

研究生教学用书

公共基础课系列

数值分析

Numerical Analysis

李 红

BOOKS FOR GRADUATE STUDENTS

华中科技大学出版社

数值分析

李 红 编著

华中科技大学出版社

内 容 简 介

本书的内容是现代科学计算中常用的数值计算方法及其原理,包括插值法、函数逼近与曲线拟合、数值积分、常微分方程数值方法、线性代数方程组的解法、非线性方程和方程组的解法及矩阵特征值与特征向量的计算。每章附有习题(书末有答案)及数值实验题。

本书在附录中给出了用Matlab 程序设计实现各章数值实验题的求解过程。

本书可作为理工科大学各专业工学硕士、工程硕士、相关专业在职硕士国家统考课程及数学专业本科生的教材,也可供从事科学计算的科技工作者参考。

Abstract

This book is to introduce the numerical method and the theory which is often used in today's scientific calculation. It includes method of interpolation, function approach and curvefit, numerical integration, numerical method for ordinary differential equation, numerical solution of linear equations, numerical solution of non-linear equation(s), numerical computation of eigenvalue and eigenvector. There are exercises (the answer is at the end of book) and computational exercises in each chapter.

It is given in the appendix of this book that shows the process of computing the computational exercises of each chapter by using Matlab programming.

The book is intended to sever as a text for master of science in engineering, master of engineering, undergraduates of mathematics. It also can be used as a reference book for those who deal with the scientific calculation.

写在“研究生教学用书”出版 15 周年前岁

“接天莲叶无穷碧，映日荷花别样红。”今天，我国的教育正处在一个大发展的崭新时期，而高等教育即将跨入“大众化”的阶段，蓬蓬勃勃，生机无限。在高等教育中，研究生教育的发展尤为迅速。在盛夏已临，面对池塘中亭亭玉立的荷花，风来舞举的莲叶，我深深感到，我国研究生教育就似夏季映日的红莲，别样多姿。

党的十六大报告以空前的力度强调了“科教兴国”的发展战略，强调了教育的重大作用，强调了教育的基础性全局性先导性，强调了在社会主义建设中教育的优先发展的战略地位。从报告中，我们可以清楚看到，对高等教育而言，不仅赋予了重大的历史任务，而且更明确提出了要培养一大批拔尖创新人才。不言而喻，培养一大批拔尖创新人才的历史任务主要落在研究生教育肩上。“百年大计，教育为本；国家兴亡，人才为基。”国家之间的激烈竞争，在今天，归根结底，最关键的就是高级专门人才，特别是拔尖创新人才的竞争。由此观之，研究生教育的任务可谓重矣！重如泰山！

前事不忘，后事之师。历史经验已一而再、再而三地证明：一个国家的富强，一个民族的繁荣，最根本的是要依靠自己，要以“自力更生”为主。《国际歌》讲得十分深刻，世界上从来就没有什么救世主，只有依靠自己救自己。寄希望于别人，期美好于外力，只能是一种幼稚的幻想。内因是发展的决定性的因素。当然，我们决不应该也决不可能“闭关锁国”，自我封闭，固步自封，而谋求发展，重犯历史错误。外因始终是发展的必要条件。正因为如此，我们清醒看到了，“自助者人助”，只有“自信、自尊、自主、自强”，只有独立自主，自强不息，走以“自力更生”为主的发展道路，才有可能在向世界开放中，争取到更多的朋友，争取到更多的支持，充分利用好外部的各种有利条件，来扎扎实实地而又尽可能快地发展自己。这一切的关键就在于，我们要有数量与质量足够的高级专门人才，特别是拔尖创新人才。何况，在科技高速发展与高度发达，而知识经济已初见端倪的今天，更加如此。人才，高级专

门人才,拔尖创新人才,是我们一切事业发展的基础.基础不牢,地动山摇;基础坚牢,大厦凌霄;基础不固,木凋树枯;基础深固,硕茂葱绿!

