



高等学校电子信息类专业规划教材

数值分析

冯有前 主 编

王国正 李炳杰 郭罗斌 副主编



清华大学出版社
<http://www.tup.tsinghua.edu.cn>



北京交通大学出版社
<http://press.bjtu.edu.cn>



21 世纪高等学校电子信息类专业规划教材

数 值 分 析

冯有前 主 编
王国正 李炳杰 郭罗斌 副主编

清 华 大 学 出 版 社
北 京 交 通 大 学 出 版 社
• 北 京 •

内 容 简 介

数值分析是理工科各专业的一门专业基础课。全书由 10 章组成,主要包括高次代数方程与超越方程数值解法、解线性方程组的直接法与迭代法、矩阵特征值与特征向量的数值解法、多项式插值与函数最优逼近、数值积分与数值微分、常微分方程初值问题数值解法、应用软件 MATLAB 和 MATHEMATICA 介绍等,主要介绍计算机常用算法的基本思想、误差分析及算法的优、缺点,以便于读者在应用时选取适当的算法。

本书在内容上既可以满足计算机专业和计算机信息与技术专业本科生的系统学习,也可以作为非计算机专业本科及研究生教材,同时可为广大科技工作者提供参考。

版权所有,翻印必究。

本书封面贴有清华大学出版社防伪标签,无标签者不得销售。

(本书防伪标签采用清华大学核研院专有核径迹膜防伪技术,用户可通过在图案表面涂抹清水,图案消失,水干后图案复现;或将表面膜揭下,放在白纸上用彩笔涂抹,图案在白纸上再现的方法识别真伪。)

图书在版编目(CIP)数据

数值分析/冯有前主编;王国正,李炳杰,郭罗斌副主编. —北京:清华大学出版社;北京交通大学出版社, 2005.3

(21 世纪高等学校电子信息类专业规划教材)

ISBN 7-81082-495-3

I. 数… II. ①冯… ②王… ③李… ④郭… III. 数值计算—高等学校—教材
IV. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 016674 号

责任编辑:刘汉斌

出版者:清华大学出版社 邮编:100084 电话:010-62776969

北京交通大学出版社 邮编:100044 电话:010-51686414

印刷者:北京鑫海金澳胶印有限公司

发行者:新华书店总店北京发行所

开 本:185×260 印张:12.5 字数:298 千字

版 次:2005 年 3 月第 1 版 2005 年 3 月第 1 次印刷

书 号:ISBN 7-81082-495-3/O·24

印 数:1~4000 册 定价:18.00 元

前 言

随着科学技术,特别是计算机技术的飞速发展,数值分析的应用已深入到国民经济的各个领域。越来越多的科技工作者使用数值分析方法进行科学研究和解决工程技术问题。因此,数值分析已成为各类工程技术人员的必备知识,也是许多专业的理工科大学学生、研究生的必修课。为了使广大科技人员能更好地选用合适算法,我们编写了《数值分析》这本教材。

本教材从介绍各个算法的基本思想、误差分析及算法的优、缺点出发,系统地介绍了常用数值方法,如高次代数方程与超越方程数值解法、解线性方程组的直接法与迭代法、矩阵特征值与特征向量的数值解法、多项式插值与函数最优逼近、数值积分与数值微分、常微分方程初值问题数值解法,以及数值计算和数学分析应用软件 MATLAB 和 MATHEMATICA。

本教材内容广泛,取材适当,强调算法的构造、应用和误差分析,每种算法都配以适当的例题和习题。各章内容具有一定的相对独立性,可根据教学情况适当取舍,其中打“*”号的内容难度较大,教学实施中可作为选讲内容。第 10 章 MATLAB 和 MATHEMATICA 应用软件介绍可由学生自学。

本教材由冯有前教授主编,参加编写的有郭罗斌、李炳杰、尹忠海、王国正及袁修久。本教材由朱林户教授主审。朱教授在认真审阅原稿的同时提出了许多宝贵的意见和建议。并爱雯、黄浩、梁晓龙为本教材做了大量的文字工作。在此,对在本教材编写过程中给予大力支持和帮助的所有同志表示衷心的感谢。

