



“十二五”普通高等教育规划教材

数值计算方法 与实验学习辅导

左军 谢冬秀 编著



国防工业出版社
National Defense Industry Press



北京市重点建设学科(71D1311012)

北京市教委面上项目(KM201411232018)

北京信息科技大学研究生教育质量工程项目(YJT2015XX)

数值计算方法与实验

学习辅导

左 军 谢冬秀 编著

国防工业出版社

·北京·

内容简介

本书是国防工业出版社出版的教材《数值计算方法与实验》的配套学习辅导书，全书内容共分八章，包括引论、非线性方程求根、解线性方程组的数值解法、插值法、函数逼近与曲线拟合、数值积分与数值微分、代数特征值问题计算方法、常微分方程的数值解法。每章分三部分：第一部分是基本要求与知识要点，简明扼要地提出本章的要求，系统归纳了要掌握的知识点及有关重点难点内容；第二部分是典型例题选讲，为巩固和深化课程内容，选择一些典型例题作了详细分析与解答；第三部分是课后习题解答，对教材课后习题给出详尽解答过程。

本书可作为理工科院校各专业本科生及研究生学习数值分析或计算方法课程时的辅导书，也可供从事科学与工程计算的科技人员参考使用，对准备考研的人员也有很好的参考价值。

图书在版编目(CIP)数据



中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 191207 号

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

北京奥鑫印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 787×1092 1/16 印张 11 1/4 字数 267 千字

2015 年 8 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—4000 册 定价 26.00 元

(本书如有印装错误, 我社负责调换)

国防书店: (010) 88540777

发行邮购: (010) 88540776

发行传真: (010) 88540755

发行业务: (010) 88540717

前　　言

“数值计算方法”(又称“数值分析”)是很多高等院校信息与计算科学、数学与应用数学、计算机科学等理工科本科专业开设的一门专业基础课,也是工件研究生的学位课程。该课程的理论与方法已广泛应用到科学研究、工程技术和社会科学的各领域,为了帮助学生更好地掌握数值计算方法的基本理论,开拓思路,提高解题能力,我们结合多年教学经验,编写了这本与国防工业出版社出版的教材《数值计算方法与实验》相配套的学习辅导书。

本书内容与《数值计算方法与实验》内容相对应,共分八章,分别是引论、非线性方程求根、解线性方程组的数值解法、插值法、函数逼近与曲线拟合、数值积分与数值微分、代数特征值问题计算方法、常微分方程的数值解法。每章分三部分:第一部分提出本章的基本要求,系统归纳了有关的重要概念、基本理论和基本方法,突出主要定理及重要公式,结构清晰,便于读者重点把握;第二部分选择一部分典型例题,给出了详细分析与解答,有助于读者深入掌握解题方法和技巧;第三部分对教材课后习题给出解答,供读者参考。

本书的出版得到北京市重点建设学科(71D1311012)、北京市教委面上项目(KM201411232018)和北京信息科技大学研究生教育质量工程项目(YJT2015XX)的资助,书中内容参考了众多的数值分析、计算方法教科书及文献资料,在此对原作者及给予支持和帮助的同行表示衷心的感谢。

由于编者水平有限,书中内容难免有错误或不妥之处,恳请广大读者批评指正。

编　者
2015年5月

目 录

第1章 引论	1
1.1 基本要求与知识要点	1
一、误差	1
二、数值计算的误差估计	2
三、误差定性分析与避免误差危害	2
四、向量、矩阵和连续函数的范数	3
1.2 典型例题选讲	6
1.3 课后习题解答	11
第2章 非线性方程求根	18
2.1 基本要求与知识要点	18
一、二分法	18
二、简单迭代法	19
三、迭代法的加速收敛方法	20
四、牛顿迭代法	21
五、非线性方程组的牛顿迭代法	23
2.2 典型例题选讲	24
2.3 课后习题解答	31
第3章 解线性方程组的数值解法	39
3.1 基本要求与知识要点	39
一、直接法	39
二、迭代法	42
三、迭代法的收敛性	44
四、方程组的性态及误差分析	45
3.2 典型例题选讲	46
3.3 课后习题解答	52
第4章 插值法	67
4.1 基本要求与知识要点	67
一、插值法基本概念	67