“工欲善其事,必先利其器.”自古凡事皆然,教育也不例外.教学用书是“传道授业解惑”培育人才的基本条件之一.“巧妇难为无米之炊”.特别是在今天,学科的交叉及其发展越来越多及越快,人才的知识基础及其要求越来越广及越高,因此,我一贯赞成与支持出版“研究生教学用书”,供研究生自己主动地选用.早在 1990 年,本套用书中的第一本即《机械工程测试·信息·信号分析》出版时,我就为此书写了个“代序”,其中提出:一个研究生应该博览群书,博采百家,思路开阔,有所创见.但这不等于他能在一切方面均能如此,有所不为才能有所为.如果一个研究生的主要兴趣与工作不在某一特定方面,他也可选择一本有关这一特定方面的书作为了解与学习这方面知识的参考;如果一个研究生的主要兴趣与工作在这一特定方面,他更应选择一本有关的书作为主要的学习用书,寻觅主要学习线索,并缘此展开,博览群书.这就是我赞成要为研究生编写系列的“研究生教学用书”的原因.今天,我仍然如此来看.

还应提及一点,在教育界有人讲,要教学生“做中学”,这有道理;但须补充一句,“学中做”.既要在实践中学习,又要在学习中实践,学习与实践紧密结合,方为全面;重要的是,结合的关键在于引导学生思考,学生积极主动思考.当然,学生的层次不同,结合的方式与程度就应不同,思考的深度也应同.对研究生特别是对博士研究生,就必须是而且也应该是“研中学,学中研”,在研究这一实践中,开动脑筋,努力学习,在学习这一过程中,开动脑筋,努力研究;甚至可以讲,研与学通过思考就是一回事情了.正因为如此,“研究生教学用书”就大有英雄用武之地,供学习之用,供研究之用,供思考之用.

在此,还应进一步讲明一点.作为一个研究生,来读“研究生教学用书”中的某书或其他有关的书,有的书要精读,有的书可泛读.记住了书上的知识,明白了书上的知识,当然重要;如果能照着用,当然更重要.因为知识是基础.有知识不一定有力量,没有知识就一定没有力量,千万千万不要轻视知识.对研究生特别是博士研究生而言,最为重要的还不是知识本身这个形而下,而是以知识作为基础,努力通过某种实践,同时深入独立思考而体悟到的形而上,即《老子》所讲的不可

道的“常道”，即思维能力的提高，即精神境界的升华。《周易·系辞》讲了：“形而上谓之道，形而下谓之器。”我们的研究生要有器，要有具体的知识，要读书，这是基础；但更要有“道”，更要一般，要体悟出的形而上。《庄子·天道》讲得多么好：“书不过语，语之所贵者意也，意有所随，意之所随者，不可以言传也。”这个“意”，就是孔子所讲的“一以贯之”的“一”，就是“道”，就是形而上。它比语、比书，重要多了。要能体悟出形而上，一定要有足够数量的知识作为必不可缺的基础，一定要在读书去获得知识时，整体地读，重点地读，反复地读；整体地想，重点地想，反复地想。如同韩愈在《进学解》中所讲的那样，能“提其要”，“钩其玄”，以达到南宋张孝祥所讲的“悠然心会，妙处难与君说”的体悟，化知识为己之素质，为“活水源头”。这样，就可驾驭知识，发展知识，创新知识，而不是为知识所驾驭，为知识所奴役，成为计算机的存储装置。

这套“研究生教学用书”从第一本于 1990 年问世以来，到明年，就经历了不平凡的 15 个春秋。从研究生教育开始以来，我校历届领导都十分关心研究生教育，高度重视研究生教学用书建设，亲自抓研究生教学用书建设；饮水思源，实难忘怀！“逝者如斯夫，不舍昼夜。”截至今天，“研究生教学用书”的出版已成了规模，蓬勃发展。目前已出版了用书 69 种，有的书发行了数万册，有 22 种分别获得了国家级、省部级教材奖、图书奖，有数种已为教育部列入向全国推荐的研究生教材，有 20 种一印再印，久销不衰。采用此书的一些兄弟院校教师纷纷来信，称赞此书为研究生培养与学科建设做出了贡献。我们深深感激这些鼓励，“衷心藏之，何日忘之？！”没有读者与专家的关爱，就没有我们“研究生教学用书”的发展。

