



“十三五”普通高等教育本科规划教材

数值分析

主 编 张 杰
副主编 邢丽君
编 写 禹海兰 徐 屹



扫一扫

体验互动式学习



中国电力出版社
CHINA ELECTRIC POWER PRESS



“十三五”普通高等教育本科规划教材

数值分析

主 编 张 杰

副主编 邢丽君

编 写 禹海兰 徐 屹

绑定序列号，获取专属资源



扫一扫，体验互动式学习



内 容 提 要

本书为“十三五”普通高等教育本科规划教材。

本书介绍了科学与工程计算中常用数值计算方法的构造和使用，主要内容包括非线性方程求根，解线性方程组的迭代方法和直接方法，插值方法，数值积分，常微分方程初值问题的数值解法，矩阵特征值与特征向量的数值算法等。同时，本书对数值计算方法的收敛性、稳定性和误差分析也进行了介绍。各章配有适量的例题和习题。

本书可作为工科大学本科生、研究生课程教材，也可作为从事科学与工程计算的科研工作者学习数值计算方法的参考书。

图书在版编目 (CIP) 数据

数值分析/张杰主编. —北京: 中国电力出版社, 2017. 8

“十三五”普通高等教育本科规划教材

ISBN 978-7-5198-0718-4

I. ①数… II. ①张… 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 (2017) 第 134211 号

出版发行: 中国电力出版社

地 址: 北京市东城区北京站西街 19 号 (邮政编码 100005)

网 址: <http://www.cepp.sgcc.com.cn>

责任编辑: 雷 锦 (010-63412530) 张富梅

责任校对: 常燕昆

装帧设计: 王英磊 张 娟

责任印制: 吴 迪

印 刷: 北京雁林吉兆印刷有限公司

版 次: 2017 年 8 月第一版

印 次: 2017 年 8 月北京第一次印刷

开 本: 787 毫米×1092 毫米 16 开本

印 张: 10

字 数: 242 千字

定 价: 28.00 元

版 权 专 有 侵 权 必 究

本书如有印装质量问题, 我社发行部负责退换

前 言

数值分析是高等学校理工科专业本科生和研究生的重要数学基础课程。近几年来，随着计算科学与技术的发展，一方面，计算机的功能越来越强大；另一方面，需要解决的数学问题越来越复杂，对数值分析的教学提出了新的更高要求。为了更好地适应数值分析课程的教学，我们参考了国内已出版的同类教材，结合多年的教学改革与实践，编写了这本旨在加强实用性和应用性的教材。

本教材系统地介绍了现代科学与工程计算中常用的数值计算方法、概念以及相关的理论与应用。全书共分八章，主要内容包括：非线性方程求根，解线性方程组的迭代方法和直接方法，插值方法，数值积分，常微分方程初值问题的数值解法，矩阵特征值与特征向量的数值算法等。

本教材内容深浅适度、叙述系统严谨、文字通俗易懂。既注重内容的适用性、强调数值方法的思想 and 原理以及在计算机上的实现，又注重对学生实践能力的培养、强调应用性。各章配有适量的例题及习题，特别是综合性和实际应用性的习题，丰富和补充了书中的相应内容，有利于提高学生分析问题和解决问题的能力。

由于编者水平所限，教材中疏漏甚至错误在所难免，恳请各位专家、同行以及广大读者批评指正。

编者
2017年2月

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 数值分析的研究内容	1
1.2 误差的基础知识	1
1.3 算法的数值稳定性与收敛性	8
本章小结	9
习题一	9
第 2 章 非线性方程求根	11
2.1 二分法	11
2.2 迭代法及其收敛性	13
2.3 迭代收敛的加速方法	18
2.4 牛顿法	20
2.5 牛顿法的改进与变形	23
本章小结	24
习题二	24
第 3 章 解线性方程组的迭代方法	27
3.1 迭代法的基本概念	27
3.2 迭代公式的建立	31
3.3 迭代过程的收敛性	35
3.4 逐次超松弛迭代法 (SOR 法)	39
本章小结	42
习题三	43
第 4 章 解线性方程组的直接方法	45
4.1 消去法	45
4.2 追赶法	53
4.3 矩阵的三角分解	56
4.4 平方根法	61
4.5 误差分析	62
本章小结	65
习题四	66
第 5 章 插值方法	68
5.1 插值问题的提出	68
5.2 拉格朗日插值方法	69