二、拉格朗日插值	67
三、牛顿插值公式	68
四、埃尔米特插值多项式	71
五、分段低次插值	72
六、三次样条插值	73
4.2 典型例题选讲	74
4.3 课后习题解答	79
第5章 函数逼近及与曲线拟合	92
5.1 基本要求与知识要点	92
一、正交多项式及其应用	92
二、最佳平方逼近	94
三、最佳一致逼近多项式	96
四、曲线拟合的最小二乘法	97
5.2 典型例题选讲	99
5.3 课后习题解答	105
第6章 数值积分与数值微分	118
6.1 基本要求与知识要点	118
一、数值积分基本概念	118
二、牛顿-柯特斯公式	119
三、复化求积公式	120
四、龙贝格求积公式	121
五、高斯求积公式	122
六、数值微分	123
6.2 典型例题选讲	124
6.3 课后习题解答	132
第7章 代数特征值问题计算方法	143
7.1 基本要求与知识要点	143
一、幂法与反幂法	143
二、正交变换	145
三、QR方法	146
7.2 典型例题选讲	147
7.3 课后习题解答	153
第8章 常微分方程的数值解法	162
8.1 基本要求与知识要点	162
一、常微分方程数值解法的基本思想	162

二、欧拉方法	162
三、龙格-库塔方法	163
四、单步法的收敛性与稳定性	165
五、线性多步法	165
六、有关常微分方程其它形式的数值解	166
8.2 典型例题选讲	166
8.3 课后习题解答	172
参考文献	180

第1章 引 论

1.1 基本要求与知识要点

掌握误差的相关概念,明确误差的来源与分类,会计算误差和判断有效数字,理解误差定性分析的方法,掌握避免误差危害的若干原则,理解内积概念与性质,掌握向量、矩阵和连续函数的范数概念,掌握相关常用范数的计算.

一、误差

1. 误差的来源与分类

误差的来源是复杂多样的,主要有模型误差、观测误差、截断误差、舍入误差.

本文主要考虑截断误差和舍入误差.例如,要计算级数

$$1 + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \cdots + \frac{1}{n!} + \cdots = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!}$$

的值,当用计算机计算时,用前 n 项(有限项)的和来代替无穷项之和,即舍弃了第 n 项后面的无穷多项,因而产生了截断误差 $\sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{1}{k!}$.再例如,用 3.14159 表示圆周率 π 时产生的误差 0.0000026...,用 0.33333 表示 $1 \div 3$ 的运算结果时所产生的误差 0.0000033... 都是舍入误差.

2. 误差与有效数字

定义 1.1 设 x 为准确值, x^* 是 x 的近似值,则 $\varepsilon = x - x^*$ 称为近似值 x^* 的绝对误差,简称误差.

定义 1.2 设 x 为准确值, x^* 为 x 的近似值,且 x^* 的绝对误差为

$$|\varepsilon| = |x - x^*| \leq \delta(x^*),$$

则 $\delta(x^*)$ 称为 x^* 的绝对误差限.

定义 1.3 $\varepsilon_r = \frac{x - x^*}{x}$ 称为近似值 x^* 的相对误差,当 $x \neq 0$ 时, $\delta_r(x^*) = \frac{\delta(x^*)}{|x|}$ 称为 x^* 的相对误差限.

实际上精确值 x 往往未知,所以常常把 $\varepsilon_r = \frac{x - x^*}{x^*}$ 作为 x^* 的相对误差,而 $\delta_r(x^*) = \frac{\delta(x^*)}{|x^*|}$ 作为它的相对误差限.

定义 1.4 设 x^* 是 x 的一个近似数,表示为

$$x^* = \pm 10^k \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n,$$

每个 a_i ($i=1, 2, \dots, n$) 均为 $0, 1, \dots, 9$ 中的一个数字, $a_1 \neq 0, k$ 为整数, 如果 $|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{k-n}$, 则称 x^* 为 x 的具有 n 位有效数字的近似值.

定理 1.1 设 x 的近似值为 x^* , 则

(1) 如果 x^* 具有 n 位有效数字, 则其误差限为

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

(2) 如果

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

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

二、数值计算的误差估计

设一元函数 $f(x)$ 具有二阶连续导数, 自变量 x 的一个近似值为 x^* , 用 $f(x^*)$ 近似 $f(x)$, 则 $f(x^*)$ 的绝对误差限为

$$\delta f(x^*) \approx |f'(x^*)| \delta(x^*),$$

相对误差限为

$$\delta_r f(x^*) \approx \left| \frac{f'(x^*)}{f(x^*)} \right| \delta(x^*).$$

对多元函数 $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, 若自变量的近似值为分别是 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$, 则 $f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ 的绝对误差限为

$$\delta f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) \approx \sum_{k=1}^n \left| \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_k} \right| \delta(x_k^*),$$

