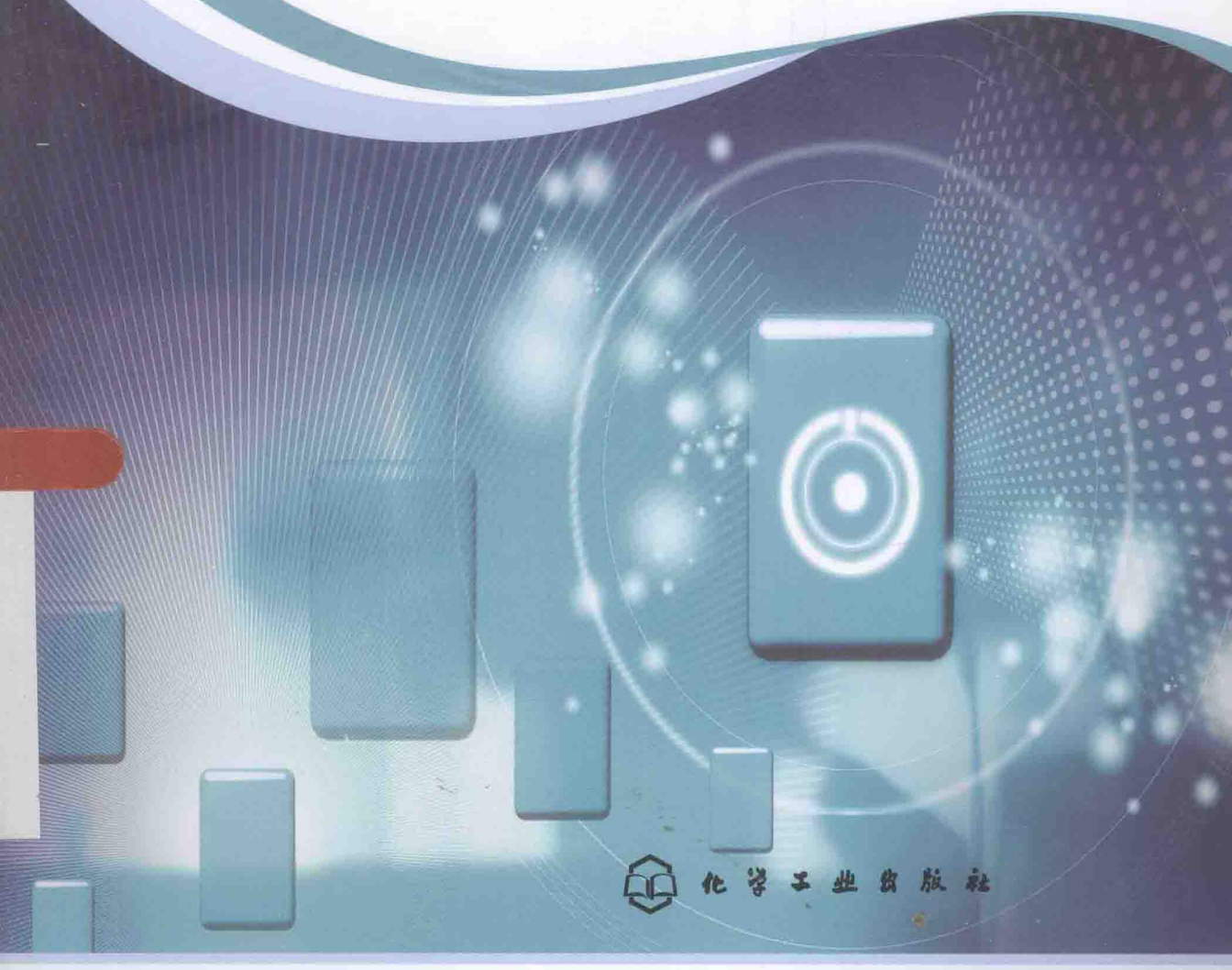
高等学校数理类基础课程“十二五”规划教材

应用数值分析

王明辉　主编　　王广彬　张　闻　副主编

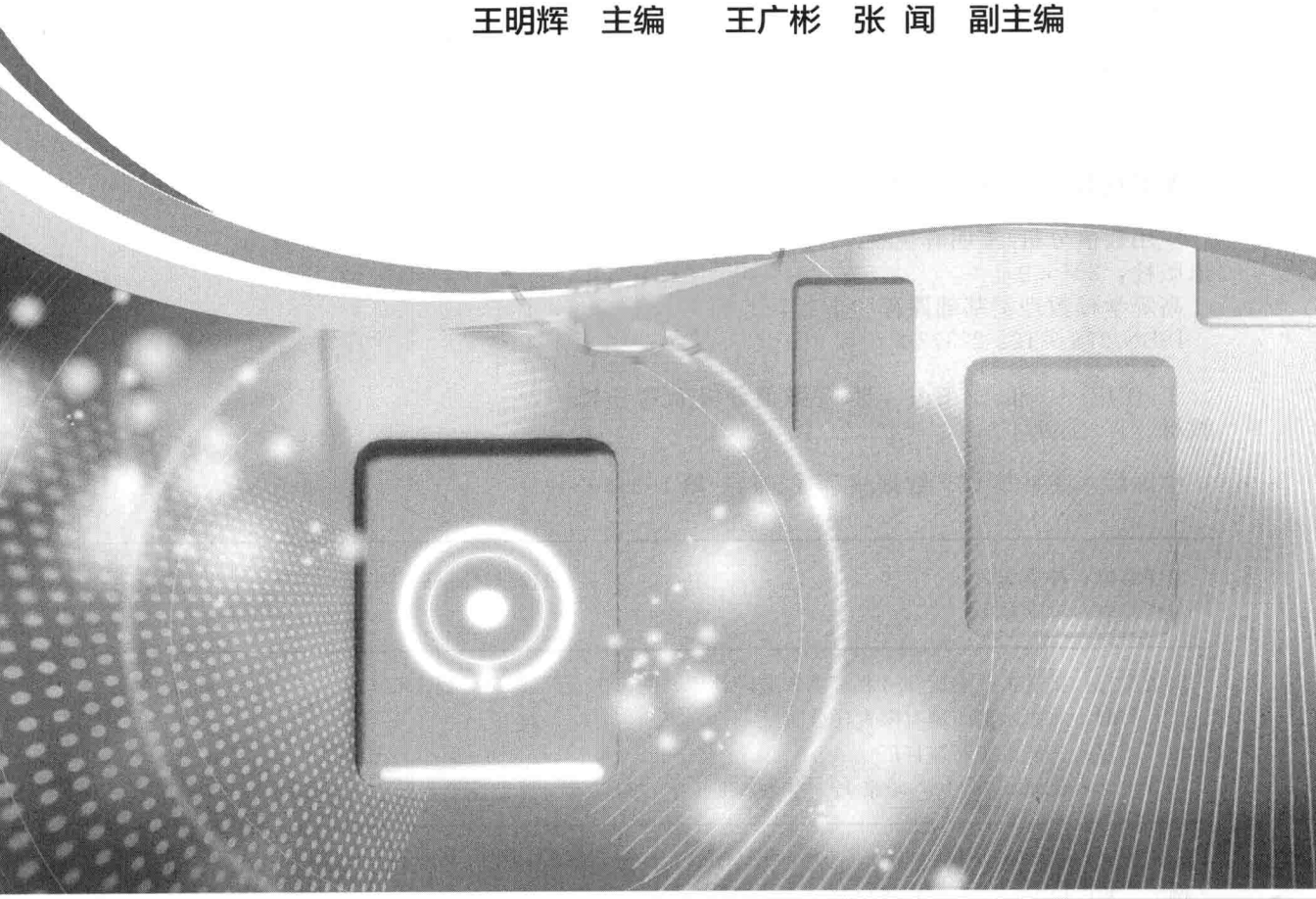


化学工业出版社

高等学校数理类基础课程“十二五”规划教材

应用数值分析

王明辉　主编　　王广彬　张　闻　副主编



化学工业出版社

本书讨论最基本的数值计算方法，采用数值分析和科学计算并重的思路，强调问题驱动和算法的 Matlab 软件实现，尝试激发学生的学习兴趣，主要内容包括科学计算简介、插值法、逼近方法、数值微积分、解线性方程组的直接法、解线性方程组的迭代法、非线性方程求根、代数特征值问题和常微分方程数值解法，共分 9 章. 本书结构合理，可读性强，只要求读者具有基本的高等数学和线性代数的知识.

本书是为理工科非数学专业高年级本科生和研究生编写的应用数值分析的短学时的教材或参考书，也可以供数学专业选用，对以科学计算为工具的科技人员也是本很好的参考书.

