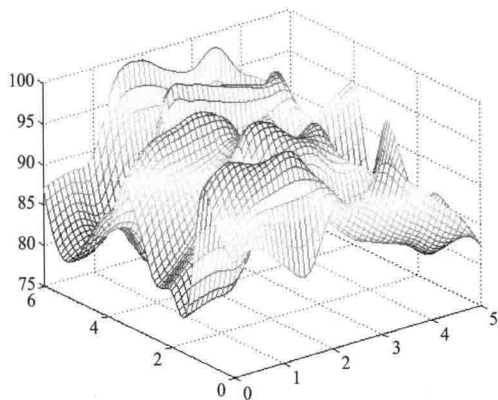




普通高等教育创新型人才培养规划教材



工程数值分析引论

GONGCHENG SHUZHI
FENXI YINLUN

配有
电子课件
习题答案

主 编 李郴良 李姣芬
副主编 彭丰富 李光云



北京航空航天大学出版社
BEIHANG UNIVERSITY PRESS



普通高等教育创新型人才培养规划教材

工程数值分析引论

主 编 李 郴 良 李 姣 芬
副主编 彭 丰 富 李 光 云

北京航空航天大学出版社

内 容 简 介

本书基于源自科学与工程中的数学问题,主要介绍以下几个方面的内容:误差及算法的稳定性、线性方程组的直接解法与迭代解法、函数的插值与逼近、数值积分与微分、非线性方程(组)的数值解法、特征值问题的数值解法和常微分方程初值问题的数值解法。本书分为理论知识部分和实验部分,两者各有侧重,相辅相成。

本书适合数学、力学、计算机等理工科的本科生,以及理工科各专业的硕士研究生使用,也可供从事科学计算的研究者参考。

本书配有教学课件和习题解答供读者参考,有需要者,请发邮件至 goodtextbook@126.com 或致电(010)82317037 申请索取。

图书在版编目(CIP)数据

工程数值分析引论 / 李郴良,李姣芬主编. —北京:
北京航空航天大学出版社,2015.4

ISBN 978-7-5124-1744-1

I. ①工… II. ①李… ②李… III. ①数值计算—数值分析—高等学校—教材 IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 064544 号

版权所有,侵权必究。

工程数值分析引论

主 编 李郴良 李姣芬

副主编 彭丰富 李光云

责任编辑 王慕冰

*

北京航空航天大学出版社出版发行

北京市海淀区学院路 37 号(邮编 100191) <http://www.buaapress.com.cn>

发行部电话:(010)82317024 传真:(010)82328026

读者信箱:goodtextbook@126.com 邮购电话:(010)82316936

北京兴华昌盛印刷有限公司印装 各地书店经销

*

开本:787×1 092 1/16 印张:15.25 字数:390 千字

2015 年 6 月第 1 版 2015 年 6 月第 1 次印刷 印数:2 000 册

ISBN 978-7-5124-1744-1 定价:30.00 元

前 言

近年来,随着计算机科学技术的迅速发展,以及计算机的普及和应用,许多高等学校的理工科学生都要学习“数值分析”课程。作为数学、力学、计算机等理工科的本科生和理工科各专业研究生的主要专业基础课程,我们从一开始就坚持融合现代教育技术,把课程的培养目标定位在培养具有科学计算能力的高素质人才,对教学内容和教学手段进行了一系列的改革。例如:开展实验教学,在课程中安排了16学时的实验,将理论教学和实践教学相统一,提高学生的动手能力;编写计算机辅助教学的多媒体软件,开发网络教学软件,为学生课外学习提供教学资源,逐步将课程建设成为一门立体化的广西壮族自治区精品课程。

通过数年的教学实践,我们发现课程教学存在一些问题,具体表现在以下两方面:

(1) 偏重理论知识的教学,知识与实际应用结合不紧密,导致学生因为不能感性认识到知识的应用价值而缺乏学习兴趣,从而导致教学质量不佳。

(2) 实验教学内容设计的应用背景不强,仅是为了传授知识而设计一些实验内容,对学生了解知识的应用及开拓思维的影响较大,而且学生的学习主动性不够。

S. C. Chapra 教授在《工程数值方法》中广泛地使用各种工程领域中的实例和案例进行分析,从而激发学生学习的兴趣。白峰杉教授在《数值计算引论》中也引入了应用举例、交互实验等,通过介绍科学计算在其中的作用来激发学生的学习兴趣。基于这些做法,我们结合学生的特点,通过与学生座谈以及相关学科专业教师的座谈,选用适当的工程问题,作为背景引入,或者作为例子说明应用,或者作为数值实验问题设计实验,以达到理论与应用结合、学生能学以致用用的目的,增强学生学习的主动性。