唐代大文豪李白讲得十分正确：“人非尧舜，谁能尽善？”我始终认为，金无足赤，物无足纯，人无完人，文无完文，书无完书。“完”全了，就没有发展了，也就“完”蛋了。江泽民同志在党的十六大报告中讲得多么深刻：“实践没有止境，创新也没有止境。”他又指出，坚持“三个代表”重要思想的关键是与时俱进。这套“研究生教学用书”更不会例外。这套书如何？某本书如何？这样的或那样的错误、不妥、疏忽或不足，必然会有。但是，我们又必须积极、及时、认真而不断地加以改进，与时俱进，奋发前进。我们衷心希望与真挚感谢读者与专家不吝指教，及时批评。当局者迷，兼听则明；“嚶其鸣矣，求其友声。”这就是我们肺腑之

言. 当然, 在这里, 还应该深深感谢“研究生教学用书”的作者、审阅者、组织者(华中科技大学研究生院的有关领导和工作人员)与出版者(华中科技大学出版社的编辑、校对及其全体同志); 深深感谢对“研究生教学用书”的一切关心者与支持者, 没有他们, 就决不会有今天的“研究生教学用书”。

我们真挚祝愿, 在我们举国上下, 万众一心, 在“三个代表”重要思想的指引下, 努力全面建设小康社会, 加速推进社会主义现代化, 为实现中华民族伟大复兴, “芙蓉国里尽朝晖”这一壮丽事业中, 让我们共同努力, 为培养数以千万计高级专门人才、特别是一大批拔尖创新人才, 完成历史赋予研究生教育的重大任务而做出应有的贡献。

谨为之序。

中国科学院院士
华中科技大学学术委员会主任
杨叔子

2003 年 7 月于喻园

前 言

21 世纪是数字化、信息化、智能化技术超常规发展的年代,计算机作为其基本的载体,其技术理论的研究和应用直接影响到当今科学技术发展的速度和质量。

随着计算机的迅速发展,熟练地运用计算机进行科学计算已成为科技工作者不可缺少的技能。应用计算机求解各类问题更成为各行各业知识更新的必要环节,培养学生和应用者的科学计算能力,数值分析课程具有不可替代的作用。

作者经过十多年的教学实践积累和不断的探索改进,重新编著了《数值分析》教材。本书以提高学生的数学素质,培养学生科学计算的实践能力为要旨,强调重概念、重方法、重应用及重能力的培养,其特点是:(1)内容新,删除了以前教材中的陈旧内容,增加科学计算中一些新的使用方法和计算方法;(2)在着重数值计算基本原理和各种方法的基本思想阐述时,注重强化数学概念的严密性和准确性,使学生的数学逻辑思维能力得到训练;(3)加强数值实验,强化实践能力的培养。本书各章都给出相应的数值实验习题,以帮助学生掌握各种数值计算方法,从而提高学生应用数值计算方法解决实际问题的能力。

在编写本教材的过程中,得到了我校研究生院及数学系的大力支持,很多老师给予了我关心和指教。徐长发教授、贺云峰老师在试用教材期间提出了宝贵意见,徐永兵老师、郑成勇硕士完成了教材中整个数值实验的程序设计工作。在此,谨致以诚挚的谢意。

限于水平,书中一定有不少缺点和错漏之处,恳望得到批评指正。

编著者

2003.8

目 录

第 1 章 绪论	(1)
1.1 课程的意义、内容和特点	(1)
1.2 误差及有关概念	(4)
1.3 数值稳定性和病态问题	(7)
1.4 数值运算中的一些原则	(9)
1.5 几个算例	(10)
1.6 算法的实现	(12)
习题 1	(12)
数值实验题 1	(14)
第 2 章 插值法	(17)
2.1 问题的提法	(17)
2.2 拉格朗日(Lagrange)插值	(18)
2.3 差商与牛顿(Newton)插值	(24)
2.4 差分与等距节点的 Newton 插值	(27)
2.5 埃尔米特(Hermite)插值	(32)
2.6 分段插值法	(36)
2.7 三次样条(spline)插值	(40)
习题 2	(49)
数值实验题 2	(51)
第 3 章 函数逼近与曲线拟合	(53)
3.1 内积空间	(53)
3.2 函数的最佳平方逼近	(56)
3.3 正交多项式	(59)
3.4 用正交函数系作最佳平方逼近	(61)
3.5 曲线拟合的最小二乘法	(63)
3.6 最佳一致逼近多项式及其求法	(72)