其相对误差限为

$$\delta_r f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) \approx \sum_{k=1}^n \left| \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_k} \right| \frac{\delta(x_k^*)}{|f(x_1^*, \dots, x_n^*)|}.$$

一般地, 近似值 x_1^* 及 x_2^* 的四则运算结果的误差估计为

$$\delta(x_1^* \pm x_2^*) = \delta(x_1^*) + \delta(x_2^*);$$

$$\delta(x_1 x_2) = |x_2^*| \delta(x_1^*) + |x_1^*| \delta(x_2^*);$$

$$\delta\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) \approx \frac{|x_2^*| \delta(x_1^*) + |x_1^*| \delta(x_2^*)}{|x_2^*|^2}, x_2^* \neq 0.$$

三、误差定性分析与避免误差危害

1. 误差定性分析

对于一个数值问题, 往往由于问题本身, 如果输入数据有微小扰动(即误差), 引起输出数据(即问题解)相对误差很大, 这就是病态问题. 对于函数 $f(x)$, 若 x 的近似值为 x^* , 其相

对误差为 $\frac{x - x^*}{x^*}$, 函数值 $f(x^*)$ 的相对误差为 $\frac{f(x) - f(x^*)}{f(x^*)}$, 它们相对误差比的绝对值为

$$\left| \frac{[f(x) - f(x^*)]/f(x^*)}{(x - x^*)/x^*} \right| \approx \left| \frac{x^* f'(x^*)}{f(x^*)} \right| = C_p,$$

式中: C_p 为计算函数值 $f(x)$ 的条件数. 一般情形下, 若条件数 $C_p \geq 10$, 则认为是问题病态, C_p 越大, 病态越严重.

算法的计算复杂性是指在达到给定精度时, 该算法所需的计算量和所占的内存空间. 前者称为时间复杂性, 后者称为空间复杂性.

一个算法如果输入数据有误差, 而在计算过程舍入误差不增长, 则称此算法是数值稳定的, 否则, 称算法是不稳定的.

2. 避免误差危害的若干原则

数值计算中既要注意病态问题和数值算法稳定性, 还应尽量避免误差危害, 防止有效数字的损失, 通常运算中应注意以下若干原则:

- (1) 简化计算步骤, 减少运算次数.
- (2) 避免两个相近数的相减, 以免有效数字损失.
- (3) 避免除数的绝对值远小于被除数的绝对值.
- (4) 注意运算次序, 防止大数“吃掉”小数.

四、向量、矩阵和连续函数的范数

1. 内积

定义 1.5 设 $x, y \in \mathbb{R}^n$ 或 \mathbb{C}^n , $x = (x_1, \dots, x_n)^T$, $y = (y_1, \dots, y_n)^T$, 实数 $(x, y) = \sum_{i=1}^n x_i y_i$ 或复数 $(x, y) = y^H x = \sum_{i=1}^n x_i \bar{y}_i$ ($y^H = \bar{y}^T$, \bar{y} 为 y 的共轭) 称为向量 x 与 y 的内积.

内积有以下性质:

- (1) $(x, x) \geq 0$ 当且仅当 $x = 0$ 时等号成立;
- (2) $(\lambda x, y) = \lambda(x, y)$, $\lambda \in \mathbb{R}$ 或 $(\lambda x, y) = \bar{\lambda}(x, y)$, $\lambda \in \mathbb{C}$;
- (3) $(x, y) = (y, x)$, 或 $(x, y) = \overline{(y, x)} x$, $y \in \mathbb{C}^n$;
- (4) $(x + y, z) = (x, z) + (y, z)$, $x, y, z \in \mathbb{R}^n$;
- (5) $|(x, y)|^2 \leq (x, x)(y, y)$ (柯西-施瓦兹不等式)

定义 1.6 设 $\rho(x)$ 是定义在 (a, b) 上的非负函数, 且满足:

- (1) $\int_a^b |x|^n \rho(x) dx$ 存在 ($n = 0, 1, 2, \dots$);

- (2) 对非负的连续函数 $g(x)$, 若 $\int_a^b g(x) \rho(x) dx = 0$.

则在 (a, b) 上有 $g(x) = 0$, 称 $\rho(x)$ 为 (a, b) 上的权函数.