全书分为理论与实验两大部分。其中理论部分主要介绍以下几个方面的内容:误差及算法的稳定性、线性方程组的直接解法与迭代解法、函数的插值与逼近、数值积分与微分、非线性方程(组)的数值解法、矩阵特征值问题的数值解法和常微分方程初值问题的数值解法。实验部分设计为7个模块,主要以算法编程训练为主,与理论部分相辅相成,互为补充。全书共分9章,李郴良编写第1章、第4章和第6章,李姣芬编写第2章、第3章和第8章,彭丰富编写第7章和第9章,李光云编写第5章。实验部分由李姣芬和李光云编写。

本书的编写特色如下:

(1) 应用性。结合学科专业特色,选用适当的工程问题作为背景引入,或者作



为例子说明应用,或者作为数值实验问题设计实验,以提高学生的学习兴趣。

(2) 实践性。以工程问题或趣味问题为例设计实验内容,编写相应的实验教学章节,计划课时 16 学时。数值分析课程的教学目的之一就是提高学生的计算机编程能力,并通过数值实验进一步理解算法的内涵。

(3) 启发性。本书试图通过设计一些由浅入深的问题,分析每种新方法的优缺点,了解新方法被发现的来龙去脉,给学生以思维上的启发与训练,培养学生初步分析问题与解决问题的能力。每章附有综述,让学生了解所学知识的应用性和最新研究成果,希望给对相关内容感兴趣的学生有一个引导作用。

(4) 知识性。选用一些有时代特征的问题,并介绍一些对本课程内容作出突出贡献的著名科学家,起到让学生了解相关数学史的作用。

本书在编写过程中得到桂林电子科技大学数学与计算科学学院的大力支持,北京航空航天大学出版社也给予了热情的帮助,在此表示衷心的感谢。

作 者

2014 年 10 月 19 日

目 录

第 1 章 绪 论	1
1.0 引 言	1
1.0.1 数值分析的意义	1
1.0.2 数值分析的内容	3
1.1 误 差	4
1.1.1 误差的来源	4
1.1.2 绝对误差和相对误差	4
1.1.3 有效数字	5
1.1.4 误差的传播	6
1.2 算法的稳定性	8
习题 1	11
第 2 章 线性方程组的直接解法	13
2.0 概 述	13
2.1 Gauss 消元法	15
2.1.1 顺序消元法	15
2.1.2 列选主元 Gauss 消元法	18
2.1.3 按比例主元消元法	21
2.2 矩阵的三角分解与应用	22
2.2.1 矩阵的 LU 分解	22
2.2.2 对称正定矩阵的 Cholesky 分解法(平方根法)	25
2.2.3 解三对角线性方程组的“追赶”法	27
2.3 直接方法的误差分析	28
2.3.1 向量范数和矩阵范数	28
2.3.2 矩阵的条件数和误差分析	31
2.4 综 述	35
习题 2	36
第 3 章 线性方程组的迭代解法	39
3.0 概 述	39
3.1 迭代法的一般理论	41
3.1.1 迭代公式的构造	41
3.1.2 迭代法的收敛性和误差估计	42
3.2 经典迭代法介绍	43



3.2.1 雅可比迭代法	43
3.2.2 高斯-赛德尔迭代法	45
3.2.3 逐次超松弛迭代法	47
3.2.4 经典迭代法的收敛条件	49
3.3 现代迭代法介绍	54
3.3.1 最速下降法	54
3.3.2 共轭梯度法	55
3.4 综 述	57
习题 3	58
第 4 章 函数插值	61
4.0 引 言	61
4.1 Lagrange 插值	63
4.1.1 Lagrange 插值介绍	64
4.1.2 余项误差	67
4.2 Newton 插值	70
4.2.1 差商的定义与性质	70
4.2.2 Newton 插值介绍	71
4.2.3 差分及等距节点 Newton 插值公式	74
4.3 Hermite 插值	76
4.4 分段插值与样条插值	81
4.4.1 多项式插值的缺陷与分段插值	81
4.4.2 三次样条函数插值	83
4.5 综 述	87
习题 4	87
第 5 章 最佳逼近	90
5.0 引 言	90
5.1 离散最小二乘逼近	91
5.1.1 最小二乘线性拟合	91
5.1.2 最小二乘多项式拟合	94
5.1.3 曲线拟合	96
5.2 最佳平方逼近	97
5.3 综 述	103
习题 5	103
第 6 章 数值积分与数值微分	106
6.0 引 言	106
6.1 牛顿-科茨求积分式	107
6.1.1 数值积分的基本思想	107