5.3	牛顿插值公式	74
5.4	埃尔米特插值方法	78
5.5	分段插值法	81
5.6	样条函数	85
5.7	曲线拟合的最小二乘法	88
	本章小结	92
	习题五	92
第 6 章	数值积分	96
6.1	机械求积公式	96
6.2	牛顿-柯特斯 (Newton-Cotes) 公式	98
6.3	复化求积公式	102
6.4	龙贝格 (Romberg) 算法	105
6.5	高斯 (Gauss) 求积公式	110
	本章小结	112
	习题六	113
第 7 章	常微分方程初值问题的数值解法	116
7.1	欧拉 (Euler) 方法及改进欧拉方法	116
7.2	龙格-库塔 (Runge-Kutta) 方法	120
7.3	单步法的收敛性与稳定性	125
7.4	线性多步法	127
7.5	一阶常微分方程组与高阶方程的数值解法	130
	本章小结	131
	习题七	132
第 8 章	矩阵特征值与特征向量的数值算法	135
8.1	幂法及反幂法	135
8.2	对称矩阵的特征值及特征向量的求法	140
8.3	QR 方法	143
	本章小结	145
	习题八	146
附录 A	微积分若干基本定理的回顾	148
附录 B	矩阵及特征值问题的相关结论	149
附录 C	常微分方程的初值问题	152
	参考文献	154

第 1 章 绪 论

数值分析 (Numerical Analysis) 是对各种科学问题通过数值运算, 得到数值解答的方法和理论, 是研究如何用计算机等计算工具来求出数学问题数值解的一门学科. 本章主要介绍数值分析的研究内容、误差的相关理论以及算法的收敛性和稳定性问题, 并提出如何在计算中降低误差的影响.

1.1 数值分析的研究内容

随着计算机的广泛应用, 越来越多的实际问题可以通过数值计算而得到很好的解决, 数值分析得到了蓬勃的发展. 科学计算与科学理论、科学实验并列成为人类科学活动的三大方法. 因此, 数值分析既是一个基础性的学科, 又是一个应用型的学科.

用数值计算的方法来解决具体实际问题的一般过程如下:

实际问题 → 数学模型 → 数值分析 → 程序设计 → 上机求解 → 验证结果.

即首先必须将具体问题抽象为数学问题 (即建立数学模型). 而有些数学问题往往得不到它的准确解, 或者解这种问题的计算工作量很大, 只能借助计算机求其近似解 (称为数值解), 因此建立和选择合适的算法是整个数值计算中非常重要的环节. 对所有算法在理论上要保证数值稳定性, 即舍入误差对解的准确性影响不大; 对近似算法在理论上还应保证其收敛性, 即近似解能逼近精确解到任意的程度. 同时, 对解决同一个问题的不同算法进行评价时, 还要考虑算法所占存储空间的大小和算法包含运算次数的多少. 因此, 建立一个数值方法 (算法) 的基本原则是:

(1) 面向计算机, 要根据计算机特点提供可行的算法, 即只能进行加、减、乘、除运算和逻辑运算;

(2) 要有好的计算复杂性, 即好的时间复杂性——节省时间, 好的空间复杂性——节省存储量;

(3) 要有可靠的理论分析, 能任意逼近并达到精度要求, 对近似算法不仅进行收敛性和数值稳定性分析, 还要对误差进行分析;

(4) 要有数值实验, 证明方法行之有效.

1.2 误差的基础知识

1.2.1 误差的来源

用数值方法求解问题时, 计算过程中不可避免地存在误差, 其来源主要有:

(1) 模型误差

从实际问题出发建立数学模型时, 总是在一定条件下抓住主要因素, 忽略次要因素. 由于理想化了的数学描述与实际之间总存在着误差, 这种误差称为模型误差.

(2) 观测误差

数学模型中一般包含若干参数，它们的值通常由观测得到。受观测手段和测量工具的影响，观测难免出现误差，这种误差称为观测误差。

模型误差和观测误差在本书中不予讨论。

(3) 舍入误差

在数值计算过程中经常遇到一些无穷小数，如无理数和有理数中的某些分数化成的无限小数

$$\pi = 3.14159265\dots$$

$$\sqrt{2} = 1.41421356\dots$$

$$\frac{1}{3} = 0.33333333\dots$$

由于受计算机字长的限制，计算机所能表示的数据只能是一定的有限位数，这时就需要将数据按一定的舍入方式构成一定位数的近似有理数来代替，由此产生的误差，称为舍入误差。

例如：用 3.1416 来代替 π 、用 1.414 代替 $\sqrt{2}$ 等。

(4) 截断误差

在计算中常常遇到超越运算或极限运算，它们需要通过无穷过程才能求得精确的结果。但实际上人们只能进行有限次步骤的计算，用有限的步骤来求得近似的结果。这种用有限的过程代替无限的过程产生的误差，一般由无穷级数的截断、有限差分代替导数或在收敛之前终止迭代等过程中产生，称之为截断误差。