安徽大学图书馆 藏书 www.lib.ahu.edu.cn

图书在版编目（CIP）数据

应用数值分析/王明辉主编. —北京：化学工业出版社，2015.2
高等学校数理类基础课程“十二五”规划教材
ISBN 978-7-122-22573-3

Ⅰ.①应… Ⅱ.①王… 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（2014）第 298189 号

责任编辑：郝英华　　装帧设计：韩　飞
责任校对：王素芹

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：北京永鑫印刷有限责任公司
装　　订：三河市宇新装订厂
787mm×1092mm　1/16　印张 17　字数 288 千字　2015 年 3 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：36.00 元

版权所有　违者必究

前 言

随着计算机的出现，“数值分析”在工程和科学问题求解中的应用正呈爆炸式发展，使之成为每个工程师科学基础教育的一部分. “数值分析”课程也是科学计算方面的重要基础课程之一，承担着科学计算入门和介绍基本算法的任务. 因此，很多学校将“数值分析”课程设为非数学专业研究生公共基础课，或者本科高年级学生的选修课. 在教学过程中，由于学时偏少和部分学生数学基础偏弱，以及课程本身内容多、难度大、实践和应用少等原因，教学效果受到影响. 因此，我们根据应用型本科院校教学特点和学生的数学基础而编写了本书.

笔者希望达到以下几个目的. 一是全面但简洁地介绍数值计算的基本思想、理论和算法. 二是重点介绍这些数值算法的 Matlab 实现，我们所说的实现主要是借助 Matlab 函数实现，不是自写算法的程序代码实现. 当然，对于数学专业学生，要求学生证明其中的大部分结论，并在上机环节实现所有算法的代码编写. 三是尽量结合实例介绍算法的应用，之所以如此，主要是希望降低难度，强化实践，激发非数学专业学生学习该课程的兴趣. 笔编者也加入了一些相关数学家简介等课外读物，一方面对学生补充一些数学史教育，开拓视野；另一方面对激发学生学习数学兴趣也有一定的作用.

本课程的先修课程包括高等数学和线性代数，读者最好先熟悉 Matlab 的基本操作，这样本书的内容可以在 40 学时左右讲完，其中加* 号的部分可作为选学内容. 如果条件允许，最好能有 8 学时左右的上机实践，以便学生更好地理解所学的知识并熟练掌握相关 Matlab 函数的使用.

全书共分 9 章，主要内容包括科学计算简介、插值法、逼近方法、数值微积分、解线性方程组的直接法、解线性方程组的迭代法、非线性方程求根、代数特征值问题和常微分方程数值解法.

本书中的第 1、2、3、4、7 章由王明辉编写，于彬给予了指导，第 5、6、8 章由王广彬和张闻编写，第 9 章由王斌编写. 全书由王明辉负责组织与协调，并负责全书的统稿，韩银环、张俊涛和徐露萍参与了部分内容的整理及程序的调试.

本书配有内容丰富的电子课件可免费赠送给采用本书作为教材的院校使用，如有需要，请发邮件至 cipedu@ 163. com 索取.

由于笔者水平有限，不妥之处在所难免，敬请广大读者批评指正.

编者

2014 年 12 月

目 录

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

第1章

科学计算简介

1.1 数值分析简介

现代科学研究有三大支柱：理论研究、科学实验和科学计算. 科学计算的基础就是数值分析，或者说科学计算就是数值分析.

数值分析（numerical analysis），也称数值方法、计算方法或计算机数学，是计算数学的一个主要部分，计算数学是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，是用公式表示数学问题以便可以利用算术和逻辑运算解决这些问题的技术.

在计算机出现以前，实现这类计算的时间和代价严重限制了它们的实际运用. 然而，随着计算机的出现，数值分析在工程和科学问题求解中的应用正呈爆炸式发展，使之成为每个工程师和科学家基础教育的一部分.

一般地说，用计算机解决科学计算问题，首先需要针对实际问题提炼出相应的数学模型，然后为解决数学模型设计出数值计算方法，经过程序设计之后上机计算，求出数值结果，再由实验来检验. 概括为如下过程.

实际问题 → 数学模型 → 计算方法 → 程序设计 → 计算结果

数值分析是寻求数学问题近似解的方法、过程及其理论的一个数学分支. 它以纯数学作为基础，但却不完全像纯数学那样只研究数学本身的理论，而是着重研究数学问题求解的数值方法及与此有关的理论，包括方法的收敛性，稳定性及误差分析；还要根据计算机的特点研究计算时间和空间（也称计算复杂性，computational complexity）最省的计

一个科学家最大的本领就在于化复杂为简单，用简单的方法去解决复杂的问题.

——冯康

There are three great branches of science: theory, experiment and computation.

The fundamental law of computer science: As machines become more powerful, the efficiency of algorithms grows more important, not less.

——L. N. Trefethen

算方法. 有的方法在理论上虽然还不够完善与严密，但通过对比分析、实际计算和实践检验等手段，被证明是行之有效的方法也可采用. 因此，数值分析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，是一门与使用计算机密切结合的实用性很强的数学课程.

至于为什么要学习数值分析，除了对整体教育有用外，还有一些其他的理由.

