10613

计算方法讲义

北京化工学院

目　　录

本讲义系翻印北京大学计算数学教研室1979年12月编的“计算方法讲义”

第一章　误　差

§1　误差的来源

用一个近似方法来解决科学技术中的问题时，在那些地方会产生误差呢？首先是当用一个数学模型来描述一个具体的物理现象时，总是要作许多简化的，因此数学模型本身就包含着误差，这种误差叫做“模型误差”。在数学模型中通常总要包含一些观察数据，这种观察结果是不可能绝对准确的，因此还有“观察误差”。

例如，一根金属棒在温度 t 时的长度设为 L_t，在 $t=0$ 时的长度为 L_0，现在我们建立一个数学模型 ℓ_t 为：

$$\ell_t=L_0(1+\alpha t+\beta t^2)$$

其中 α 和 β 是由实验观察得到的两个常数，如

$$\alpha=0.001253\pm10^{-6}\qquad\beta=0.000068\pm10^{-6}$$

则 $L_t-\ell_t$ 就称为模型误差，10^{-6} 就是 α 和 β 的观察误差。

在求解一些实际问题时，数学模型往往很复杂，因而不能获得精确解，于是就必须建立一套行之有效的近似方法或数值方法，模型的准确解，与数值方法求得的准确解之差称为“方法误差”或叫做“截断误差”。

如一个无穷级数

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}f^{(k)}(x_0)$$

在计算这个无穷级数的值时，我们往往只能用前面的若干项（如 n 项）来代替

$$\sum_{k=0}^{n}\frac{1}{k!}f^{(k)}(x_0)$$

这就抛弃了无穷级数的后半段，这样产生的误差我们叫做“截断误差。”对这个问题来说，截断误差就是

$$\sum_{k=n+1}^{\infty}\frac{1}{k!}f^{(k)}(x_0)$$

最后还有一类误差，是因为我们在计算时总是只能取有限数位进行而引起的，如π，$\sqrt{2}$，$\frac{1}{3}$和$\frac{1}{7}$等等。在计算机上运算时，只能用有限位小数来表示，这样在计算时又会产生误差，这种误差我们称为“捨入误差”。

例如，在平常计算时，我们常取$\pi\approx3.1416$，这在计算时就有捨入误差

$$\rho=\pi-3.1416=-0.0000074\cdots$$

取$\frac{1}{3}\approx0.3333$，则计算时有捨入误差

$$\rho=\frac{1}{3}-0.3333=0.0000333\cdots$$

总括起来，误差一般有，模型误差，观察误差，截断误差和捨入误差，但在计算方法中主要讨论的是截断误差。有时也要涉及捨入误差。

§2　误差，误差限，有效数字

若用x^*来代表准确值x的一个近似值，则此近似值的“误差”e^*可表示为

$$e^*=x^*-x$$

这样定义以后，就有$x=x^*-e^*$，即近似值去掉（减去）它的误差就是准确值。因此把误差的负数$-e^*$叫做近似值x^*的“修正值”。或者说近似值加上它的修正值就是准确值。

误差可正可负，当误差为正时，近似值偏大，叫做"强近似"，当误差为负时，近似值偏小，叫做"弱近似"。

由于在一般情况下，准确值 x 是不知道的，所以误差 e^* 的准确值也不能求出，但根据具体测量或计算的情况，可以事先估计出误差的绝对值不能超过某个正数 ε^*，我们把 ε^* 叫做误差绝对值的"上界"。叫做误差限。