例如：

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots$$

当 $|x|$ 较小 ($|x| \ll 1$) 时，可以用前 3 项作为 $\sin x$ 的近似值，其截断误差的绝对值不超过 $\frac{|x|^7}{7!}$ 。

数值分析课程中所涉及的误差，通常指的是舍入误差和截断误差。关于函数的插值和逼近、数值积分与微分、常微分方程的数值解等内容中，主要分析方法的截断误差；而关于线性方程组的数值解等内容，主要讨论输入数据误差和舍入误差的传播以及对计算结果的影响。

1.2.2 绝对误差和相对误差

定义 1.1 设 x^* 是准确值 x 的一个近似值，称

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

为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。

一般来说 e 的准确值很难求出，只能根据具体测量或计算的情况估计它的大小的范围，即估计出 $|e|$ 的上界。若存在一个正数 ϵ ，使

$$|e| = |x - x^*| \leq \epsilon$$

则称 ϵ 是近似值的绝对误差限或绝对误差界，简称误差限或误差界。

有了误差限 ϵ ，就可以知道准确值 x 所在的范围 $x^* - \epsilon \leq x \leq x^* + \epsilon$ 。有时也可以表示为 $x = x^* \pm \epsilon$ 。

绝对误差的大小不能完全刻画近似值的准确程度,例如:测量 1 km 的长度时产生了 5 m 的误差,而测量 100 m 的长度时产生了 1 m 的误差.就绝对误差而言,前者为后者的 5 倍.但如果考虑到被测量值本身的大小,前者误差所占测量值的比例为 0.5%,后者误差所占测量值的比例为 1%,显然,后者比前者的测量要精确些.可见,刻画近似值的精确度不仅要看绝对误差的大小,还要考虑近似数本身的大小,为此,引入相对误差的概念.

定义 1.2 设 x^* 是准确值 x 的一个近似值,则称

$$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x - x^*}{x} \quad (1.2)$$

为 x 的近似值 x^* 的相对误差.

注意:当 $x = 0$ 时,相对误差没有意义.实际上准确值 x 往往是未知的,所以,常把

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

作为 x^* 的相对误差.通常不能确定出 e_r^* 的准确值,只能估计它的大小的范围,若

$$|e_r^*| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \varepsilon_r^*$$

则称 ε_r^* 为 x^* 的相对误差限.

1.2.3 有效数字

为给出一种近似值的表示方法,使之既能表示近似值的大小,又能表示其精确程度,下面引入有效数字的概念.

对于 π , 分别截取它的前 2 ~ 5 位数字得到 4 个数

$$3.1, 3.14, 3.141, 3.1415$$

但它们只舍不入,不全是位数限定下的最好近似值.依四舍五入规则得到

$$3.1, 3.14, 3.142, 3.1416$$

可见,它们中有两个与直接截取的数在末位上相差一个单位,容易看出,依四舍五入规则得到的近似值的绝对误差均不超过自身末位数字的半个单位.

例如:

$$|\pi - 3.14| < \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

$$|\pi - 3.1416| < \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

由以上讨论,我们给出下面的定义:

定义 1.3 如果近似值 x^* 的误差限不超过某一位的半个单位,且该位到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位,则称 x^* 有 n 位有效数字.

具体的,设 x^* 是准确值 x 的一个近似值,记

$$x^* = \pm 10^m \times 0.a_1a_2\cdots$$

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

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \quad (1.3)$$

则称 x^* 是 x 的具有 n 位有效数字的一个近似值.

【例 1-1】 以 $\frac{22}{7} = 3.1428571\cdots$ 作为 π 的近似值,它具有几位有效数字?

解 由于

$$\left| \frac{22}{7} - \pi \right| = 0.001264\cdots < \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

故 3.1428571... 具有三位有效数字.

定理 1.1 设 x^* 是准确值 x 的一个近似值, 且 $x^* = \pm 10^m \times 0.a_1a_2\cdots$ [其中 $a_i (i = 1, 2, \cdots)$ 是 $0, 1, 2, \cdots, 9$ 中的一个数字, 且 $a_1 \neq 0, m$ 为整数].