① 数值方法能够极大地覆盖所能解决的问题类型. 该方法能处理大型方程组、非线性和复杂几何等工程和科学领域中普遍存的问题，但用标准的解析方法求解是不可能的. 因此学习数值分析可以增强问题求解的技能.

② 学习数值分析可以让用户更加智慧地使用“封装过的”软件. 如果缺少对基本理论的理解，就只能把这些软件看作“黑盒”，因此就会对内部的工作机制和它们产生结果的优劣缺少必要的了解.

③ 很多问题不能直接用封装的程序解决，如果熟悉数值方法并擅长计算机编程的话，就可以自己设计程序解决问题.

④ 数值分析是学习使用计算机的有效载体，对于展示计算机的强大和不足是非常理想的. 当成功地在计算机上实现了数值方法，然后将它们应用于求解其他难题时，就可以极大地展示计算机如何为个人的发展服务. 同时还会学习如何认识和控制误差，这是大规模数值计算的组成部分，也是大规模数值计算面临的最大问题.

⑤ 数值分析提供了一个增强对数学理解的平台，因为数值方法的一个功能是将数学从高级的表示化为基本的算术操作，从这个独特的角度可以提高对数学问题的理解和认知.

人物介绍

冯康（1920—1993），数学家、应用数学和计算数学家. 世界数学史上具有重要地位的科学家. 独立创造了有限元方法、自然归化和自然边界元方法，开辟了辛几何和辛格式研究新领域. 中国现代计算数学研究的开拓者. 先后获得1978年全国科学大会重大成果奖、全国自然科学二等奖、科技进步二等奖及科学院自然科学一等奖等. 冯康去世不久后的1993年年底，美国著名科学家、前美国总统科学顾问、美国原子能委员会计算和应用数学中心主任、沃尔夫奖（1987）和阿贝尔奖（2005）获得者彼得·拉克斯（Peter Lax）院士专门撰文悼念冯康，发表在美国《工业与应用数学会通讯》上. 他指出：“1993年8月17日，中国的杰出应用数学家冯康先生突然与世长辞. 七十三载悠悠岁月，成就了他杰出的事业生涯，也走过了一段艰辛的生活旅程. 20世纪50年代后期，冯康先生独立于西方国家在应用数学方面的发展，创造了有限元方法理论. 20世纪80年代末期，他又提出并发展了求解哈密顿型方程的辛几何算法. 冯康先生对于中国科学事业发展所做出的贡献是无法估量的. 他通过自身的努力钻研并带领学生刻苦攻坚，将中国置身于应用数学及计算数学的世界版图上.”

1.2 误差

1.2.1 误差的来源与分类

工程师和科学家们总是发现自己必须基于不确定的信息完成特定的目标. 尽管完美是值得赞美的目标，但是却极少能够达到，因为误差几乎处处存在.

模型误差（model error）：用数学方法解决实际问题，首先必须把实际问题经过抽象，忽略一些次要的因素，简化成一个确定的数学问题，它与实际问题或客观现象之间必然存在误差，这种误差称为“模型误差”.

观测误差（observation error）：数学问题中总包含一些参量（或物

理量，如电压、电流、温度、长度等），它们的值（输入数据）往往是由观测得到的. 而观测的误差是难以避免的，由此产生的误差称为“观测误差”.

截断误差（truncation error）：由于用近似数学过程代替准确数学过程而导致的误差，也称为方法误差，这是计算方法本身所出现的误差. 例如

$$\cos x=1-\frac{x^2}{2}+\frac{x^4}{4!}-\frac{x^6}{6!}+\cdots+\frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!}+\cdots$$

当$|x|$很小时，可以用$1-\frac{x^2}{2}$作为$\cos x$近似值，后面省略掉的部分就是该方法的截断误差.

舍入误差（round-off error）：是由于计算机不能准确表示某些量而引起的. 少量的舍入误差是微不足道的，但在计算机做成千上万次运算后，舍入误差的累积有时可能是十分惊人的.

研究计算结果的误差是否满足精度要求就是误差估计问题，本书主要讨论算法的截断误差与舍入误差，而截断误差将结合具体算法讨论.

【例 1.1】 计算$\int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x$

【解】 将e^{-x^2}做 Taylor 展开后再积分得

$$\int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x=1-\frac{1}{3}+\frac{1}{2!}\times\frac{1}{5}-\frac{1}{3!}\times\frac{1}{7}+\frac{1}{4!}\times\frac{1}{9}-\cdots$$

令$S_4=1-\frac{1}{3}+\frac{1}{2!}\times\frac{1}{5}-\frac{1}{3!}\times\frac{1}{7}$，$R_4=\frac{1}{4!}\times\frac{1}{9}-\cdots$，取$\int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x\approx S_4$，则$R_4$就是截断误差，且$|R_4|<\frac{1}{4!}\times\frac{1}{9}<0.005$，由截取部分引起.