由于编者水平有限,书中缺点和错误之处在所难免,诚恳希望广大读者批评指正,以便进一步修改和完善。

编 者

2005 年 2 月

目 录

第 1 章 绪论	(1)
1.1 数值分析的一般概念	(1)
1.2 误差的基本概念	(2)
1.2.1 误差的来源与分类	(2)
1.2.2 绝对误差	(3)
1.2.3 相对误差	(3)
1.2.4 有效数字	(4)
1.2.5 数据误差影响的估计	(6)
1.3 选用和设计算法应注意的问题	(6)
习题	(9)
第 2 章 高次代数方程与超越方程数值解法	(11)
2.1 根的隔离与二分法	(11)
2.1.1 根的隔离	(11)
2.1.2 二分法	(12)
2.2 一般迭代法	(14)
2.2.1 一般迭代法及其收敛性	(14)
2.2.2 加速迭代法	(18)
2.3 牛顿法	(20)
2.3.1 牛顿迭代公式	(20)
2.3.2 牛顿法的收敛性	(21)
2.4 弦截法	(24)
习题	(27)
第 3 章 解线性方程组的直接法	(28)
3.1 引言	(28)
3.2 消去法	(28)
3.2.1 高斯消去法	(28)
3.2.2 主元消去法	(29)
3.3 矩阵的三角分解	(30)
3.4 紧凑格式与平方根法	(33)
3.4.1 紧凑格式	(33)
3.4.2 平方根法	(35)
3.5 三对角线性方程组的追赶法	(37)
3.6 向量和矩阵的范数	(39)
3.6.1 向量的范数	(39)

3.6.2 矩阵的范数·····	(40)
3.7 矩阵的条件数和方程组的性态·····	(43)
习题·····	(45)
第4章 解线性方程组的迭代法 ·····	(47)
4.1 引言·····	(47)
4.2 雅可比迭代法与高斯-塞德尔迭代法·····	(48)
4.2.1 雅可比迭代法·····	(48)
4.2.2 高斯-塞德尔迭代法·····	(49)
4.3 超松弛迭代法·····	(51)
4.4 迭代法的收敛性·····	(53)
4.4.1 一般迭代法收敛条件·····	(54)
4.4.2 常见迭代法收敛判别及举例·····	(56)
4.4.3 严格对角占优阵及正定阵·····	(56)
习题·····	(59)
第5章 插值法 ·····	(60)
5.1 引言·····	(60)
5.2 拉格朗日插值·····	(60)
5.2.1 线性插值与抛物插值·····	(60)
5.2.2 拉格朗日插值多项式·····	(62)
5.2.3 拉格朗日插值多项式的惟一性及插值余项·····	(63)
5.3 分段插值·····	(64)
5.3.1 分段线性插值与分段二次插值·····	(65)
5.3.2 分段三次埃尔米特插值·····	(66)
5.4 差商与牛顿插值多项式·····	(67)
5.4.1 差商·····	(67)
5.4.2 牛顿插值多项式·····	(68)
5.4.3 牛顿插值多项式的余项估计·····	(69)
5.5 差分与等距节点的插值多项式·····	(70)
5.5.1 差分的概念与差分表·····	(70)
5.5.2 等距节点插值公式·····	(72)
5.6 三次样条插值·····	(73)
5.6.1 三次样条函数的定义·····	(74)
5.6.2 三次样条函数的构造·····	(74)
5.6.3 边界条件·····	(75)
5.6.4 计算步骤及收敛性分析·····	(76)
习题·····	(77)
第6章 函数最优逼近法 ·····	(79)
6.1 引言·····	(79)
6.2 最小拟合多项式·····	(79)

6.3 函数的最优平方逼近·····	(81)
6.3.1 最优平方逼近·····	(81)
6.3.2 正规方程组·····	(83)
6.3.3 一般的最优平方逼近·····	(85)
6.4 最优一致逼近法·····	(86)
6.4.1 一致逼近的概念·····	(86)
6.4.2 切比雪夫多项式的基本性质·····	(87)
6.4.3 最优一致逼近多项式的求法·····	(89)
习题·····	(91)
第7章 数值积分与数值微分 ·····	(92)
7.1 引言·····	(92)
7.1.1 数值积分的基本思想·····	(92)
7.1.2 代数精度的概念·····	(93)
7.1.3 插值型积分公式·····	(94)
7.2 牛顿-柯特斯型数值积分公式·····	(95)
7.2.1 牛顿-柯特斯型求积公式·····	(95)
7.2.2 梯形公式和辛普生公式·····	(95)
7.2.3 误差分析·····	(96)
7.3 复化求积公式·····	(97)
7.3.1 复化梯形求积公式·····	(97)
7.3.2 复化辛普生公式·····	(98)
7.4 龙贝格积分法·····	(100)
7.4.1 区间逐次分半法·····	(100)
7.4.2 龙贝格积分法·····	(101)
7.5 高斯求积公式·····	(103)
7.6 数值微分·····	(107)
7.6.1 两点公式·····	(108)
7.6.2 三点公式·····	(108)
7.6.3 五点公式·····	(109)
习题·····	(110)
第8章 矩阵的特征值与特征向量的计算 ·····	(111)
8.1 引言·····	(111)
8.2 幂法、反幂法·····	(111)
8.2.1 幂法·····	(111)
8.2.2 反幂法·····	(114)
8.3 雅可比方法·····	(116)
8.3.1 基本思想·····	(116)
8.3.2 旋转矩阵及性质·····	(116)
8.4 豪斯荷尔德方法·····	(119)