(1) 若 x^* 具有 n 位有效数字, 则 $\left| \frac{x-x^*}{x^*} \right| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}$;

(2) 若 $\left| \frac{x-x^*}{x^*} \right| \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n}$, 则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证明 显然 $a_1 \times 10^{m-1} \leq |x^*| \leq (a_1+1) \times 10^{m-1}$.

(1) 当 x^* 具有 n 位有效数字时, 有

$$\frac{|x-x^*|}{|x^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{a_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n} \quad (1.4)$$

(2) 若 $\frac{|x-x^*|}{|x^*|} \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n}$, 则

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

说明 x^* 至少具有 n 位有效数字.

定理 1.1 说明近似值的有效数字位数越多, 相对误差限就越小, 反之也成立.

【例 1-2】 要使 $\sqrt{5}$ 的近似值 x^* 的相对误差小于 0.0001, 它至少应取几位有效数字?

解 由于 $2 < \sqrt{5} < 3$, 故 $a_1 = 2$.

由定理 1.1 知, $\left| \frac{x-x^*}{x^*} \right| \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n}$.

可见 n (有效数字位数) 应满足

$$\frac{1}{2(2+1)} \times 10^{1-n} < 0.0001.$$

解得 $n=5$, 即至少取五位有效数字.

1.2.4 数值运算中误差的影响

1.2.4.1 误差的传播

在数值计算的过程中, 初始数据的误差对计算结果的影响称为误差的传播问题.

设某数学问题的解 y 与 x_1, x_2, \cdots, x_n 有关, 即 $y = \varphi(x_1, x_2, \cdots, x_n)$. 且 y 在点 (x_1, x_2, \cdots, x_n) 附近可微分. 若测得 x_1, x_2, \cdots, x_n 的一组近似值 $x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*$, 记为 $x^* = (x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$, 相应的 $y^* = \varphi(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$. 当数据较小时, 解的误差为

$$\begin{aligned} e(y) &= y - y^* = \varphi(x_1, x_2, \cdots, x_n) - \varphi(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*) \\ &\approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i^*} (x_i - x_i^*) \end{aligned} \quad (1.5)$$

解的相对误差为

$$e_r^*(y) = \frac{e}{y^*} \approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i^*} \cdot \frac{x_i^*}{\varphi(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)} e_r^*(x_i) \quad (1.6)$$

系数为

$$\frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i^*}$$

或

$$\frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i^*} \cdot \frac{x_i^*}{\varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}$$

上面两式表示结果误差相对于数据误差的放大或缩小倍数, 若

$$\left| \frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i^*} \right| \text{ 和 } \left| \frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i^*} \cdot \frac{x_i^*}{\varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)} \right|$$

很大, 则 $e(y)$ 或 $e_r^*(y)$ 可能很大, 数据 x_i^* 很小的变化可能引起结果 y^* 很大的误差.

对于加减乘除及开方等几种运算, 从式 (1.5) 和式 (1.6) 即可推出数据误差和计算结果误差之间的关系.

(1) 和的误差

$$\begin{aligned} e(x_1^* + x_2^*) &\approx e(x_1^*) + e(x_2^*) \\ e_r^*(x_1^* + x_2^*) &\approx \frac{x_1^*}{x_1^* + x_2^*} e_r^*(x_1^*) + \frac{x_2^*}{x_1^* + x_2^*} e_r^*(x_2^*) \end{aligned} \quad (1.7)$$

当 x_1^* 与 x_2^* 同号时, $\frac{x_1^*}{x_1^* + x_2^*}$ 与 $\frac{x_2^*}{x_1^* + x_2^*}$ 的绝对值都在 0 和 1 之间, 由式 (1.7) 知, 必有

$$\begin{aligned} |e(x_1^* + x_2^*)| &\leq |e(x_1^*)| + |e(x_2^*)| \\ |e_r^*(x_1^* + x_2^*)| &\leq |e_r^*(x_1^*)| + |e_r^*(x_2^*)| \end{aligned}$$

这两个等式说明加法运算结果的误差限或相对误差限, 都不超过相加各项的误差限或相对误差限之和.

当 x_1^* 与 x_2^* 异号时, $\frac{x_1^*}{x_1^* + x_2^*}$ 与 $\frac{x_2^*}{x_1^* + x_2^*}$ 的绝对值可能大于 1, 则上面的结论不成立. 特别的, 若 $x_1^* + x_2^* \approx 0$, 上式的绝对值可能很大, 可能出现

$$|e_r^*(x_1^* + x_2^*)| \gg |e_r^*(x_1^*)| + |e_r^*(x_2^*)|$$

因此, 绝对值相近的异号两数相加或者大小相近的同号两数相减, 会造成结果误差的严重增大.