习题3	(81)
数值实验题3	(82)
第4章 数值积分	(83)
4.1 数值求积公式的基本概念	(83)
4.2 牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)公式	(87)
4.3 复化求积公式及其收敛性	(92)
4.4 龙贝格(Romberg)算法	(96)
4.5 高斯(Gauss)型求积公式	(101)
4.6 数值微分	(111)
习题4	(115)
数值实验题4	(118)
第5章 常微分方程的数值方法	(120)
5.1 建立常微分数值方法的基本思想与途径	(120)
5.2 欧拉(Euler)方法及其截断误差和阶	(121)
5.3 龙格-库塔(Runge-Kutta)方法	(125)
5.4 单步法收敛性与稳定性	(131)
5.5 线性多步法	(137)
5.6 预测-校正技术和外推技巧	(141)
习题5	(147)
数值实验题5	(149)
第6章 线性代数方程组的解法	(151)
6.1 引言及预备知识	(151)
6.2 Gauss 消去法	(156)
6.3 Gauss 主元素消去法	(160)
6.4 矩阵分解及其在解方程组中的应用	(162)
6.5 误差分析	(178)
6.6 线性代数方程组的迭代解法	(181)
习题6	(194)
数值实验题6	(197)
第7章 非线性方程和方程组的解法	(200)
7.1 二分法	(200)

7.2	简单迭代法	(201)
7.3	迭代过程的加速	(209)
7.4	Newton 迭代法	(211)
7.5	弦截法与抛物线法	(217)
7.6	解非线性方程组的 Newton 迭代法	(219)
习题 7		(220)
数值实验题 7		(221)
第 8 章 矩阵特征值与特征向量的计算		(223)
8.1	幂法和反幂法	(223)
8.2	Jacobi 方法	(230)
8.3	QR 方法	(233)
习题 8		(239)
数值实验题 8		(240)
答案与提示		(242)
附录 数值实验程序		(246)
参考文献		(274)

第1章 绪 论

1.1 课程的意义、内容和特点

计算机技术是对当今科学、工程技术和人类社会生活影响最深刻的最新技术之一,它对科学技术最深刻的影响,莫过于使科学计算平行于理论分析和实验研究,成为人类探索未知科学领域和进行大型工程设计的方法和手段.在独创性工作的先行性研究过程中,科学计算更具有突出的作用.科学计算能力是跨世纪人才不可或缺的.科学计算是数学与计算机有机结合的结果,其核心内容是以现代化的计算机及数学软件为工具,以数学模型为基础进行模拟研究.近年来,它也成为数学科学本身发展的源泉和途径之一,高等教育中如何培养学生科学计算的能力的问题正日益受到关注,成为当前教育改革的核心和焦点之一.

数值分析及有关的数学基础教学环节,在培养学生科学计算能力上具有不可替代的作用.目前,国内许多高等学校已将数值分析列入自然科学、工程技术乃至社会科学本科的教学计划之中.

本课程的内容可概括为用计算机求解数学问题的数值方法和理论,简称数值分析或计算方法.数学学科十分广泛,这里只涉及工程和科学实验中常见的数学问题,如线性方程组、函数的插值、离散数据的拟合、微积分、微分方程、非线性方程等,它们是其他数学学科的基础.

电子计算机实质上只会做加、减、乘、除等基本运算,而研究怎样通过计算机所能执行的基本运算,来求得各类问题的数值解或近似数值解,就是数值分析所要研究的根本课题.由基本运算及运算顺序的规定所构成的完整的解题步骤,称为算法.数值分析的根本任务,也可说是研究算法.