定义 1.7 设 $f(x), g(x)$ 为 $[a, b]$ 上的连续函数, $\rho(x)$ 为 (a, b) 上的权函数, 称

$$(f, g) = \int_a^b f(x) g(x) \rho(x) dx$$

为函数 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的内积. 特别当 $\rho(x) = 1$ 时, 上式变为

$$(f, g) = \int_a^b f(x)g(x) dx.$$

连续函数的内积满足

- (1) 对称性: $(f, g) = (g, f)$;
- (2) 齐次性: $(\lambda f, g) = \lambda(f, g), \lambda \in \mathbb{R}$;
- (3) 可加性: $(f+g, u) = (f, u) + (g, u), f, g, u \in C[a, b]$;
- (4) 正定性: $(f, f) \geq 0$, 当且仅当 $f(x) = 0$ 时, $(f, f) = 0$.

定理 1.2 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 在 $[a, b]$ 上线性无关的充要条件为

$$\begin{vmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{vmatrix} \neq 0.$$

2. 向量的范数

定义 1.8 如果向量 $x \in \mathbb{R}^n$ 的某个实值函数记作 $\|x\|$, 若满足以下条件:

- (1) $\|x\| \geq 0$ 当且仅当 $x = 0$ 时等号成立(正定性);
- (2) $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|, \lambda \in \mathbb{R}$ (齐次性);
- (3) $\|x+y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (三角不等式).

则称 $\|x\|$ 是 \mathbb{R}^n 上的一个向量范数. 由(3)可推出不等式

$$|\|x\| - \|y\|| \leq \|x-y\|$$

下面给出几种常用的向量范数, 设 $x = (x_1, \dots, x_n)^T$, 定义

$$\begin{aligned} \|x\|_1 &= \sum_{i=1}^n |x_i| \quad (1-\text{范数}), \\ \|x\|_2 &= \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{1/2} \quad (2-\text{范数}), \\ \|x\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \quad (\infty-\text{范数}). \end{aligned}$$

更一般地还可定义

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p} \quad (p-\text{范数}).$$

容易说明上述三种范数是 p -范数的特殊情况($p=1, 2, \infty$, 且 $\|x\|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \|x\|_p$).

定理 1.3 (向量范数的连续性) 设 $N(x) = \|x\|$ 是 \mathbb{R}^n 上任一种向量范数, 则 $N(x)$ 是向量 x 的分向量 x_1, x_2, \dots, x_n 的连续函数.

定义 1.9 设 $\|\cdot\|_s$ 与 $\|\cdot\|_t$ 是 \mathbb{R}^n 上的两种向量范数, 如果存在常数 $c_1, c_2 > 0$, 对所有 $x \in \mathbb{R}^n$, 有

$$c_1 \|x\|_s \leq \|x\|_t \leq c_2 \|x\|_s,$$

则称 $\|\cdot\|_s$ 和 $\|\cdot\|_t$ 是 \mathbb{R}^n 上等价的范数.

定理 1.4 \mathbb{R}^n 上任意两种范数是等价的.

设 $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T, x = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$, 由范数的等价性, 若向量序列在一种

范数下收敛,则在其他范数下也收敛.因此 $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x} \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i$.

3. 矩阵的范数

定义 1.10 如果对 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 上任一矩阵 A 的某个非负实函数记为 $\|A\|$,满足以下条件:对于任意的 $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 和 $\alpha \in \mathbb{R}$,有

- (1) $\|A\| \geq 0$ 当且仅当 $A=0$ (零矩阵)时等号成立;
- (2) $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$;
- (3) $\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|$;
- (4) $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$,

则称 $\|A\|$ 为矩阵 A 的范数.

设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$,常用的矩阵范数有

$$\begin{aligned}\|A\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad (A \text{ 的行范数}), \\ \|A\|_1 &= \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad (A \text{ 的列范数}), \\ \|A\|_2 &= \sqrt{\rho(A^T A)} \quad (A \text{ 的 } 2-\text{范数}), \\ \|A\|_F &= \left(\sum_{i,j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{1/2} \quad (A \text{ 的 Frobenius 范数,简称 F - 范数}),\end{aligned}$$

式中: $\rho(\cdot)$ 为矩阵的谱半径,即 $\rho(A) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$,其中 λ_i 是 A 的特征值.