(2) 积的误差

$$\begin{aligned} e(x_1^* x_2^*) &\approx x_2^* e(x_1^*) + x_1^* e(x_2^*) \\ e_r^*(x_1^* x_2^*) &\approx e_r^*(x_1^*) + e_r^*(x_2^*) \end{aligned} \quad (1.8)$$

由式 (1.8) 知, 当 x_1^* 或 x_2^* 的绝对值很大时, $|e(x_1^* x_2^*)|$ 可能很大, 这说明乘积绝对值很大, 可能会使误差严重增大, 从而减少精确度.

(3) 商的误差

$$\begin{aligned} e\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) &\approx \frac{x_2^*}{x_2^{*2}} e(x_1^*) - \frac{x_1^*}{x_2^{*2}} e(x_2^*) \\ e_r^*\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) &\approx e_r^*(x_1^*) - e_r^*(x_2^*) \end{aligned} \quad (1.9)$$

由式 (1.9) 知, 除数接近于零时, 可能使误差严重增大, 减少精确度.

(4) 开方的误差

$$\begin{aligned} e(\sqrt{x^*}) &\approx \frac{1}{2\sqrt{x^*}}e(x^*) \\ e_r^*(\sqrt{x^*}) &\approx \frac{1}{2}e_r^*(x^*) \end{aligned} \quad (1.10)$$

由式(1.10)知,平方根的相对误差是被开方数的相对误差的 $\frac{1}{2}$,即平方根的精确度比被开方数的精确度高.

1.2.4.2 避免误差的若干准则

在数值计算中每一步都可能产生误差,而解决一个问题往往要经过成千上万次运算,不可能每步都加以分析,只能从整体上考虑.在数值计算中,为控制误差的传播,应注意以下几个方面:

(1) 简化计算步骤以减少运算次数

减少运算次数,既可以提高解题速度,又能使计算中的误差累积降低.

【例 1-3】 要计算和式 $\sum_{n=1}^{1000} \frac{1}{n(n+1)}$ 的值,若逐项求和,其运算次数多且误差累积也不小,但和式可以简化为

$$\sum_{n=1}^{1000} \frac{1}{n(n+1)} = \sum_{n=1}^{1000} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{n+1} \right) = 1 - \frac{1}{1001}$$

则整个计算只要一次求倒数运算和一次减法运算即可.

【例 1-4】 要计算 n 次多项式 $p_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n$,通常乘法的运算次数为 $1+2+3+\cdots+n = \frac{n(n+1)}{2}$.若采用递推算法

$$\begin{cases} u_n = a_n \\ u_k = x u_{k+1} + a_k \quad (k = n-1, n-2, \dots, 0) \\ p_n(x) = u_0 \end{cases}$$

则乘法的运算次数为 n .

(2) 尽量避免相近的数相减

数值计算中出现两个相近的数相减时,会使计算结果误差严重增大,准确程度急速下降.为避免这种情况出现,一般可以先将计算公式变形,使变形后的算式不再含有相近数的减法运算.例如:

当 x 很大时,计算 $\sqrt{x+1} - \sqrt{x}$ 的值时,可以利用下列变换,提高有效数字的位数.

$$\sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}.$$

当 x 接近于0时,计算 $\frac{1-\cos x}{\sin x}$ 的值时,可以利用下列变换,提高有效数字的位数.

$$\frac{1-\cos x}{\sin x} = \frac{\sin x}{1+\cos x} \text{ 或 } \tan \frac{x}{2}.$$

(3) 避免用绝对值很小的数作除数

当用绝对值很小的数作除数或用绝对值很大的数作乘数时,会使计算结果误差严重增

大, 计算精确度减小.

【例 1-5】 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

$$\begin{cases} x_1 = \frac{100000}{199999} = 0.5000025 \\ x_2 = \frac{199998}{199999} = 0.999995 \end{cases}$$

假设用四位浮点数以及消元法求解, 上述方程可以写成

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

用 $-10^6 \times 0.2000$ 乘以第一个方程加到第二个方程上可得

$$\begin{cases} 10^{-4} \times 0.1000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.1000 \\ (10^6 \times 0.2000 - 10 \times 0.1000)x_2 = 10^6 \times 0.2000 - 10^1 \times 0.2000 \end{cases}$$

由此解得

$$\begin{cases} x_1 \approx 0 \\ x_2 \approx 10^1 \times 0.1000 \end{cases}$$

显然, 结果严重失真.