有许多数学问题的解,不可能经过有限次算术运算计算出来.例如,计算任意角的三角函数值、求一般方程的根、计算任意函数的积分、求一般微分方程的解.对于这类问题,计算方法常常采用近似替代的办法.

例如,已知角的弧度 x 在 0 与 $\pi/4$ 之间,计算 $\sin x$ 的值.

根据微分学的泰勒(Taylor)公式,可得

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + R_{2n+1}(x).$$

由于计算多项式的值只用到算术运算,而且当 n 充分大时,余项 $R_{2n+1}(x)$ 的数值很

小,便可用上式右边前 $(2n+1)$ 次多项式来近似替代 $\sin x$,把这多项式的值当作 $\sin x$ 的值,得到计算 $\sin x$ 的近似公式

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

这个公式在 $x=0$ 的邻近近似程度较高,但在其他地方,这个公式误差较大.近似值与真正值之差,称为该近似值的误差.理想的公式,应使误差在整个区间 $[0, \pi/4]$ 上都很小.计算机常用的标准函数,就是按这种“理想”公式设计的.

又例如,求非线性方程 $f(x)=0$ 的根.一般说方程很难求解,但如已知根的粗略近似值为 x_0 ,则根据Taylor级数

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \cdots$$

取等式右边前两项近似替代 $f(x)$,就会得到很容易求解的线性方程

$$f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) = 0.$$

把解出的 x 记为 x_1 ,则有

$$x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0).$$

x_1 虽然不一定是根,但往往比 x_0 更接近于根.用 x_1 代替上面的 x_0 ,进行类似计算,即可得 x_2 .这样继续下去,往往可得一系列越来越接近根的近似值 x_1, x_2, x_3, \cdots 其中

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n), \quad (1.1)$$

这种求根法称为牛顿迭代法.以具体方程 $x^2-2=0$ 为例,式(1.1)成为

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^2 - 2}{2x_n} = \frac{1}{2} \left(x_n + \frac{2}{x_n} \right).$$

取 $x_0=1.4$,按上式计算得 $x_1=1.414285714, x_2=1.414213564$,可见越来越接近根 $\sqrt{2}$ ($=1.41421356237\cdots$).

再如求解常微分方程的初值问题

$$\begin{cases} y' = f(x, y), & a \leq x \leq b, \\ y(a) = y_0, \end{cases} \quad (1.2)$$

通常无法求出区间 $[a, b]$ 上的解 $y(x)$ 的解析表达式.但实际问题往往只需算出它在某些点处的近似值,如在点 $x_n = a + nh$ ($n=0, 1, \cdots, N; h=(b-a)/N$)处的近似值 $y_n \approx y(x_n)$,由式(1.2),得

$$y'(x_n) = f(x_n, y(x_n)), \quad n=0, 1, \cdots, N,$$

又由于

$$y'(x_n) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h},$$

用差商 $[y(x_{n+1}) - y(x_n)]/h$ 近似替代式(1.2)中的微商(导数) $y'(x_n)$,用 y_n 近似替代 $y(x_n)$,得到

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f(x_n, y_n), \quad n=0, 1, \cdots, N-1,$$

从而有

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (1.3)$$

这样,由已知值 y_0 出发,便可逐步算出 y_1, y_2, \dots, y_N , 这种求初值问题(1.2)解近似值的方法,称为欧拉(Euler)折线法. 以具体问题

$$\begin{cases} y' = y - \frac{2x}{y}, & 0 \leq x \leq 1, \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

为例,则 Euler 法计算公式(1.3)成为 $y_{n+1} = y_n + h(y_n - 2x_n/y_n)$. 取 $h=0.1$ 及 $h=0.01$, 由 $y_0=1$ 出发,按此公式可算得表 1.1 中的第二、三行;第四行是解的真正值 $y(x_n) = \sqrt{1+2x_n}$. 计算时用五位小数,但表中只记录了四位小数. 由表 1.1 可见, h 越小,计算结果越准确.