下面由计算机计算S_4，假设保留小数点后三位，我们有

$$S_4=1-\frac{1}{3}+\frac{1}{2!}\times\frac{1}{5}-\frac{1}{3!}\times\frac{1}{7}\approx 1-0.333+0.100-0.024=0.743$$

其中的舍入误差$<0.0005\times 2=0.001$，由留下部分上机计算时引起.

从而计算$\int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x$的总误差为截断误差和舍入误差的和 0.006.

$\int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x$的真实值为 0.747….

1.2.2　误差的定义

定义 1.1　设x为准确值，x^*为x的一个近似值，称$e(x^*)=$

Lloyd N. Trefethen，1982年在斯坦福大学获得博士学位，研究领域是数值分析与应用数学，现为英国牛津大学教授，世界顶尖的数值分析专家，美国国家工程院院士，英国皇家学会院士，并现任 SIAM（国际工业与应用数学学会）主席. 曾获得 MIT 教学奖、康奈尔大学教学奖、牛津大学教学奖、欧洲研究理事会基金（European Research Council Advanced Grant）、IMA 金奖等，并因其在数值分析领域杰出的成就获第一届 Leslie Fox 奖.

x^*-x 为近似值的绝对误差（absolute error），简称误差.

注意：这样定义的误差 $e(x^*)$ 可正可负.

通常我们不能算出准确值 x，当然也不能算出误差 $e(x^*)$ 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 $\varepsilon(x^*)$，也就是误差绝对值的一个上界. $\varepsilon(x^*)$ 称为近似值的误差限，它总是正数.

一般情形 $|x^*-x|\leqslant\varepsilon(x^*)$，工程中常记作 $x=x^*\pm\varepsilon(x^*)$.

我们把近似值的误差 $e(x^*)$ 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（relative error），记作 $e_r(x^*)$.

在实际计算中，由于真值 x 总是不知道的，通常取 $e_r(x^*)=\dfrac{e(x^*)}{x^*}=\dfrac{x^*-x}{x^*}$ 作为 x^* 的相对误差，条件是 $e_r(x^*)=\dfrac{e(x^*)}{x^*}$ 较小，此时

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

是 $e_r(x^*)$ 的平方项级，故可忽略不计. 相对误差也可正可负，它的绝对值上界称为相对误差限，记作 $\varepsilon_r(x^*)$，即 $\varepsilon_r(x^*)=\dfrac{\varepsilon(x^*)}{|x^*|}$.

注 1.1：① 绝对误差是有量纲的量，它与所研究问题的背景有关，因此我们不能单单从绝对误差值的大小来判断计算结果的精度，还必须考虑到实际问题的应用背景.

② 通过引入相对误差，我们可比较不同算法，不同应用问题的计算精度，这一点是无法通过比较绝对误差做到的，因为不同值的东西，在量上是无法比较的. 正如我们不能通过比较两个商品的使用价值来判定商品的贵贱，只能通过抽象的价值.

比如，测量一座桥梁和一个铆钉的长度，结果分别为 9999cm 和 9cm，如果真实值分别是 10000cm 和 10cm，二者的误差皆为 1cm，相对误差分别为 0.0001 和 0.1. 因此可以得到这样的结论：对桥梁的测量精度足够了，对铆钉的测量还要进一步提高精度.

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方法，使得用它表示的近似数自身就指明相对误差的大小，我们引入有效数字的概念.

定义 1.2 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，则称近似值有 n 位**有效数字**（significant figure）.

在科学记数法中，将近似值 x^* 写成规格化形式为

$$x=\pm0.a_1a_2\cdots a_i\cdots a_n\cdots\times10^m \tag{1-1}$$

其中，m 为整数；$a_1\neq0$，$a_i(i=1,2,\cdots,n,\cdots)$ 为 0～9 之间的整数.

按照定义 1.2，近似值 x^* 有 n 位有效数字当且仅当

$$|x^*-x|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n} \tag{1-2}$$

因此在 m 相同的情形下，n 越大则误差越小，亦即一个近似值的有效位数越多其误差限越小.

【例 1.2】 按四舍五入原则写出下列各数具有 5 位有效数字的近

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

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位有效数字的近似数是8.0000而不是8，因为8只有1位有效数字.