定义：如果

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

那么 ε^* 就叫做近似值 x^* 的误差限，误差限一定是正数。

因为在任何情况我都有

$$|x^*-x|\leq\varepsilon^*$$

即

$$x^*-\varepsilon^*\leq x\leq x^*+\varepsilon^*$$

这就表明 x 在 $[x^*-\varepsilon^*, x^*+\varepsilon^*]$ 这个区间内，我们用

$$x=x^*\pm\varepsilon^*$$

来表示近似值 x^* 的精确度或准确值所在的范围。

例如，光速 c 的近似值目前公认的是

$$c^*=2.997925\times10^{10}\text{ 厘米／秒}$$

误差限是

$$\varepsilon^*=0.000001\times10^{10}\text{ 厘米／秒}$$

通常记成

$$c=(2.997925\pm0.000001)\times10^{10}\text{ 厘米／秒}$$

取 x 的近似值 x^*，我们通常用四舍五入的方法取前面几位。

例如：　　$x=\pi=3.14159265\cdots$

按四舍五入的原则

取一位： $x_1^*=3$ $e_1^*\approx-0.14$

取三位： $x_3^*=3.14$ $e_3^*\approx-0.0016$

取五位： $x_5^*=3.1416$ $e_5^*\approx+0.000007$

取六位： $x_6^*=3.14159$ $e_6^*\approx-0.000003$

如果近似值x^*的误差限是某一位上的半个单位，该位到x^*的第一位非零数字一共有n位，我们就说x^*有"n位有效数字。"或者说x^*准确到该位。用四舍五入法取准确值的前n位x^*作为近似值，则x^*有n位有效数字，例如，上面例子中的$x_3^*=3.14$是以三位有效数字来表示π，它的误差限为

$$|\pi-x_3^*|\leq\frac{1}{2}\times10^{-2}$$

$x_5^*=3.1416$是以五位有效数字表示π，它的误差限为

$$|\pi-x_5^*|\leq\frac{1}{2}\times10^{-4}$$

下面我们用比较严格的数学语言来叙述有效数字位和误差限之间的关系。

定义：若用x^*表示x的近似值，并将x^*表示成

$$x^*=\pm10^m(\alpha_1+\alpha_2\times10^{-1}+\alpha_3\times10^{-2}+\cdots+\alpha_n\times10^{-(n-1)}) \qquad (1\text{-}1)$$

若其误差限

$$|x-x^*|\leq\frac{1}{2}\times10^{m-n+1}$$

便说，近似值x^*具有n位有效数字，这里m是一个整数，$\alpha_1,\alpha_2\cdots\cdots\alpha_n$，每个都是从0～9中的一个数字，而且假定$\alpha_1\neq0$。

从这个关系看出误差限和有效数字位之间的关系，可以通过有效

数字位来刻划误差限。

例：$x^*=3587.64$ 是 x 的具有六位有效数字的近似值，那么它的误差限是

$$|x-x^*|\leq\frac{1}{2}\times10^{3-6+1}=\frac{1}{2}\times10^{-2}$$

再如 $x^*=0.0023156$ 是 x 的具有五位有效数字的近似值，则误差限 $|x-x^*|\leq\frac{1}{2}\times10^{-3-5+1}=\frac{1}{2}\times10^{-7}$

§3 相对误差和相对误差限

上面引入的误差限的概念，它不能说明近似的好坏程度，它是有量纲单位的，譬如工人甲平均每生产一百个零件有一个次品，而工人乙则平均生产五百个零件有一个次品，他们的误差都是一个，但显然乙生产的水平要比甲好些，这就启发我们除了要看误差的大小外，还必须注意到量本身，甲的次品是百分之一，而乙的次品是五百分之一，我们把近似数的误差与准确值的比值定义作"相对误差"。记作 e_r^*

定义：记

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

为近似数 x^* 的相对误差，但在实际计算中，由于准确值 x 总是不知道的，所以我们也把

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

条件是 e_r^* 比较小。

相对误差可正可负，相对误差的绝对值的上界叫做"相对误差限"，记作 ε_r^*

$$\varepsilon_r^*=\frac{\varepsilon^*}{|x^*|}$$

其中 ε^* 是 x^* 的误差限。

为了区别相对误差与以前讲的误差，我们把以前讲的误差叫做"绝对误差"，注意的是绝对误差不是误差的绝对值。

例如，$C=(2.997925\pm0.000001)\times10^{10}$ 厘米／秒，这时 $C^*=2.997925\times10^{10}$ 厘米／秒，的相对误差限是

$$\varepsilon_r^*=\frac{0.000001}{2.997925}\approx 0.0000003$$

所以 C^* 是 C 的很好的近似值，如果我们取

$$C^{**}=3\times10^{10} \text{ 厘米／秒}$$

作为光速的近似值，则有

$$\varepsilon_r^{**}=\frac{0.0021}{3}=0.0007$$

相对误差限不到千分之一，$C^{**}=3.00\times10^{10}$ 厘米／秒是从 C 用四捨五入法取前三位数的近似值，它有三位有效数字。

我们同样可以给出相对误差限和有效数字位的关系。

设形如（1-1）的近似数 x^* 具有 n 位有效数字，则其相对误差限为

$$\varepsilon_r^*=\frac{\varepsilon^*}{|x^*|}\le\frac{1}{2\alpha_1}\ 10^{-(n-1)}$$