6.1.2	插值型求积法	109
6.1.3	牛顿-科茨求积公式介绍	110
6.1.4	代数精度	112
6.1.5	牛顿-科茨求积公式的截断误差及稳定性	113
6.2	复化求积公式	115
6.2.1	复化梯形求积公式	115
6.2.2	复化辛普森求积公式	117
6.3	龙贝格求积法	118
6.3.1	外推方法	118
6.3.2	龙贝格求积法介绍	119
6.4	高斯求积公式	121
6.4.1	高斯求积公式的基本理论	121
6.4.2	常用高斯求积公式	123
6.4.3	高斯求积公式的余项与稳定性	125
6.5	数值微分	126
6.5.1	插值型求导公式	127
6.5.2	数值微分的外推算法	130
6.6	综 述	131
	习题 6	132
第 7 章	非线性方程和方程组的数值解法	135
7.0	引 言	135
7.1	方程求根的二分法	136
7.2	一元方程的不动点迭代法	137
7.2.1	不动点迭代法及其收敛性	138
7.2.2	局部收敛性和加速收敛法	141
7.3	一元方程的常用迭代法	144
7.3.1	牛顿迭代法	144
7.3.2	割线法与抛物线法	146
7.4	非线性方程组的数值解法	148
7.4.1	非线性方程组的不动点迭代法	148
7.4.2	非线性方程组的牛顿法	151
7.4.3	非线性方程组的拟牛顿法	153
7.5	综 述	155
	习题 7	155
第 8 章	矩阵特征值问题的数值解法	158
8.0	引 言	158
8.1	矩阵特征值问题的有关理论	159
8.2	乘幂法和反幂法	160



8.2.1 乘幂法和加速方法	160
8.2.2 反幂法和原点位移	163
8.3 QR 算法	165
8.3.1 Householder 变换和 Givens 变换	165
8.3.2 矩阵正交相似于上 Hessenberg 阵	168
8.3.3 QR 算法及其收敛性	169
8.3.4 带原点位移的 QR 算法	173
8.4 Jacobi 方法	175
8.5 综 述	179
习题 8	180
第 9 章 常微分方程初值问题的数值解法	182
9.0 引 言	182
9.1 欧拉方法	183
9.1.1 欧拉方法及有关的方法	183
9.1.2 局部误差和方法的阶	186
9.2 龙格-库塔方法	187
9.2.1 龙格-库塔方法的基本思想	187
9.2.2 几类显式龙格-库塔方法	188
9.3 单步法的收敛性和稳定性	191
9.3.1 单步法的收敛性	191
9.3.2 单步法的稳定性	192
9.4 一阶微分方程组的数值解法	194
9.4.1 一阶微分方程组和高阶方程	194
9.4.2 刚性方程组	195
9.5 综 述	197
习题 9	197
实 验	200
实验 1 线性方程组求解	200
实验 2 函数插值	204
实验 3 函数拟合	208
实验 4 数值积分	212
实验 5 非线性方程的数值解法	216
实验 6 矩阵特征值问题的解法	220
实验 7 常微分方程数值解法	225
习题答案	229
参考文献	235

第1章 绪论

1.0 引言

1.0.1 数值分析的意义

随着现代科学技术的发展,人们的生活越来越方便,也越来越安全.

1. GPS 卫星定位系统

有了 GPS 卫星定位系统,人们在一个陌生的城市就不会成为一个睁眼瞎,可以很快捷地找到目的地. GPS 卫星定位系统的使用,离不开数学,尤其是数值计算方法. 假设你的 GPS 至少与 4 颗卫星相连,就可以确定你的方位,如图 1.0.1 所示. 设 c 表示光速,则有非线性方程组

$$\begin{cases} (x-x_1)^2 + (y-y_1)^2 + (z-z_1)^2 = [c(t-t_1)]^2 \\ (x-x_2)^2 + (y-y_2)^2 + (z-z_2)^2 = [c(t-t_2)]^2 \\ (x-x_3)^2 + (y-y_3)^2 + (z-z_3)^2 = [c(t-t_3)]^2 \\ (x-x_4)^2 + (y-y_4)^2 + (z-z_4)^2 = [c(t-t_4)]^2 \end{cases}$$

解这个非线性方程组就可以得到你的位置.