【例1.3】 重力常数 g，如果以 m/s^2 为单位，$g\approx 0.980\times 10^{1}\,m/s^2$；若以 km/s^2 为单位，$g\approx 0.980\times 10^{-2}\,km/s^2$，它们都具有3位有效数字，因为按第一种写法

$$|g-9.80|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-2}=\frac{1}{2}\times 10^{1-3}$$

按第二种写法

$$|g-0.00980|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-5}=\frac{1}{2}\times 10^{-2-3}$$

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，$\varepsilon_1^*=\frac{1}{2}\times 10^{-2}\,m/s^2$，$\varepsilon_2^*=\frac{1}{2}\times 10^{-5}\,km/s^2$，而相对误差都是

$$\varepsilon_r^*=0.005/9.80=0.000005/0.00980$$

例1.3说明有效位数与小数点后有多少位数有关. 然而，从式(1-2)可以得到具有 n 位有效数字的近似数 x^*，其绝对误差限为 $\varepsilon^*=\frac{1}{2}\times 10^{m-n}$，在 m 相同的情况下，n 越大则 10^{m-n} 越小，故有效位数越多，绝对误差限越小.

关于一个近似数的有效位数与其相对误差的关系，列出下面的定理.

定理1.1 设近似数 x^* 具有规格化形式(1-1)，

① 若 x^* 具有 n 位有效数字，则其相对误差限为

$$\varepsilon_r^*\leqslant\frac{1}{2a_1}\times 10^{-n+1}\tag{1-3}$$

② 如果

$$\varepsilon_r^*\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-n+1}\tag{1-4}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

定理说明，有效位数越多，相对误差限越少.

1.2.4 计算机浮点数系

计算机内部通常使用浮点数进行实数运算. 计算机的浮点数是仅有有限字长的二进制数，一个浮点数的表示由正负号、小数形式的尾数和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

$$\pm(0.a_1a_2\cdots a_{23})_2\times 2^p,\ |p|\leqslant 2^7-1,p\in Z,a_i\in\{0,1\},$$

这里 Z 表示整数集. 二进制的非零数字只有 1，所以 $a_1=1$. 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. 如果当 $x\in\left[\dfrac{a+c}{2},\ \dfrac{a+b}{2}\right)=[a-2^{p-1-23},\ a-2^{p-1-23})$ 时，用 a 表示 x，记为 $fl(x)=a$，其相对误差是

$$|\varepsilon_r|=\left|\frac{x-fl(x)}{fl(x)}\right|\leqslant\frac{2^{p-1-23}}{2^{p-1}}=2^{-23}\approx 10^{-6.923}\approx\frac{1}{2}\times 10^{-6.623}$$

这表明单精度实数有 6～7 位有效数字.

二进制阶数最高为 $2^7-1=10^{(2^7-1)\lg 2}\approx 10^{38.23}$，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、输出或中间数据太大而无法表示时，计算过程将会非正常终止，此现象称为上溢（overflow）；当数据太小而只能用零表示时，计算机将此数置为零，精度损失，此现象称为下溢（underflow）. 下溢不总是有害的，在浮点运算时，我们需要考虑数据运算可能产生的上溢和有害的下溢.

1.3 误差的传播

1.3.1 误差估计

数值运算中误差传播情况比较复杂，估计起来比较困难. 本节所讨论的运算是四则运算与一些常用函数的计算.

由微分学，当自变量改变（误差）很小时，函数的微分作为函数的改变量的主要线性部分可以近似函数的改变量，故可以利用微分运算公式导出误差运算公式.

设数值计算中求得的解与参量（原始数据）x_1，x_2，…，x_n 有关，

记为

$$y=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$$

参量的误差必然引起解的误差. 设 x_1，x_2，…，x_n 的近似值分别为 x_1^*，x_2^*，…，x_n^*，相应的解为

$$y^*=f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$$

假设 f 在点 $(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$ 可微，则当数据误差较小时，解的绝对误差为

$$\begin{aligned}e(y^*)&=y^*-y=f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)-f(x_1,x_2,\cdots,x_n)\\&\approx \mathrm{d}f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)\\&=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}{\partial x_i}(x_i^*-x_i)\\&=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}{\partial x_i}e(x_i^*)\end{aligned}\tag{1-5}$$

其相对误差为

$$\begin{aligned}e_{\mathrm{r}}(y^*)&=\frac{e(y^*)}{y^*}\approx \mathrm{d}(\ln f)\\&=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}{\partial x_i}\frac{e(x_i^*)}{f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}\\&=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}{\partial x_i}\frac{x_i^*}{f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}e_{\mathrm{r}}(x_i^*)\end{aligned}\tag{1-6}$$

将式(1-5)及式(1-6)中的 $e(\cdot)$ 和 $e_{\mathrm{r}}(\cdot)$ 分别换成误差限 ε 和 ε_{r}，求和的各项变成绝对值.