若形如（1-1）的近似数 x^*，相对误差限满足关系式

$$\varepsilon_r^*\le\frac{1}{2(\alpha_1+1)}\times10^{-(n-1)}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字位。

例如我们用 $x^*=2.72$ 来表示 e 的近似值，则相对误差限

$$\varepsilon_r^*\le\frac{1}{2\times2}\times10^{-2}$$

§4 和、差、积、商的误差

设x^*是x近似值，y^*是y的近似值，则用$x^*\pm y^*$来表示$x\pm y$的近似值，它的误差

$$(x^*\pm y^*)-(x\pm y)=(x^*-x)\pm(y^*-y)$$

所以和的误差是误差的和，差的误差是误差之差。但因为

$$|(x^*\pm y^*)-(x\pm y)|\le|x^*-x|+|y^*-y|$$

所以误差限之和是和或差的误差限，以上的结论适用于任意多个近似数的和或差。任意多个数的和或差的误差限等于各数误差限之和。

若我们把x^*的误差$e^*=x^*-x$看作是在x的微分

$$dx=x^*-x$$

x^*的相对误差是

$$e_r^*=\frac{x^*-x}{x}=\frac{dx}{x}=d\ell nx$$

它是对数函数的微分。

设 $u=xy$

则

$$\ell nu=\ell nx+\ell ny$$

因而

$$d\ \ell nu=d\ \ell nx+d\ \ell ny$$

这就是说，乘积的相对误差是各乘数的相对误差之和。同样可证商的相对误差是被除数与除数的相对误差之差。这是因为若

$$u=x/y$$

则

$$\ell n\ u=\ell n\ x-\ell n\ y$$

因此

$$d\ell nu=d\ell nx-d\ell ny$$

任意多次连乘除所得结果的相对误差限等于各乘数和除数的相对误差限之和。

例如

$$u=\frac{xy}{zw}$$

则因

$$\ell nu=\ell nx+\ell ny-\ell nz-\ell nw$$

所以

$$d\ell nu=d\ell nx+d\ell ny-d\ell nz-d\ell nw$$

从而得到

$$|d\ell nu|\leq|d\ell nx|+|d\ell ny|+|d\ell nz|+|d\ell nw|$$

u的相对误差限等于乘数x，y和除数z，w的相对误差限之和。

设　$y=f(x)$，$y^*=f(x^*)$，则y^*的相对误差是

$$d\ell ny=\frac{f(x)}{f(x)}dx$$

例如，$y=x^n$，则$\ell ny=n\ell nx$，因此

$$d\ell ny=n\ d\ell nx$$

x^n的相对误差是x的相对误差的n倍，$\sqrt{x}$的相对误差是x的相对误差之半。

注意两正数之差$u=x-y$的相对误差是

$$d\ell nu=\frac{dx-dy}{x-y}$$

如果两数x和y很接近，它们的差就很少，因而u的相对误差就很大。这是由于x^*和y^*的前几位有效数字必然相同，相减后有效数字就会

大大减少的原故，遇到这种情形应当多保留几位有效数字，或变换计算公式，防止这种情形的出现。

例如，当x接近于零时变换

$$\frac{1-\cos x}{\sin x}=\frac{\sin x}{1+\cos x}$$

当x充分大时变换

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

第二章　插值法

§1　引言

插值法是一种应用十分广泛的方法，在许多地方我们经常用到它。例如，我们在查对数表时，要查的数据在表中找不到，于是找出它相邻的数，再从表的旁边找出其修正值，按一定关系把此相邻的数加以修正，以求出要找的数，这个修正关系，是如何得到的呢？实际上就是一种插值。