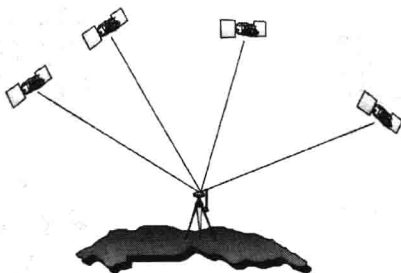


图 1.0.1 GPS 定位系统

2. 天气预报

我们先看新华网 2012 年的关于台风“启德”的一则报道:

新华网报道,据民政部、国家减灾委员会办公室 8 月 19 日 12 时初步统计,今年第 13 号台风“启德”已造成广东、广西、海南 3 省区 2 人死亡,2 人失踪,53 万人紧急转移.

为应对“启德”,8 月 16 日 9 时,中国气象局提升重大气象灾害(台风)Ⅳ级应急响应为Ⅱ级. 16 日 15 时,广东省气象灾害应急指挥部办公室将气象灾害(台风)应急响应提升为Ⅰ级,即台风最高级别预警. 广西壮族自治区气象灾害应急指挥部于 16 日 22 时提升重大气象灾害(台风)Ⅲ级应急响应为Ⅱ级. 海南省气象局于 16 日 8 时 50 分将热带气旋Ⅲ级应急响应提升为Ⅱ级.



受“启德”影响,海口海事局决定8月16日16时起,海峡线客船全部停航,各码头停止作业。广铁集团于16日16时起暂时停止预售17日广珠城际、广深城际、广深港高铁列车车票。南航将取消以下航班:8月17日CZ3330(湛江—广州)、CZ3323/4(广州—湛江—广州)。南方电网公司要求有关单位和部门严格执行值班制度,掌握安全生产动态,结合当地实际及时启动应急预案。

图1.0.2所示为台风“启德”卫星云图。

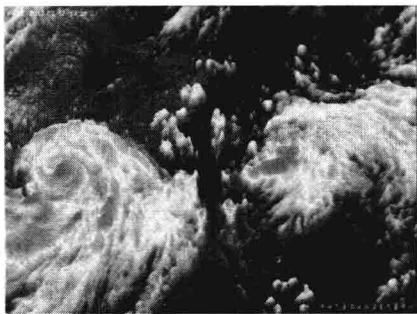


图 1.0.2 台风“启德”卫星云图

从报道来看,尽管台风“启德”对我国造成了一定的损失,但因为提前进行了预报,国家和当地政府及有关部门提前做了相应的应对措施,所以避免了重大灾难事故的发生。

传统的天气预报主要是在大量人工观测所积累的资料和经验的基础上来进行预报的。而现代天气预报则是根据观测到的物理状态,建立一组反映大气运动的非线性控制方程组。但这些方程规模大,结构复杂,难以用理论数学方法求解。1911年英国气象学家 Lewis Fry

Richardson(1881—1953)(见图1.0.3)提出用数值方法求解,从而进行天气预报。但当时只能靠人工进行计算,他没能实现愿望。随着计算机的出现,1950年,美国气象学家 Jule Gregory Charney(1917—1981)(见图1.0.4)利用原始的计算机 ENIAC,用12小时成功地计算了北美洲地区24小时天气预报图,从而揭开了用数值方法进行天气预报的序幕。



图 1.0.3 Lewis Fry Richardson



图 1.0.4 Jule Gregory Charney

3. Google 搜索引擎

互联网上信息浩如烟海,要准确地获取自己感兴趣的信息无异于大海捞针,所以需要一种优异的搜索服务。Google 搜索引擎就是这样一个搜索工具,它提供了最便捷的网上信息查询方法。通过对几十亿网页进行整理,Google 可为用户提供所需要的搜索结果,搜索时间通常不到半秒,而且搜索结果准确率极高。

Google 搜索引擎是由两位斯坦福大学的博士 Larry Page 和 Sergey Brin(见图1.0.5)于1998年创立的,其核心为他们首创的网页排序算法——PageRank 算法:

$$P_n = G^T P_0$$



其中 $G = \alpha(H + be^T/N) + (1-\alpha)ee^T/N$, 为 Google 矩阵, α 表示概率, b 表示指标向量, H 表示与互联网结构有关的矩阵, N 为互联网上的网页总数.