(4) 应注意控制误差的积累

在数值计算中, 经常遇到递推公式的计算. 当采用递推公式计算时, 由于多次递推, 可能产生误差的积累, 以至于得出错误的结果.

【例 1-6】 计算积分

$$I_n = e^{-1} \int_0^1 x^n e^x dx$$

解 利用分部积分法, 可以得到计算 I_n 的递推公式, 有

$$\begin{cases} I_0 = e^{-1} \int_0^1 e^x dx = 1 - e^{-1} \approx 0.6321 \\ I_n = 1 - nI_{n-1} \quad (n = 1, 2, \dots) \end{cases} \quad (1.11)$$

利用上式, 用四位小数计算依次得到

$$\begin{array}{ccccc} 0.6321 & 0.3679 & 0.2642 & 0.2074 & 0.1074 \\ 0.1480 & 0.1120 & 0.2160 & -0.7280 & 7.5520 \end{array}$$

由此看到, I_8 为负值, 显然与 $I_n > 0$ 矛盾.

事实上, 由估计式

$$\frac{e^{-1}}{n+1} = e^{-1} \left(\min_{0 \leq x \leq 1} e^x \right) \int_0^1 x^n dx < I_n < e^{-1} \left(\max_{0 \leq x \leq 1} e^x \right) \int_0^1 x^n dx = \frac{1}{n+1} \quad (1.12)$$

必有 $I_7 < \frac{1}{8} = 0.125$. 但是, 上面计算可得 $I_7 = 0.2160$, 可见, 有效数字严重丢失.

发生这个现象的原因是 I_0 的初始误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-4}$, 虽然在以后的递推计算中没有新的舍入误差, 但这个初始数据的误差在以后的每次计算时顺次乘以 $n = 1, 2, 3, \dots$ 而传播积累到 I_n 中, 从而使计算到 I_7 时完全不准确了.

若将式 (1.11) 改写为

$$I_{n-1} = \frac{1 - I_n}{n} \quad (1.13)$$

再由 $\frac{e^{-1}}{10} < I_9 < \frac{1}{10}$, 粗略地取

$$I_9 \approx \frac{1}{2} \left(\frac{1}{10} + \frac{e^{-1}}{10} \right) = 0.0684$$

按式 (1.13) 对 $n = 9, 8, 7, \dots, 1, 0$ 进行倒推计算, 计算过程中对小数点后第五位数字四舍五入, 得 $I_9, I_8, \dots, I_1, I_0$ 顺次为

0.0684	0.1035	0.1121	0.1268	0.1455
0.1709	0.2073	0.2642	0.3679	0.6321

可见, $I_0 = 0.6321$ 全部为有效数字. 其原因为 I_9 的误差传播到 I_8 时要乘以 $\frac{1}{9}$, 到计算 I_0 时 I_9 的误差已缩小为原来的 $\frac{1}{9!}$ 倍.

1.3 算法的数值稳定性与收敛性

1.3.1 算法的数值稳定性

在设计或选用算法时, 人们首先关心的是由它能否产生符合精度要求的可靠结果. 但是, 对大量算法来说, 要定量分析舍入误差的累积是非常复杂困难的. 因此, 为了推断算法的舍入误差是否影响可靠性结果的产生, 还需要建立定性分析的准则. 为此, 提出数值稳定性这一概念.

如果在执行一个算法的过程中舍入误差的增长不影响可靠结果的产生, 则称该算法是数值稳定的, 否则, 称之为数值不稳定.

算法稳定的一个必要条件是原始数据小的变化只会引起最后结果小的变化. 这个必要条件是关于数值稳定的一个基本原则. 符合这一准则的算法未必都是数值稳定的, 但是, 不符合这一准则的算法一定是数值不稳定的. 为了刻画舍入误差的增长与算法稳定性的关系, 下面引入一个定义:

定义 1.4 设给定的算法在执行某步运算时产生误差 ϵ , 在接下来的 n 步运算后产生的误差为 e_n , 且 e_n 仅由 ϵ 引起. 如果

$$|e_n| \approx cn\epsilon$$

c 是与 n 无关的常数, 则称误差呈线性增长. 如果

$$|e_n| \approx K^n |\epsilon|$$

K 为大于 1 的常数, 则称误差呈指数增长.