特别地，由式(1-5)及式(1-6)可得和、差、积、商之误差及相对误差公式

$$\begin{cases}e(x_1^*\pm x_2^*)=e(x_1^*)\pm e(x_2^*)\\e(x_1^*x_2^*)=x_2^*e(x_1^*)+x_1^*e(x_2^*)\\e(x_1^*/x_2^*)=\dfrac{x_2^*e(x_1^*)-x_1^*e(x_2^*)}{(x_2^*)^2}\end{cases}\tag{1-7}$$

$$\begin{cases}e_{\mathrm{r}}(x_1^*\pm x_2^*)=\dfrac{x_1^*}{x_1^*\pm x_2^*}e_{\mathrm{r}}(x_1^*)\pm\dfrac{x_2^*}{x_1^*\pm x_2^*}e_{\mathrm{r}}(x_2^*),\\e_{\mathrm{r}}(x_1^*x_2^*)=e_{\mathrm{r}}(x_1^*)+e_{\mathrm{r}}(x_2^*),\\e_{\mathrm{r}}(x_1^*/x_2^*)=e_{\mathrm{r}}(x_1^*)-e_{\mathrm{r}}(x_2^*).\end{cases}\tag{1-8}$$

【例 1.4】 设 $y=x^n$，求 y 的相对误差与 x 的相对误差之间的

注 1.2：函数值的绝对误差等于函数的全微分，自变量的微分即为自变量的误差；函数值的相对误差等于函数的对数的全微分.

关系.

【解】 由式(1-6)得

$$e_r(y)\approx d(\ln x^n)=n d(\ln x)\approx n e_r(x)$$

所以 x^n 的相对误差是 x 的相对误差的 n 倍，特别地，$\sqrt{x}$ 的相对误差是 x 的相对误差的一半.

【例 1.5】 设 $x>0$，x 的相对误差为 δ，求 $\ln x$ 的绝对误差.

【解】由于 $\delta=e_r(x)=\dfrac{e(x)}{x}$，即 $e(x)=x\delta$，所以

$$e(\ln x)\approx d(\ln x)=\frac{e(x)}{x}=e_r(x)=\delta$$

1.3.2 病态问题与条件数

对一个数值问题本身，如果输入数据有微小扰动（即误差），导致输出数据（即问题解）相对误差很大，这就是病态问题（ill-conditioned problem），例如计算函数值 $f(x)$ 时，若 x 有扰动 $\Delta x=x-x^*$，其相对误差为 $\dfrac{\Delta x}{x}$，函数值 $f(x^*)$ 的相对误差为 $\dfrac{f(x)-f(x^*)}{f(x)}$. 相对误差比值

$$\left|\frac{f(x)-f(x^*)}{f(x)}\right|\Big/\left|\frac{\Delta x}{x}\right|\approx\left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right|=C_p \tag{1-9}$$

C_p称为计算函数值问题的条件数（condition number）. 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.

例如，$f(x)=x^n$则有 $C_p=n$，表示相对误差可能放大 n 倍. 如 $n=10$，有 $f(1)=1$，$f(1.02)\approx1.24$，若取 $x=1$，$x^*=1.02$ 自变量相对误差为 2%，函数值相对误差为 24%，这时问题可以认为是病态的. 一般情况条件数 $C_p\geqslant10$ 就认为是病态的，C_p越大病态越严重.

其他计算问题也要分析是否病态. 例如解线性方程组，如果输入数据有微小误差引起解的巨大误差，就认为是病态方程组，我们将在第 5 章中用矩阵的条件数来分析这种现象.

1.3.3 算法的数值稳定性（numerical stability）

定义 1.3 一个算法如果输入数据有误差，而在计算过程中得到控制，则称此算法是数值稳定的，否则称此算法是不稳定的.

在一种算法中，如果某一步有了绝对值为 δ 的误差，而以后各步计

算都准确地进行，仅由 δ 所引起的误差的绝对值，始终不超过 δ，就说算法是稳定的. 对于数值稳定性的算法，不用做具体的误差估计，就认为其结果是可靠的. 而数值不稳定的算法尽量不要使用.

【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.

首先容易得到 $\mathrm{e}^{-1}(n+1)^{-1}<I_n<(n+1)^{-1}$，注意和运算结果比较.