像这样的例子不胜枚举. 我们在享受这些成果所带来的实惠的时候, 不妨仔细分析其背后的数学知识. 无论是 GPS 和天气预报, 还是 Google 搜索引擎, 都离不开数值计算方法, 或者称数值分析.

数值分析在自然科学、社会科学、生命科学、医学、经济学及军事科学等学科中的作用越来越大, 在许多重要领域中已成为一种必不可少的工具, 并产生了一系列的交叉学科, 如计算物理、计算化学、计算生物学、计算气象学及计算材料学, 等等.

计算科学已和理论科学、实验科学并列为三大科学方法.

理论方法主要是用严密的数学模型来反映自然现象的客观规律, 并分析求出其准确解. 但实际上问题是很复杂的, 很多问题是不可能求出准确解的.

实验方法主要借助仪器设备等进行实验设计, 试图得到所观测的系统的信息, 发现规律. 但在实际问题中, 有些对象因尺度不是太大就是太小(如地球大气层和纳米系统), 不是太快就是太慢(如爆炸和腐蚀过程), 以致很难进行实验. 另外, 某些实验因环境安全而被禁止(如核试验).

随着计算机技术的发展, 计算科学方法可以帮我们进行数值天气预报, 可以进行核模拟试验, 可以模拟火灾现场, 可以让我们“看到”很小的物质, 等等. 通过科学计算, 可以选择最佳实验方案, 减少实验次数, 缩短研发时间, 节省研究资金. 计算科学突破了理论方法和实验方法的局限, 广泛应用于诸多重要领域.

我国著名的计算数学家石钟慈院士指出, 科学计算直接支援了一切基于技术的工业经济和基础科学研究, 因此很有必要学习数值分析.

1.0.2 数值分析的内容

数值分析如此重要, 那么, 它主要研究什么呢? 从上一小节的 3 个例子来看, 不外乎以下几个方面:

① 针对某类工程问题, 建立数学模型. 如天气预报中, 气象学家们根据大气内部的物理规律, 如大气动力学、热力学、质量守恒、水相变化规律等, 建立相应的数学模型, 用数理方法, 并借助计算机技术, 预测未来天气的变化.

② 构建求解数学模型的算法. 算法的研究是科学计算的主攻方向. 正因为 Larry Page 和 Sergey Brin 创立了 PageRank 算法, 才成就了今天著名的 Google 公司. 这说明算法的研究是非常重要的.

③ 在计算机上编写实现算法的程序.

④ 实现数值模拟和可视化, 如汽车安全性测试数值模拟实验和核模拟试验等.

在上述内容中, 数值算法的分析与设计是数值分析的核心内容. 本书将基于源自科学与工程中的数学问题, 主要介绍以下几个方面的内容:



图 1.0.5 Larry Page 和 Sergey Brin



- ① 误差及算法的稳定性;
- ② 线性方程组的直接解法与迭代解法;
- ③ 函数的插值与逼近;
- ④ 数值积分与微分;
- ⑤ 非线性方程(组)的数值解法;
- ⑥ 特征值问题的数值解法;
- ⑦ 常微分方程初值问题的数值解法.

1.1 误差

数值分析中第一个重要的概念是误差. 数值分析最主要的工作之一就是误差分析, 因为它研究的是数值解的逼近程度, 其本质就是误差.

1.1.1 误差的来源

误差的来源是很复杂的. 从上一节可知, 数值分析的内容之一是建立具体问题的数学模型. 但数学模型是在反映问题主要本质的基础上建立的, 是简化的近似模型, 所以数学模型本身包含着误差. 数学模型中通常还包含观测数据, 观测数据也有误差. 数学模型归结为数学问题后, 又要在计算机上实现计算. 在这个过程中就会有误差产生. 比如, 在 PageRank 算法中, Google 矩阵 G 的定义只考虑了主要因素, 而且偏好系数选取为 0.85, 这说明算法并不能完全描述网页排序的真实情况, 会存在模型误差. 同样, H 的元素值的确定、 P_n 中元素的计算等都存在观测误差、舍入误差等.

误差主要分为模型误差、观测误差、舍入误差、截断误差等.