误差呈线性增长通常是不可避免的, 此时可以通过 $c\epsilon$ 来控制 e_n , 进而得到一个可靠的结果, 即误差呈线性增长的算法是数值稳定的. 误差呈指数增长时, 无论 $|\epsilon|$ 多小, K^n 都将使 e_n 失控, 即误差呈指数增长的算法是数值不稳定的. 数值不稳定的算法不能实际使用.

在实际计算中可以使用的算法有两类: 一类算法是对任何原始数据都是数值稳定的, 这种算法称为无条件稳定或绝对稳定; 另一类算法是对某些原始数据是数值稳定的, 而对另一

些原始数据是数值不稳定的, 这种算法称为条件稳定或相对稳定.

1.3.2 算法的收敛性

凡是近似算法必须保证在理论上或实际上的收敛性, 才能用于解决问题. 下面仅简单阐述两个问题: 对近似算法的收敛性如何从概念去描述? 如何从应用上去比较与评价?

一般情况下, 近似解逼近精确解的程度是选用某种距离进行描述的. 若关于给定计算问题的一个近似算法是收敛的, 指的是由该算法所产生近似解的一个无穷集合, 该集合按某种选定的距离能在任意程度上逼近精确解.

从应用方面说, 需要对近似算法收敛的形态进行比较与评价. 大多数近似算法按照产生近似解的方式可以分为两类: 第一类如函数的插值与逼近、数值积分及常微分方程数值解, 常常可以通过截断误差的先验估计, 直接提供一个符合要求的近似解. 其收敛的形态, 主要是比较截断误差的大小及计算复杂性的好坏; 第二类是数值代数及非线性方程的数值解的迭代算法, 常常通过产生收敛到精确解的序列来获得足够准确的近似解. 其收敛的形态, 主要是比较近似序列收敛速度的快慢及计算复杂性的好坏.



本章小结

本章主要介绍了数值分析和误差的基本概念, 以及误差在计算中的传播特性. 一般情况下, 用数值方法求解问题只能得到问题的近似解, 所以分析误差和误差产生的原因, 提出避免误差的措施, 是为算法提供坚实的应用基础和可靠的理论保证. 误差在数值计算中的危害是相当严重的, 若不控制误差的传播与积累, 计算结果就会与真值有很大偏差. 因此在进行算法设计时除了注意算法的数值稳定性、收敛性外, 必须要考虑如何避免误差.



习 题 一

- 求下列各数具有五位有效数字的近似值 (每个数求出一个近似值即可).
0.0152367, 816.9546, 1237651, 600045
- 若 $x^* = 1234.64$ 是 x 的具有六位有效数字的近似值, 求 x^* 的绝对误差限.
- 设 x^* 的相对误差限为 δ , 求 $(x^*)^k$ 的相对误差限.
- 设 $x^* > 0$, x^* 的相对误差限为 δ , 求 $\ln x$ 的相对误差限.
- 在下列各对 x 与 a 的值中, 用 a 近似 x . 试求: (a) a 的绝对误差; (b) a 的相对误差; (c) a 的有效数字的位数.
 - $x = \pi, a = 3.15$;
 - $x = \frac{1}{3}, a = 0.3333$;
 - $x = \frac{\pi}{1000}, a = 0.00315$;
 - $x = \frac{100}{3}, a = 33.3$.
- 设 $x_1^* = -2.72, x_2^* = 0.02118, x_3^* = 183.62, x_4^* = 12.430$ 均为经过四舍五入得出的近似值, 则它们各有几位有效数字?

7. 已知近似值 $x_1^* = 1.42$, $x_2^* = -0.018$, $x_3^* = 184 \times 10^{-4}$ 的绝对误差限均为 0.5×10^{-2} , 则它们各有几位有效数字?

8. 某数 x , $10 \leq x < 100$, 经数值计算求其近似值, 若要求具有四位有效数字, 则误差限应不超过多少?

9. 设 $f(x) = \ln(x - \sqrt{x^2 - 1})$, 或写成 $f(x) = -\ln(x + \sqrt{x^2 - 1})$, 开方时取六位有效数字的近似值. 用两种表达式分别计算 $f(30)$, 并估计误差.

