)	I_n^*(用(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	0.210 6	0.112 1
3	0.207 4	0.207 3	8	−0.728 0	0.103 5
4	0.170 4	0.170 8	9	7.552	0.068 4

从表 1-1 中发现 $\tilde{I}_8<0$,这与一切 $I_n>0$ 相矛盾. 而且,由积分估值,得

$$
\frac{e^{-1}}{n+1} = e^{-1}\int_0^1 x^n \mathrm{d}x < I_n < e^{-0}\int_0^1 x^n \mathrm{d}x = \frac{1}{n+1} \tag{1.14}
$$

显然,用递推公式(A)求解 I_n 不正确. 那么为什么会出现这种结果呢? 下面做误差分析.

设初值 $\tilde{I}_0$ 有误差 $E_0=I_0-\tilde{I}_0$,则 $\tilde{I}_n$ 的误差满足关系

$$
E_n = I_n - \tilde{I}_n = -nE_{n-1} \quad (n=1,2,\cdots)
$$

由此,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. 它表明计算公式(A)是数值不稳定的. 现在,我们换一种计算方案(B). 由(1.14)式取 $n=9$,得

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

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(1.12)式倒过来计算,即由 I_9^* 算出 $I_8^*, I_7^*, \cdots, I_0^*$,公式为

$$
\text{(B)}\ \begin{cases} I_{n-1}^* = \dfrac{1}{n}(1-I_n^*) \quad (n=9,8,\cdots,1) \\ I_9^* = 0.0684 \end{cases} \tag{1.15}
$$

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}. 若记 $E_n^*=I_n-I_n^*$,则 $|E_0^*|=\dfrac{1}{n!}|E_n^*|$. 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.

相比较方案(B),尽管方案(A)中的初值 $\tilde{I}_0$ 相当准确,由于误差传播是逐步扩大的,因