截断误差: 当求一个级数的和或一个无穷序列的极限时, 取有限项来计算, 从而产生了误差, 这种误差通常称为截断误差或方法误差.

例如, 由 Taylor(泰勒)公式, 函数 $f(x)$ 可表示为

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1}$$

当 x 不大时, 可能只计算前 $n+1$ 项, 得近似公式为

$$f(x) \approx f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n$$

此近似公式的误差就是截断误差.

1.1.2 绝对误差和相对误差

因为有了误差, 准确值或真值与近似值之间存在以下关系:

$$\text{真值} = \text{近似值} + \text{误差}$$

不妨设 x 表示真值, x^* 为近似值, 误差用 $E(x)$ 表示, 则有

$$E(x) = x - x^* \quad (1.1.1)$$

我们称之为近似值的绝对误差, 简称为误差.

在实际应用中, 真值往往是未知的, 绝对误差也算不出来. 不过, 通常可以得到绝对误差的



一个上界值,我们称这个误差的上界值为近似值的绝对误差限.

定义 1.1.1 设 x 表示真值, x^* 为近似值,若正数满足

$$|E(x^*)| = |x - x^*| \leq \epsilon \quad (1.1.2)$$

则称 ϵ 为近似值 x^* 的一个绝对误差限,简称误差限.但误差和误差限的大小还不能完全说明近似值的精确程度.

例 1.1.1 假设对一座桥及桥上的一颗铆钉进行测量,测量结果分别为 9 999 cm 和 9 cm.若其真值分别为 10 000 cm 和 10 cm,则其绝对误差分别为

$$10\,000\text{ cm} - 9\,999\text{ cm} = 1\text{ cm}, \quad 10\text{ cm} - 9\text{ cm} = 1\text{ cm}$$

从结果来看,两者的绝对误差是一样的,是否表示这两者测量值的准确度是一样呢?对于桥来说,10 000 cm 才只有 1 cm 的误差,其准确度相对于铆钉的 10 cm 也有 1 cm 的误差来说要高得多了.这说明仅仅用绝对误差(限)不能准确地说明近似值的精确度,应该引入一个新的度量标准.我们再从这个例子入手,发现测量桥的误差与真值的比为 $\frac{1}{10\,000}$,测量铆钉的误差

与真值的比为 $\frac{1}{10}$.这恰好能很好地描述两者的精确度.也就是说,用表达式 $\frac{E(x^*)}{x}$ 就可以很好地表述近似值的精确度.这就是我们要介绍的近似值 x^* 的相对误差.

定义 1.1.2 设 x 表示真值, x^* 为近似值,称

$$\delta(x^*) = \frac{x - x^*}{x} \quad (1.1.3)$$

为近似值 x^* 的相对误差.

在实际应用中,常称 $\delta^*(x^*) = \frac{x - x^*}{x^*}$ 为近似值 x^* 的相对误差.实际上,若 $\delta(x^*)$ 较小,

$$\text{则 } \delta(x^*) - \delta^*(x^*) = \frac{x - x^*}{x} - \frac{x - x^*}{x^*} = [\delta(x^*)]^2 / [1 + \delta(x^*)] \approx 0.$$

定义 1.1.3 设 x 表示真值, x^* 为近似值,若存在正数满足

$$|\delta(x^*)| = \left| \frac{x - x^*}{x} \right| \leq \epsilon_r \quad (1.1.4)$$

则称 ϵ_r 为近似值 x^* 的一个相对误差限.

类似地,若 $\delta(x^*)$ 较小,则根据

$$|\delta^*(x)| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \epsilon_r^* \quad (1.1.5)$$

定义 ϵ_r^* 为近似值 x^* 的一个相对误差限.

1.1.3 有效数字

有效数字是数值分析中另一个重要的概念,它主要表示近似值中数字的可信度,从另一个角度来表示与准确值的误差关系.

例 1.1.2 设 $x = \pi = 3.141\,592\,6\cdots$,取两个近似值:

$$x^* = 3.14 = 0.314 \times 10^1, \quad y^* = 3.141\,6 = 0.314\,16 \times 10^1$$

则

$$|x - x^*| = 0.001\,592\,6 \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$



说明近似数 x^* 中 3, 1 和 4 这 3 个数字是可信的, 我们称之为近似数 x^* 的有效数字.

$$|x - y^*| = 0.000\,007\,35 \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

说明近似数 y^* 中 3, 1, 4, 1 和 6 是可信的, 故有 5 位有效数字.