10. 为尽量避免有效数字的严重损失, 当 $|x| \ll 1$ 时应该如何加工下列计算公式.

$$(1) \frac{1}{1+2x} - \frac{1-x}{1+x}; \quad (2) 1 - \cos x; \quad (3) e^{-x} - 1.$$

11. 设 $|x| \gg 1$, 加工下列计算公式以尽量避免有效数字的严重损失.

$$(1) \sqrt{x + \frac{1}{x}} - \sqrt{x - \frac{1}{x}}; \quad (2) \int_x^{x+1} \frac{1}{1+t^2} dt; \quad (3) \ln(x - \sqrt{x^2 - 1}).$$

12. 若用下列两种方式计算 e^{-5} 的近似值, 问哪种方法能提供较好的近似值? 并分析其原因.

$$(1) e^{-5} \approx \sum_{i=0}^9 (-1)^i \frac{5^i}{i!}; \quad (2) e^{-5} \approx \left(\sum_{i=0}^9 \frac{5^i}{i!} \right)^{-1}.$$

13. 下列式子是否要通过进行恒等变换, 才能避免有效数字的损失? 若要进行变换, 应如何变换?

$$(1) \sin x - \sin y; \quad (2) \arctan x - \arctan y; \\ (3) \sqrt{x+4} - 2; \quad (4) \frac{e^{2x} - 1}{2}.$$

14. 测得电压 $V = (110 \pm 2) \text{ V}$, 电流 $I = (20 \pm 0.5) \text{ A}$, 则由欧姆定律得 $R = \frac{V}{I} = 5.5 \Omega$, 求 R 的绝对误差和相对误差.

15. 已测得某场地长 x 的值 $x^* = 110 \text{ m}$, 宽 y 的值 $y^* = 80 \text{ m}$, 已知 x^* 的绝对误差是 0.2 m , y^* 的绝对误差是 0.1 m , 求场地面积 $S = xy$ 的绝对误差和相对误差.

第2章 非线性方程求根

科学技术和生产实践中的很多数学问题,往往可以归结为求解一元函数方程 $f(x) = 0$. 如果 $f(x)$ 是关于 x 的 n 次多项式,对应的方程称为 n 次代数方程;如果 $f(x)$ 是关于 x 的超越函数,对应的方程称为超越方程(例如:含三角函数、反三角函数、指数函数、对数函数等超越函数的方程). 这些方程的精确解很难求得,而在实际应用中,往往并不需要得到方程根的表达式. 因此有必要研究它的数值求根方法. 本章主要讨论单变量非线性方程 $f(x) = 0$ 的求根问题,这里 $x \in \mathbf{R}$, $f(x)$ 是某个区间上的连续函数. 介绍的方法有二分法、迭代法、迭代的加速方法、牛顿法等.

2.1 二分法

2.1.1 根的隔离

若 $f(x^*) = 0$, 则称 x^* 为方程 $f(x) = 0$ 的根,或称 x^* 为函数 $f(x)$ 的零点.

由代数基本定理可知, n 次代数方程 $f(x) = 0$ 在复数域内有且只有 n 个根(重根的个数按重数计算),当 $n \leq 4$ 时,代数方程求根有计算公式,当 $n \geq 5$ 时,就不能用公式来表示方程的根. 因此,一般对 $n \geq 3$ 时,多项式方程求根可采用迭代法求根.

关于方程求根大致包括下列三个问题:

- (1) 根的存在性. 方程有没有根? 如果有根,有几个根?
- (2) 根的隔离. 先求出方程根的大致范围,然后把范围分成若干个子区间,使每个子区间或者无根,或者只有一个根. 有根子区间内的任意点都可以看成该根的一个近似值,以后称有根子区间为有根区间.
- (3) 根的精确化. 已知一个根的近似值后,设法将它逐步精确化,直到满足精度要求为止.

以上三个问题是密切联系的,最为重要的是根的隔离及精确化问题. 对于根的精确化方法将介绍二分法、牛顿法等. 对于根的隔离,常常采用逐次搜索法来确定有根区间. 所谓逐次搜索法就是求出函数 $f(x)$ 在若干个离散点上的函数值,观察函数值的变化情况,从而确定有根区间.

【例 2-1】 讨论方程 $f(x) = x^3 - 2x^2 + 5x - 8 = 0$ 的实根的个数并确定有根区间.

解 由于 $f'(x) = 3x^2 - 4x + 5 = 3\left(x - \frac{2}{3}\right)^2 + \frac{11}{3} > 0$, 故 $f(x)$ 在 $(-\infty, +\infty)$ 上严格递增.

又 $f(0) = -8 < 0$, $f(2) = 2 > 0$.

因此, $f(x) = 0$ 只有一个实根,根所在的区间为 $[0, 2]$.

【例 2-2】 求方程 $f(x) = x^3 - 11.1x^2 + 38.8x - 41.77 = 0$ 的有根区间.

解 根据有根区间的定义,对 $f(x) = 0$ 的根进行搜索计算,结果如表 2-1 所示.