由分部积分可得计算 I_n 的递推公式

$$\begin{cases} I_n=1-nI_{n-1}, & n=1,2,\cdots \\ I_0=\mathrm{e}^{-1}\int_0^1\mathrm{e}^x\,\mathrm{d}x=1-\mathrm{e}^{-1}\approx 0.63212056=I_0^* \end{cases} \tag{1-10}$$

这里初始误差 $|E_0|=|I_0-I_0^*|<0.5\times10^{-8}$. 上机运算结果如下：

$I_1^*=1-1\cdot I_1^*=0.3678794$　　$I_{10}^*=1-10\cdot I_9^*=0.088128$

$I_{13}^*=1-13\cdot I_{12}^*=-7.227648$　　$I_8^*=1-8\cdot I_7^*=0.1009792$

$I_{11}^*=1-11\cdot I_{10}^*=0.030592$　　$I_{14}^*=1-14\cdot I_{13}^*=102.18707$

$I_9^*=1-9\cdot I_9^*=0.0911872$　　$I_{12}^*=1-12\cdot I_{11}^*=0.632896$

$I_{15}^*=1-15\cdot I_{14}^*=-1531.806$

差之毫厘，谬以千里！为什么？我们考虑第 n 步的误差 $|E_n|$

$$\begin{aligned} |E_n|&=|I_n-I_n^*|=|(1-nI_{n-1})-(1-nI_{n-1}^*)| \\ &=n|E_{n-1}|=\cdots=n!\ |E_0| \end{aligned}$$

可见很小的初始误差 $|E_0|<0.5\times10^{-8}$ 迅速积累，误差呈递增走势，造成这种情况的算法是不稳定的.

我们稍微改变一下式(1-10) 的第一个式子得到 $I_{n-1}=\dfrac{1}{n}(1-I_n)$，请读者根据 I_{100} 的上下界给出一个近似值，甚至也可以随便给出一个估计值，去计算 I_0 和 I_1，看结果如何？为什么会这样？

1.4　数值误差控制

对实际应用而言，我们并不知道真实值和计算值的准确误差，所以，对大多数工程和科学应用，必须对计算中产生的误差进行估计；但是，并不存在对所有问题都通用的数值误差估计方法，多数情况下，误差估计是建立在工程师和科学家的经验和判断基础上的. 在某种意义上，误差分析是一门艺术，但是我们可以给出如下的若干原则.

(1) 要避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法

人物介绍

詹姆斯·哈迪·威尔金森（James Hardy Wilkinson 1919—1986）是英国数学家和计算机学家，主要贡献是在数值计算领域. 1960 年，他在研究矩阵计算误差时而提出“向后误差分析法”（backward error analysis），目前是计算机上各种数值计算最常用的误差分析手段. 1969 年当选为英国皇家学会院士，1970 年，获得了图灵奖和冯·诺伊曼奖，1987 年被追授美国数学会的 Chauvenet 奖，1991 年设立了以他命名的威尔金森奖，用于表彰优秀的数值分析软件作者.

因为 $$e\left(\frac{x}{y}\right)=\frac{ye(x)-xe(y)}{y^2}$$

故当$|y|\ll|x|$时，舍入误差可能增大很多.

【例 1.7】 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

$$x_1=\frac{200000}{399999}=0.50000125,\quad x_2=\frac{199998}{199999}=0.999995$$

现在四位浮点十进制数（仿机器实际计算，先对阶，低阶向高阶看齐，再运算）下用消去法求解，上述方程写成

$$\begin{cases}10^{-4}\times0.1000x_1+10^1\times0.1000x_1=10^1\times0.1000\\10^1\times0.2000x_1+10^1\times0.1000x_2=10^1\times0.2000\end{cases}$$

若用$\frac{1}{2}(10^{-4}\times0.1000)$除第一方程减第二方程，则出现用小的数除大的数，得到

$$\begin{cases}10^{-4}\times0.1000x_1+10^1\times0.1000x_1=10^1\times0.1000\\10^6\times0.2000x_2=10^6\times0.2000\end{cases}$$

由此解出

$$x_1=0,\quad x_2=10^1\times0.1000=1$$

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，得到

$$\begin{cases}10^6\times0.1000x_2=10^6\times0.1000\\10^1\times0.2000x_1+10^1\times0.1000x_2=10^1\times0.2000\end{cases}$$

由此求得相当好的近似解$x_1=0.5000$，$x_2=10^1\times0.1000$.

（2）要避免两相近数相减

两数之差$u=x-y$的相对误差为

$$e_r(u)=e_r(x-y)=\frac{e(x)-e(y)}{x-y}$$

当x与y很接近时，u的相对误差会很大，有效数字位数将严重丢失. 例如，$x=532.65$，$y=532.52$都具有五位有效数字，但$x-y=0.13$只有两位有效数字. 这说明必须尽量避免出现这类运算. 最好是改变计算方法，防止这种现象产生.

可通过改变计算公式避免或减少有效数字的损失. 如果无法通过整

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com