我们再分析相对误差:

$$|\delta(x^*)| \leq \frac{0.5 \times 10^{-2}}{3.146} < 0.5 \times 10^{-2}, \quad |\delta(y^*)| \leq \frac{0.5 \times 10^{-4}}{3.146} < 0.5 \times 10^{-4}$$

这说明, 有效数字多的近似值比有效数字少的近似值准确度要高; 也就是说, 在数值分析中, 要尽可能保留近似值的有效数字.

定义 1.1.4 设 x 表示真值, x^* 为近似值, 若

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-n} \quad (1.1.6)$$

则称近似值 x^* 准确至小数点后 n 位, 并且近似值 x^* 最左边的第一个非零数字到小数点第 n 位的所有数字都称为有效数字.

有了有效数字的概念之后, 2.140 012 的两个近似值的写法是有区别的: 2.14 和 2.140 0, 前者有三位有效数字, 后者有五位有效数字. 准确值的有效数字可以看作有无限多位.

例 1.1.3 下面近似值的绝对误差都是 0.005:

$$x_1^* = 1.38, \quad x_2^* = -0.031\,2, \quad x_3^* = 0.86 \times 10^{-4}$$

问这些近似值各有几位有效数字?

解 因为每个数的绝对误差都是 0.5×10^{-2} , 故 x_1^* 有 3 位有效数字, 即 1, 3 和 8, x_2^* 只有一位有效数字 3, x_3^* 没有有效数字.

注:

(1) 设 x 近似值 x^* 一般表示形式为 $x^* = \pm 0.a_1a_2 \cdots a_n \times 10^m$ ($a_1 > 0$, 且 $0 \leq a_i \leq 9$, $i = 1, 2, \cdots, n$). 若

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \quad (1.1.7)$$

则称近似值 x^* 有 n 位有效数字.

在字长为 t 的十进制计算机中, 设 x 是四舍五入的机器数, 或称为浮点数, 可表示为

$$x = \pm 0.d_1d_2 \cdots d_t \times 10^s, \quad 0 \leq d_i \leq 9, (i = 1, 2, \cdots, t), d_1 > 0$$

(2) 设近似值 $x = \pm 0.a_1a_2 \cdots a_n \times 10^m$ 有 n 位有效数字, 则其相对误差限为

$$|\epsilon_r| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1} \quad (1.1.8)$$

(3) 设近似值 $x = \pm 0.a_1a_2 \cdots a_n \times 10^m$ 的相对误差限不大于

$$\frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-n+1} \quad (1.1.9)$$

则它至少有 n 位有效数字.

1.1.4 误差的传播

在数值分析过程中, 涉及数字之间的算术运算及函数值的运算. 此时, 误差是如何表现在这些过程中的呢?



1. 算术运算中的误差传播

设 x_1^* 是 x_1 的近似值, x_2^* 是 x_2 的近似值, 则

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \quad E(x_1^* \pm x_2^*) &= E(x_1^*) \pm E(x_2^*) \\ \delta(x_1^* \pm x_2^*) &= [\delta(x_1^*) \pm \delta(x_2^*)] / (x_1 \pm x_2) \end{aligned} \quad (1.1.10)$$

从相对误差运算公式可以发现, 如果两个同(异)号相近数和相减(加)时, $x_1 \pm x_2$ 很小, 从而使得相对误差 $\delta(x_1^* \pm x_2^*)$ 变得很大, 很容易丢失有效数字. 因此, 在具体计算时要避免两个同(异)号相近数和相减(加).

$$\textcircled{2} \quad E(x_1^* x_2^*) \approx x_1 E(x_2^*) + x_2 E(x_1^*) \quad (1.1.11)$$

$$\delta(x_1^* x_2^*) \approx \delta(x_1^*) + \delta(x_2^*)$$

$$\begin{aligned} E\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) &\approx \frac{-x_1 E(x_2^*) + x_2 E(x_1^*)}{x_2^2} \\ \delta\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) &\approx \delta(x_1^*) - \delta(x_2^*) \end{aligned} \quad (1.1.12)$$

从这组绝对误差运算公式可以发现, 当两个数相乘(除)时, 大因数(小除数)可能使积(商)的绝对误差变得很大. 因此, 在进行乘除法运算时, 要避免大因数(小除数)的乘(除).