定义 1.11 对于给定的 \mathbb{R}^n 上一种向量范数 $\|\mathbf{x}\|$ 和 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 上一种矩阵范数 $\|A\|$,若有

$$\|Ax\| \leq \|A\| \|\mathbf{x}\|, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, A \in \mathbb{R}^{n \times n},$$

则称上述矩阵范数与向量范数相容.

还可通过已知的向量范数来定义与之相容的矩阵范数.

设 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, A \in \mathbb{R}^{n \times n}$,当给定向量范数 $\|\cdot\|_v$ (如 $v=1, 2$ 或 ∞)时可定义

$$\|A\|_v = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_v}{\|\mathbf{x}\|_v} = \max_{\|\mathbf{x}\|_v=1} \|Ax\|_v.$$

称为由向量范数导出的矩阵范数或算子范数.

定理 1.5 设 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\|\cdot\|_v$ 是 \mathbb{R}^n 上的一种向量范数,则由向量范数导出的矩阵范数 $\|A\|_v$ 是 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 上的一种矩阵范数,且满足相容性条件 $\|Ax\|_v \leq \|A\|_v \|\mathbf{x}\|_v$.

定理 1.6 设 $\|\cdot\|$ 为 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 上任一种(无论是否与向量范数相容)矩阵范数,则对任何 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$,有

$$\rho(A) \leq \|A\|.$$

反之,对任意的 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 及 $\varepsilon > 0$,至少存在一种算子范数 $\|\cdot\|_\varepsilon$ 使

$$\|A\|_\varepsilon \leq \rho(A) + \varepsilon.$$

定理 1.7 (矩阵范数等价性)对 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 上的任两种数 $\|\cdot\|_s$ 及 $\|\cdot\|_t$,存在常数 $c_1, c_2 > 0$ 使

$$c_1 \|A\|_s \leq \|A\|_t \leq c_2 \|A\|_s.$$

定理 1.8 设 $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 如 $\|B\| < 1$, 则 $I \pm B$ 非奇异, 且

$$\|(I \pm B)^{-1}\| \leq \frac{\|I\|}{1 - \|B\|},$$

式中: $\|\cdot\|$ 指矩阵的算子范数.

4. 连续函数的范数

在 $C[a, b]$ 中定义了内积后, 则

$$(f, f) = \int_a^b f^2(x) \rho(x) dx$$

为一个非负值, 因此有

定义 1.12 设 $f(x) \in C[a, b]$, $\|f\|$ 为某非负实数, 若满足

- (1) 正定性: $\|f\| \geq 0$, 且 $\|f\| = 0$ 当且仅当 $f(x) = 0$;
- (2) 齐次性: 对任意实数 α , 都有 $\|\alpha f\| = |\alpha| \|f\|$;
- (3) 三角不等式: 对任意 $f, g \in C[a, b]$, 都有 $\|f+g\| \leq \|f\| + \|g\|$.

则称 $\|f\|$ 为连续函数的范数.

常用的连续函数的范数有

$$\|f(x)\|_{\infty} = \max_{a \leq x \leq b} |f(x)| \quad (\infty - \text{范数}),$$

$$\|f(x)\|_1 = \int_a^b |f(x)| \rho(x) dx \quad (1 - \text{范数}),$$

$$\|f(x)\|_2 = \sqrt{(f, f)} \quad (2 - \text{范数(欧几里得范数)}).$$

1.2 典型例题选讲

例 1.1 设 $x = 108.57 \ln t$, 其近似值 x^* 的绝对误差 $\varepsilon(x^*) \leq 0.1$, 证明 t^* 的相对误差 $\varepsilon_r(t^*) < 0.1\%$.

证 由 $\varepsilon(x^*) = 108.57(\ln t - \ln t^*) = 108.57 \ln \left(\frac{t}{t^*} \right) \leq 0.1$, 得

$$0 < \frac{t}{t^*} \leq e^{\frac{0.1}{108.57}}$$

$$\varepsilon_r(t^*) = \frac{t - t^*}{t^*} = \frac{t^*}{t} - 1 \leq e^{\frac{0.1}{108.57}} - 1 \approx 9.21 \times 10^{-4} < 0.1\%.$$

例 1.2 要使 $\sqrt{6}$ 的近似值的相对误差限小于 0.1% , 需取几位有效数字?