在数学分析中，我们用$y=f(x)$来描述曲线，但在实际问题中，函数$y=f(x)$往往是通过实验观测得到的一组数据，所以实际上给出的只是在某区间$[a,b]$上的一系列对应值

$$y_i=f(x_i)\quad i=0,1,2,\cdots\cdots$$

或者说是给出一张函数表

x	x_0	x_1	x_2	……	x_i	……	x_n
y	y_0	y_1	y_2	……	y_i	……	y_n

插值的任务就是根据这个表，寻找一个函数$\varphi(x)$去近似地代替$f(x)$，而且要求$\varphi(x)$具有这样的性质，即在给定的这些点$x_i(i=0,1,\cdots\cdots n)$上与$f(x_i)$取相同值，即$f(x_i)=\varphi(x_i)$，我们称$\varphi(x)$为$f(x)$的插值函数，$x_i$为插值节点。

下面我们就来讲如何找这种插值函数，并在一定的条件下，来讨论插值得到的函数与实际的函数的差距，我们从最简单的情形着手。

§ 2　线性插值

若我们给出了两个点x_0，x_1和这两个点上对应的函数值$y_0=f(x_0)$，$y_1=f(x_1)$，如何造一个插值函数$\varphi(x)$，使$\varphi(x)$在给定的点上取已知值，最容易想到的就是过P_0P_1作一条直线，用以直线来代替原来的函数$f(x)$，我们知道过P_0P_1的直线方程可以写

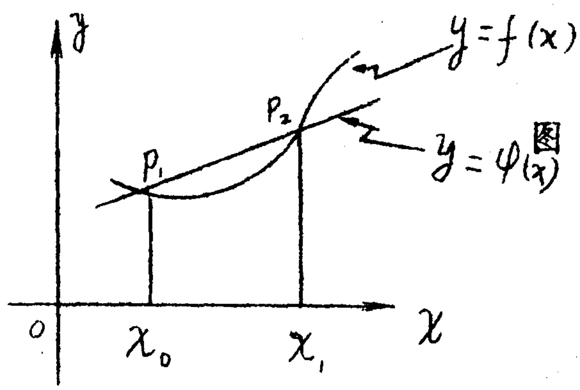

图　1

成：

$$y=\varphi(x)=y_0+\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}(x-x_0) \qquad (2-1)$$

显然，这样的$\varphi(x)$是满足我们的要求的，因为若把x_0和x_1代入就有$\varphi(x_0)=y_0$，$\varphi(x_1)=y_1$，由于$\varphi(x)$代表了一条直线，也就是

说用直线去近似地代替了函数 f(x)，所以我们称这种插值为线性插值。

不难看出，式子(2-1)可以改写成：

$$y=\varphi(x)=y_0\frac{x-x_1}{x_0-x_1}+y_1\frac{x-x_0}{x_1-x_0} \qquad (2-2)$$

(2-2)中的 $\frac{x-x_1}{x_0-x_1}$ 和 $\frac{x-x_0}{x_1-x_0}$ 是两个x的线性函数，因此(2-2)式又可以看成是两个线性函数的线性组合，把这两个线性函数记为

$$\ell_0(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1} \qquad \ell_1(x)=\frac{x-x_0}{x_1-x_0}$$

我们把 $\ell_0(x)$ 叫做 x_0 点的一次插值基函数，把 $\ell_1(x)$ 叫做 x_1 点的一次插值基函数，这两个插值基函数有些什么性质呢？显然，它在对应的插值点上取1，而在另外的插值点上为零。它们的图形如图2 我们的插值函数 $\varphi(x)$ 是这两个插值基函数的线性组合，其组合系数就是对应点上的函数值，这种形式的插值，我们称之谓拉格朗日插值。