2. 函数求值的误差传播

在计算函数值时, 也会因为自变量的误差产生误差传播. 设 $f(x)$ 具有二阶导数, 由 Taylor 公式有

$$|f(x) - f(x^*)| \leq |f'(x^*)(x - x^*)| + \frac{1}{2} |f''(\xi)(x - x^*)^2| \quad (\xi \text{ 介于 } x \text{ 与 } x^* \text{ 之间})$$

因为 $E(x) \leq |x - x^*|$ 很小, 故有

$$E(f(x^*)) \approx |f'(x^*)| E(x^*)$$

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

对于多元函数 $z = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, 误差分析有类似的结果:

$$E(z) \approx \sum_{k=1}^n \left| \frac{\partial f}{\partial x_k} \right| E(x_k)$$

$$\delta(z) \approx \sum_{k=1}^n \left| x_k \frac{\partial f}{\partial x_k} / f(x_k) \right| \delta(x_k)$$

例 1.1.4 设有 3 个三位有效数字的近似数:

$$x_1^* = 2.31, \quad x_2^* = 1.93, \quad x_3^* = 2.24$$

试计算 $p = x_1^* + x_2^* x_3^*$, $\epsilon(p)$ 和 $\epsilon_r(p)$, 并分析 p 的计算结果中有几位有效数字?

解

$$p = 2.31 + 1.93 \times 2.24 = 6.6332$$

$$\begin{aligned} |E(p)| &= |E(x_1^*) + E(x_2^* x_3^*)| \leq \\ &|E(x_1^*)| + |x_2^*| |E(x_3^*)| + |x_3^*| |E(x_2^*)| \leq \\ &0.005 + 0.005(1.93 + 2.24) = \\ &0.02585 \end{aligned}$$



$$|\delta(p)| = \frac{|E(p)|}{|p|} \leq \frac{0.025\ 85}{6.633\ 2} \approx 0.39\%$$

因为 $\epsilon(p) = 0.025\ 85 < 0.05$, 所以 $p = 6.633\ 2$ 中能有两位有效数字. 相对误差限 $\epsilon_r(p) = 0.39\%$.

1.2 算法的稳定性

由于在计算过程中, 初始数据产生的舍入误差总是存在的, 因此导致近似数的运算及函数值的计算中都会产生相应的误差, 从而影响最终计算结果的可靠性.

一个算法, 如果初始数据有误差, 而且计算过程中舍入误差不增长, 则称此算法为数值稳定的, 否则称之为数值不稳定的.

只有数值稳定的算法才有可能给出可靠的计算结果, 数值不稳定的算法可以说毫无实用价值.

从上一节误差的传播性质来看, 我们应该合理设计算法, 控制误差的传播.

例 1.2.1 解方程 $x^2 - (10^9 + 1)x + 10^9 = 0$.

解 此方程的精确解为 $x_1 = 10^9, x_2 = 1$.

用求根公式

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

来计算, 如果是在字长为 8 的十进制计算机上进行运算, 则这时

$$-b = 10^9 + 1 = 0.1 \times 10^{10} + 0.000\ 000\ 000\ 1 \times 10^{10}$$

上式中第二项由于计算机字长的限制, 在计算机舍入运算时为

$$-b = 0.1 \times 10^{10} + 0.000\ 000\ 00 \times 10^{10} = 0.1 \times 10^{10} = 10^9$$

$$\sqrt{b^2 - 4ac} = \sqrt{[-(10^9 + 1)]^2 - 4 \times 10^9} = 10^9$$

于是

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{10^9 + 10^9}{2} = 10^9$$

$$x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{10^9 - 10^9}{2} = 0$$

我们发现, 计算的结果 $x_2 = 0$ 与精确解 $x_2 = 1$ 相差很大, 这说明直接利用求根公式来求解方程是不稳定的. 其原因是机器字长的限制, 当计算机进行加、减运算时, 绝对值相对小的数被大数给“吃掉”了, 从而造成计算结果的失真. 因此, 为提高计算结果的数值稳定性, 必须改进算法.

由于 $x_1 = 10^9$ 的计算是可靠的, 故可以利用根与系数的关系式 $x_1 x_2 = \frac{c}{a}$ 来计算 x_2 , 即

$$x_2 = \frac{c}{a} \cdot \frac{1}{x_1} = \frac{10^9}{1 \times 10^9} = 1$$

这与精确解一致.

例 1.2.2 试计算积分

$$I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx \quad (n = 1, 2, \dots)$$