表 1.1

x_n	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	1
y_n	1.1	1.1918	1.2774	1.3581	1.4351	1.7848
y_n	1.0959	1.1841	1.2662	1.3434	1.4164	1.7379
$y(x_n)$	1.0954	1.1832	1.2649	1.3416	1.4142	1.7320

上述三例都是利用近似替代,把不能用有限次运算求解的问题,转化为比较简单的,可用有限次运算求解的问题,从而用简化问题的解作为原来问题的近似解. 由此,人们自然会问,这种近似解的误差有多大? 能否通过增大 n (如前两例)或缩小 h (如第三例)使误差无限减小? 数值分析在采用近似替代的同时,还需研究这两个问题,即误差估计和收敛性问题.

随着电子计算机的发展,计算机运算速度越来越快,存储数据的容量越来越大. 但无论多快多大,毕竟有一定限度. 所以,对于可用有限次运算求解的问题,还需考虑先算什么量,后算什么量,才能最快算出结果,并使占有的内存最省.

例如,计算多项式

$$0.0625x^4 + 0.425x^3 + 1.215x^2 + 1.912x + 2.1296$$

的值. 如果先算各项然后相加,需做十次乘法和四次加法. 但如改为下式

$$(((0.0625x + 0.425)x + 1.215)x + 1.912)x + 2.1296$$

计算,则只需做四次乘法和四次加法(此算法称为秦九韶算法). 进而改为下式

$$[(0.5x + 0.6)^2 + 0.5x + 0.7][(0.5x + 0.6)^2 + 0.8] + 0.9$$

计算,则可减少到三次乘法和五次加法.

又例如,要求解 $n=20$ 的线性代数方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \dots\dots\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n, \end{cases}$$

如果按克莱姆(Cramer)法则求解,即按下面公式计算:

$$x_k = D_k/D, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

其中, $D = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}$, D_k 是把 D 中第 k 列 $(a_{1k}, a_{2k}, \dots, a_{nk})^T$ 换为 $(b_1, b_2, \dots, b_n)^T$

后得到的行列式.

那么,这要计算 $(n+1)$ 个行列式,并做 n 次除法,而每个行列式包含 $n!$ 个乘积,计算每个乘积需做 $(n-1)$ 次乘法,这样共需要 $[(n+1)!(n-1)+n]$ 次乘除法.当 $n=20$ 时,则要需 9.7×10^{20} 这么多次乘除法;即使在每秒做一亿次乘除法的计算机上计算,也需 30 多万年!可见理论上很“漂亮”的 Cramer 法则在计算机上并不适用.

因此,在构造算法时,还应考虑如何计算,才能既快又省.

1.2 误差及有关概念

前述已提及过误差,这里对误差及有关概念作进一步的讨论.

1.2.1 误差的来源

利用计算机解决科学计算问题的过程大致可以分为两个环节.首先,将实际问题归结为数学问题,建立起比较适合的、具体的数学模型,如微分、积分、方程、级数求和等;然后,选择适当的解题方法,编制好程序,上机算出结果.在这两个环节中,每一步都可能产生误差.

一个物理量的真实值和计算出的值往往存在差异,它们之差称为误差.

误差大致可分为以下四类.

(1)模型误差.通过对实际问题进行抽象、简化得到的数学模型与实际现象之间必然存在误差,这种误差称之为模型误差.

(2)观测误差(参量误差、数据误差).一般数学问题包含若干参量,它们的值往往通过观测得到,而观测难免带来误差,这种误差称之为观测误差.

(3)截断误差(方法误差).一般数学问题难以求解,往往要通过近似替代,简化为较易求解的问题,由简化引起的误差称之为截断误差.

许多数学运算(如微分、积分及无穷级数求和等)是通过极限过程来定义的,然而计

算机上只能完成有限次的算术运算和逻辑运算,因此需要将解题方案加工成算术运算与逻辑运算的有限序列,这样的加工常常表现为无穷过程的截断,由此产生的误差通常称作截断误差.如 e^x 可展开为级数形式

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots.$$

但用计算机求值时,不能直接得出右端无穷多项的和,而只能截取有限项求值

$$s_n(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!},$$

用部分和 $s_n(x)$ 作为 e^x 的值必然会有误差,由Taylor余项定理,其截断误差为

$$e^x - s_n(x) = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} e^{\theta x}, \quad 0 < \theta < 1.$$

(4)舍入误差(计算误差).由于实际计算是按有限位数进行的,数值解的每一步都可能有误差,这种误差称之为舍入误差.