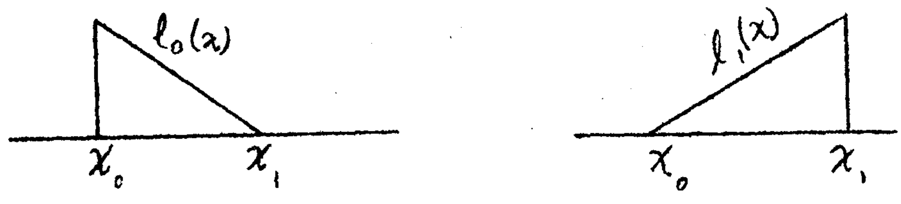

图1

若我们应用差商的概念，(2-1)式可以得到另一种表达形式。

我们知道，函数 f(x) 在 x_i，x_j 处的一阶差商可以表示为

$$f(x_i, x_j)=\frac{f(x_i)-f(x_j)}{x_i-x_j}$$

因此（2-1）中的$\frac{y-y_0}{x_1-x_0}$实际上是$\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}=f(x_1, x_0)$，是$f(x)$在$x_0, x_1$处的一阶差商，由于差商的对称性，（2-1）式可以写成

$$y=\varphi(x)=f(x_0)+(x-x_0)f(x_0, x_1) \qquad (2-3)$$

这种形式的插值，叫做牛顿插值。

再把（2-1）用行列式的形式表示，还可以写成：

$$y=\varphi(x)=\frac{1}{x_0-x_1}\begin{vmatrix} f(x_0) & x-x_0 \\ f(x_1) & x-x_1 \end{vmatrix} \qquad (2-4)$$

形式尽管可以各种各样，但万变不离其宗，实质是一样的，都是代表了直线方程。对这样的插值函数还需要考虑的就是这个插值函数$\varphi(x)$与函数的差距

要讨论$\varphi(x)$在$[x_0, x_1]$区间上与函数$f(x)$的差距究竟有多大？这需要有一定条件，其条件就是假设函数$f(x)$在区间$[x_0\ x_1]$上有连续的二阶导数，我们令

$$R(x)=f(x)-\varphi(x) \qquad (2-5)$$

为估计$R(x)$，我们不妨研究一下$R(x)$的特性，因为$R(x)$在$x=x_0$和$x=x_1$上为零，所以我们可以假定

$$R(x)=A(x)(x-x_0)(x-x_1) \qquad (2-6)$$

这儿$A(x)$是x的函数，为了确定$A(x)$我们对一固定的x造一个t的函数

$$\phi(t)=f(t)-\varphi(t)-A(x)(t-x_0)(t-x_1) \quad (2-7)$$

显然函数$\phi(t)$有二阶连续导数，这是因为$f(t)$有二阶连续导数，而$\varphi(t)$和$A(x)(t-x_0)(t-x_1)$都是t的多项式。而且$\phi(x_0)=\phi(x_1)=0$，由（2-5）和（2-6）式我们知道

$$\phi(x)=f(x)-\varphi(x)-A(x)(x-x_0)(x-x_1)=0$$

所以$\phi(t)$在$[x_0 x_1]$上有三个零点，x_0，x_1和x，$(x_0<x<x_1)$根据中值定理，$\phi'(t)$在区间(x_0,x)和(x,x_1)内，至少各有一个零点，设为ξ_1和ξ_2，即$\phi'(\xi_1)=\phi'(\xi_2)=0$，根据同样的理由$\phi''(t)$在$(\xi_1,\xi_2)$之间至少有一个零点，设为$\xi$，自然$\xi$也属于区间$(x_0\ x_1)$，$\phi''(\xi)=0$，现在我们就对$\phi(f)$求二次导数，因为$A(x)$是不随$t$变化的，而$\varphi(t)$又是$t$的一次插值多项式，所以

$$\phi''(t)=f''(t)-2!A(x)$$

把ξ代入得

$$\phi''(\xi)=f''(\xi)-2!A(x)=0$$

于是求得

$$A(x)=\frac{f''(\xi)}{2!} \qquad x_0<\xi<x_1$$

这样就得到了线性插值的余项

$$R(x)=\frac{f''(\xi)}{2!}(x-x_0)(x-x_1) \qquad x_0<\xi<x_1 \quad (2-8)$$

作为一个习题，请同学们用（2-8）式证明

$$|R(x)|\le \max_{x_0\le x\le x_1}|f''(x)|\frac{(x_1-x_0)^2}{8}$$

$$x_0\le x\le x_1$$