解 方法 1: 因为 $\sqrt{6} = 2.449\cdots$, 有 $a_1 = 2$, 设近似值 x^* 有 n 位有效数字, 由定理 1.1 得

$$\delta_r(x^*) = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} = \frac{1}{4} \times 10^{-(n-1)}$$

于是

$$\frac{1}{4} \times 10^{-(n-1)} < 1 \times 10^{-3}$$

注意到 $\frac{1}{4} < 1$, 取 $n-1=3$, 得 $n=4$, 故需取 4 位有效数字即可.

方法 2: 根据相对误差限 $\delta_r(x^*) = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} = \frac{\delta(x^*)}{|x^*|}$, 有 $\delta(x^*) = \delta_r(x^*) |x^*|$, 所以

$$\frac{1}{2} \times 10^{-3} \times 2.449\cdots = 0.0012247\cdots > 0.0005 = \frac{1}{2} \times 10^{-3} = \delta(x^*)$$

则 $k - n = -3$, 这里 $k = 1$, 从而 $n = 4$, 故取 4 位有效数字, $x^* = 2.449$.

方法 3: 在方法 1 中, 定理对所有具有 n 位有效数字的近似值都正确, 故对误差估计偏大; 在方法 2 中, 取绝对误差限确定有效数字 n 也是偏大的. 对于本例, 实际上, 取 3 位有效数字 2.45 试算, 其相对误差为

$$\frac{|\sqrt{6} - 2.45|}{2.45} = 0.000208 < 0.1\%$$

实际上已满足要求.

例 1.3 设 $x_1 = 1.21, x_2 = 3.65, x_3 = 9.71$ 均是具有 3 位有效数字的近似值, 判断 $x_1 + x_2 + x_3$ 有几位有效数字, 试估算 $x_1 x_2 + x_3$ 的相对误差限.

$$\text{解 } |\varepsilon(x_1)| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}, |\varepsilon(x_2)| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}, |\varepsilon(x_3)| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}.$$

$$\begin{aligned} |\varepsilon(x_1 + x_2 + x_3)| &\approx |\varepsilon(x_1) + \varepsilon(x_2) + \varepsilon(x_3)| \\ &\leq |\varepsilon(x_1)| + |\varepsilon(x_2)| + |\varepsilon(x_3)| = 1.5 \times 10^{-2} < \frac{1}{2} \times 10^{-1}, \end{aligned}$$

而 $x_1 + x_2 + x_3 = 14.57 = 0.1457 \times 10^2$, 故 $x_1 + x_2 + x_3$ 有 3 位有效数字.

又有

$$\varepsilon(x_1 x_2 + x_3) \approx \varepsilon(x_1 x_2) + \varepsilon(x_3) \approx x_2 \varepsilon(x_1) + x_1 \varepsilon(x_2) + \varepsilon(x_3),$$

所以

$$\begin{aligned} |\varepsilon(x_1 x_2 + x_3)| &\leq x_2 |\varepsilon(x_1)| + x_1 |\varepsilon(x_2)| + |\varepsilon(x_3)| \\ &\leq 3.65 \times \frac{1}{2} \times 10^{-2} + 1.21 \times \frac{1}{2} \times 10^{-2} + \frac{1}{2} \times 10^{-2} = 2.93 \times 10^{-2}, \end{aligned}$$

于是

$$|\varepsilon_r(x_1 x_2 + x_3)| = \left| \frac{\varepsilon(x_1 x_2 + x_3)}{x_1 x_2 + x_3} \right| \leq \frac{2.93 \times 10^{-2}}{1.21 \times 3.65 + 9.71} = 0.2074 \times 10^{-2}.$$

例 1.4 为了使计算

$$y = 11 + \frac{3}{x-1} + \frac{40}{(x-1)^2} - \frac{98}{(x-1)^3}$$

的乘除法运算次数尽量少, 应将表达式改写成怎样的形式?

解 设 $t = \frac{1}{x-1}$, 则 $y = 11 + (3 + (40 - 98t)t)t$, 共计四次乘法、一次除法. 在数值计算中, 应注意简化运算步骤, 减少运算次数, 使计算量尽可能小.