在计算过程中所用数据可能位数很多,然而受机器字长的限制,用机器代码表示的数据必须舍入成一定的位数,这也会引起舍入误差.

例如,在实际计算时用0.33333代替了 $\frac{1}{3}$,则舍入误差为

$$R = \frac{1}{3} - 0.33333 = 0.00000333\cdots.$$

数值分析研究数学问题的数值解法,所以不讨论模型误差,只讨论截断误差与舍入误差.

1.2.2 误差限与有效数字

准确数 x 与其近似数 x^* 之差,即 $(x-x^*)$ 称为绝对误差.

误差虽然不可避免,但人们总是希望计算结果能足够准确,这就需要估计误差,误差 $(x-x^*)$ 的具体数值通常是无法确定的,只能根据测量工具或计算过程,设法估算出它的取值范围,即误差绝对值的一个上界

$$|x - x^*| \leq \epsilon.$$

这种上界 ϵ 称作近似值 x^* 的绝对误差限,简称误差限,或称精度(误差限一般都取到某位的半个单位).精度为 ϵ 的近似值 x^* ,可以认为和真值 x 关于允许误差 ϵ 是“重合”的,或者说,结果关于精度 ϵ 是“准确”的.

写出一个近似值后,当然希望指明它的准确程度,为此需要引进有效数字的概念.

众所周知,当准确数 x 有很多位数时,常常按“四舍五入”原则去得到 x 的近似数,例如, $\pi = 3.14159265\cdots$ 按舍入原则若取四位小数,得 $\pi = 3.1416$;取五位小数,得 $\pi = 3.14159$,它们的绝对误差不超过末位数的半个单位,即

$$|\pi - 3.1416| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}, \quad |\pi - 3.14159| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-5}.$$

四以下舍,五以上入这些都无问题,若刚好是五,则作如下规定:若前面是偶数,则将五舍去;若前面是奇数,则将五进一.实践证明,当进行大量运算时,按上述原则进行舍入,整个运算的误差积累较小.

如果近似值 x 的误差限是它的某一位的半个单位,就说它“准确”到这一位,并且从这一位一直到前面第一个非零数字为止的所有数字均称有效数字,有效数字实际上是将四舍五入抽象成数学语言而引入的一个新名词.

定义 1.1 若近似值 x^* 的误差限是某一位的半个单位,该位到 x^* 的第一位非零数字有 n 位,则称 x^* 有 n 位有效数字.

定义 1.1 也可如下表述.

定义 1.1' 对于 x 的近似值(规格化形式)

$$x^* = \pm 0. a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m \text{ (其中, } a_1, a_2, \cdots, a_n \text{ 是 } 0 \text{ 到 } 9 \text{ 之间的自然数, } a_1 \neq 0 \text{),}$$

如果误差 $|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-l}$, $1 \leq l \leq n$,

则称近似值 x 有 l 位有效数字.

按照这种说法, π 的近似值 3.1416, 3.14159 分别有五位和六位有效数字.

1.2.3 相对误差限与有效数字的联系

用绝对误差来刻画近似数的精确程度是有局限性的,因为它没有反映出它在原数中所占的比例.于是,记

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

e_r 称为近似值 x^* 的相对误差,由于准确值 x 未知,实际上总把 $\frac{x - x^*}{x^*}$ 作为 x^* 的相对误差,相对误差一般用百分比表示.

相对误差绝对值的一个上限 ϵ_r^* 称作近似值的相对误差限,即有

$$\frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \epsilon_r^*.$$

下面分析相对误差限与有效数字的联系.

定理 1.1 设近似值 $x^* = \pm 0. a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$ 有 n 位有效数字,则其相对误差限为 $\frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$.

证 由于 x^* 有 n 位有效数字,则

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n},$$

而

$$|x^*| \geq a_1 \times 10^{m-1},$$

所以

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