例 1.5 计算下列各式时, 采用何种方法计算能使计算结果具有较高的精度?

$$(1) \sqrt[3]{x+1} - \sqrt[3]{x}, x \gg 1; \quad (2) \sin x - \tan x, x \neq 0, |x| \ll 1.$$

解 两个相近数相减, 会造成有效数字损失, 为此作以下等价变形:

$$(1) \sqrt[3]{x+1} - \sqrt[3]{x} = \frac{1}{\sqrt[3]{(x+1)^2} + \sqrt[3]{(x+1)x} + \sqrt[3]{x^2}}, \quad x \gg 1.$$

$$\begin{aligned}(2) \sin x - \tan x &= \frac{\sin x}{\cos x} (\cos x - 1) = \frac{\sin x}{\cos x} \left(-2 \sin^2 \frac{x}{2} \right) \\&= -2 \frac{\sin x}{\cos x} \sin^2 \frac{x}{2}, \quad x \neq 0, |x| \ll 1.\end{aligned}$$

例 1.6 建立下列积分的递推关系式,计算积分并分析其误差传播.

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx, \quad n = 0, 1, \dots, 8.$$

解 由于

$$I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n},$$

可得两个递推计算方法.

方法 1: 正向递推计算公式, 即

$$I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1}, \quad n = 1, 2, \dots, 8,$$

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln 6 - \ln 5 \approx 0.1823.$$

方法 2: 逆向递推计算公式, 即

$$I_{n-1} = -\frac{1}{5}I_n + \frac{1}{5n}, \quad n = 8, 7, \dots, 1.$$

下面求方法 2 的初值, 利用广义积分中值定理

$$I_n = \frac{1}{\xi+5} \int_0^1 x^n dx = \frac{1}{\xi+5} \cdot \frac{1}{n+1}, \quad \xi \in [0, 1],$$

于是有

$$\frac{1}{6(n+1)} \leq I_n \leq \frac{1}{5(n+1)},$$

可取初值

$$I_8 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{54} + \frac{1}{45} \right) = 0.02037.$$

取 4 位有效数字计算, 两种方法的计算结果如表 1-1 所列.

表 1-1 计算结果对比

I_n	方法 1	方法 2	准确值	I_n	方法 1	方法 2	准确值
I_0	0.1823	0.1823	0.1823	I_5	0.09575	0.02846	0.02847
I_1	0.08850	0.08839	0.08839	I_6	-0.3121	0.02439	0.02433
I_2	0.05750	0.05804	0.05804	I_7	-1.703	0.02093	0.02123
I_3	0.04583	0.04314	0.04314	I_8	-8.392	0.02037	0.01884
I_4	0.02085	0.03431	0.03431				

对比计算结果可以看出,方法1在 I_6 时已为负值,显然与 $I_n > 0$ 矛盾,事实上 I_4 和准确值相比已经连1位有效数字也没有了.而方法2在初值 I_8 时虽然也没有有效数字,但倒推计算到 I_0 时各位都是有效数字.实际上从递推计算公式可以看出,方法1的每步计算误差都扩大5倍,而方法2逆向迭代的结果是每次迭代误差都缩小为原来的 $\frac{1}{5}$ 倍,因此方法2逆向递推计算是稳定的算法.

例1.7 建立计算积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n + 1}{4x + 1} dx, n = 0, 1, 2, \dots$$

的稳定的递推算法,并证明算法的稳定性.

$$\text{解 } I_0 = \int_0^1 \frac{2}{4x + 1} dx = \frac{1}{2} \ln 5,$$

$$\begin{aligned} I_n &= \int_0^1 \frac{x^n + 1}{4x + 1} dx = \frac{1}{4} \int_0^1 \frac{(4x^n + x^{n-1}) - (x^{n-1} + 1) + 5}{4x + 1} dx \\ &= \frac{1}{4} \int_0^1 x^{n-1} dx - \frac{1}{4} \int_0^1 \frac{x^{n-1} + 1}{4x + 1} dx + \frac{1}{4} \int_0^1 \frac{5}{4x + 1} dx \\ &= \frac{1}{4n} - \frac{1}{4} I_{n-1} + \frac{5}{16} \ln 5 = \frac{1}{4n} - \frac{1}{4} I_{n-1} + \frac{5}{8} I_0, \end{aligned}$$

得递推算法

$$I_n = \frac{1}{4n} - \frac{1}{4} I_{n-1} + \frac{5}{8} I_0, I_0 = \frac{1}{2} \ln 5, n = 1, 2, \dots$$

设 \bar{I}_0 是 I_0 的一个近似值,则实际计算公式为

$$\bar{I}_n = \frac{1}{4n} - \frac{1}{4} \bar{I}_{n-1} + \frac{5}{8} \bar{I}_0,$$

记 $e_n = I_n - \bar{I}_n$,则得误差公式

$$e_n = -\frac{1}{4} e_{n-1} + \frac{5}{8} e_0, n = 1, 2, \dots$$

改写上式并递推下去,得

$$\begin{aligned} e_n - \frac{1}{2} e_0 &= -\frac{1}{4} \left(e_{n-1} - \frac{1}{2} e_0 \right) \\ &= \left(-\frac{1}{4} \right)^2 \left(e_{n-2} - \frac{1}{2} e_0 \right) = \dots = \left(-\frac{1}{4} \right)^n \left(e_0 - \frac{1}{2} e_0 \right) = \left(-\frac{1}{4} \right)^n \frac{1}{2} e_0, \end{aligned}$$

于是

$$e_n = \frac{1}{2} \left[1 - \left(-\frac{1}{4} \right)^n \right] e_0,$$

因此

$$|e_n| = \left| \frac{1}{2} \left[1 - \left(-\frac{1}{4} \right)^n \right] e_0 \right| \leq \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{4} \right) |e_0| = \frac{5}{8} e_0,$$

从而递推算法稳定.

例 1.8 已知 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$, 计算 $\|A\|_p, p=1, 2, \infty$, 并解释它们满足矩阵从属范数的定义: $\|A\|_p = \max_{\|\mathbf{x}\|_p=1} \|A\mathbf{x}\|_p, p=1, 2$.

解 由公式易得 $\|A\|_1 = 2, \|A\|_\infty = 2$. 又

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix},$$

其特征值 λ 满足 $\det(\lambda I - A^T A) = 0$, 即 $\lambda^2 - 4\lambda = 0$, 得 $\lambda = 0, 4$. $\rho(A^T A) = 4$, 于是 $\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)} = 2$.

设 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T$, 则 $A\mathbf{x} = (x_1 + x_2, x_1 + x_2)^T$, 于是

$$\|A\mathbf{x}\|_1 = 2|x_1 + x_2| \leq 2(|x_1| + |x_2|) = 2\|\mathbf{x}\|_1,$$

且当 x_1 和 x_2 同号时等号成立, 所以当 $\|\mathbf{x}\|_1 = 1$ 时, $\|A\mathbf{x}\|_1$ 的最大值为 2, 即 $\|A\|_1 = \max_{\|\mathbf{x}\|_1=1} \|A\mathbf{x}\|_1 = 2$.

另一方面, 有

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}, \|A\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{2(x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2)},$$

在条件 $x_1^2 + x_2^2 = 1$ 下, 可知仅当 $x_1 = x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 时, $\|A\mathbf{x}\|_2$ 取得最大值, 即

$$\|A\|_2 = \max_{\|\mathbf{x}\|_2=1} \|A\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{2\left(\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2} = 2.$$

由本例可知, 如果用定义来求矩阵的从属范数, 比较繁琐且计算量大, 而用计算公式求解, 则较为简便.

例 1.9 设 A 是非奇异矩阵, λ 是 A 的任一特征值, $\|A\|$ 是相容矩阵范数, 证明:

$$(1) \quad \|I\| \geq 1; \quad (2) \quad \frac{1}{\|A^{-1}\|} \leq |\lambda| \leq \|A\|.$$

这里 I 表示单位矩阵.

证明 (1) 方法 1: $A = AI$, $\|A\| = \|AI\| \leq \|A\| \cdot \|I\|$, 而 A 非奇异, $\|A\| > 0$, 从而 $\|I\| \geq 1$.

方法 2: 易知单位矩阵的谱半径 $\rho(I) = 1$, 且 $\rho(I) \leq \|I\|$, 因此 $\|I\| \geq 1$.

(2) 设 \mathbf{x} 是相应于 A 的特征值 λ 的特征向量, 则 $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$, 由向量范数定义及矩阵范数与向量范数的相容性, 得

$$|\lambda| \|\mathbf{x}\| = \|\lambda\mathbf{x}\| = \|A\mathbf{x}\| \leq \|A\| \|\mathbf{x}\|,$$

由于 $\|\mathbf{x}\| > 0$, 于是 $|\lambda| \leq \|A\|$.

因 A 非奇异, 故 A^{-1} 存在, $\lambda \neq 0$, 由 $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ 知, $A^{-1}\mathbf{x} = \frac{1}{\lambda}\mathbf{x}$, 同理 $\frac{1}{|\lambda|} \leq \|A^{-1}\|$. 因此

有

$$\frac{1}{\|A^{-1}\|} \leq |\lambda| \leq \|A\|.$$