8.4.1 镜像反射矩阵	(119)
8.4.2 实对称矩阵的三对角化	(121)
8.4.3 对称三对角矩阵的特征值的计算	(121)
8.5 求矩阵特征值的 QR 方法	(124)
8.5.1 矩阵的 QR 分解	(124)
8.5.2 QR 方法	(128)
习题	(128)
第 9 章 微分方程数值解法	(130)
9.1 引言	(130)
9.2 欧拉方法	(131)
9.2.1 欧拉公式	(131)
9.2.2 欧拉方法的改进	(133)
9.3 龙格-库塔方法	(138)
9.3.1 泰勒级数法及龙格-库塔法的基本思想	(138)
9.3.2 二阶龙格-塔库公式	(140)
9.3.3 三阶龙格-塔库方法	(141)
9.3.4 四阶龙格-库塔方法	(142)
9.3.5 变步长的龙格-库塔方法	(143)
9.4 单步法的收敛性与稳定性	(144)
9.4.1 单步法的收敛性	(144)
9.4.2 单步法的稳定性	(146)
* 9.4.3 绝对稳定性	(146)
9.5 阿达姆斯公式	(147)
9.5.1 阿达姆斯显式公式	(147)
9.5.2 阿达姆斯隐式公式	(149)
9.5.3 阿达姆斯预报-校正公式	(149)
9.6 微分方程组及高阶微分方程的数值解法	(151)
9.6.1 一阶微分方程组的数值解法	(151)
9.6.2 高阶微分方程的数值解法	(153)
* 9.7 常微分方程边值问题的差分法	(154)
9.7.1 差分方程的建立与求解	(154)
9.7.2 差分方程的可解性与收敛性	(156)
习题	(157)
* 第 10 章 MATLAB 和 MATHEMATICA 介绍	(159)
10.1 MATLAB 软件的使用	(159)
10.1.1 MATLAB 的运行环境	(159)
10.1.2 MATLAB 的安装	(159)
10.1.3 MATLAB 的运行及退出	(160)
10.1.4 MATLAB 的联机帮助	(160)

10.2	MATLAB 基础知识介绍	(161)
10.2.1	MATLAB 中的数字、变量及其运算	(161)
10.2.2	MATLAB 中矩阵的输入、生成及标识	(163)
10.2.3	MATLAB 中矩阵的基本运算	(164)
10.2.4	MATLAB 中矩阵的关系运算	(165)
10.2.5	MATLAB 中的绘图及图像处理	(165)
10.2.6	MATLAB 中的程序结构	(167)
10.2.7	MATLAB 中的 M 文件	(168)
10.3	MATLAB 的数学应用	(170)
10.3.1	MATLAB 中的基本数学函数	(170)
10.3.2	MATLAB 中的矩阵运算	(170)
10.3.3	MATLAB 求解方程与方程组	(172)
10.3.4	MATLAB 数据拟合与数据插值	(173)
10.3.5	MATLAB 中的微积分运算	(173)
10.3.6	MATLAB 求解常微分方程初值问题	(174)
10.4	MATHEMATICA 软件的使用	(175)
10.4.1	MATHEMATICA 的运行环境	(175)
10.4.2	MATHEMATICA 的安装	(175)
10.4.3	MATHEMATICA 的运行及退出	(175)
10.4.4	MATHEMATICA 的联机帮助	(176)
10.4.5	MATHEMATICA 基础知识介绍	(177)
10.4.6	MATHEMATICA 中的数值运算	(177)
10.4.7	MATHEMATICA 中的矩阵运算	(178)
10.4.8	MATHEMATICA 中的逻辑运算	(179)
10.4.9	MATHEMATICA 中的函数作图	(179)
10.5	MATHEMATICA 的数学应用	(181)
10.5.1	MATHEMATICA 中的数学函数	(181)
10.5.2	MATHEMATICA 中的符号运算	(182)
10.5.3	MATHEMATICA 中的矩阵运算	(182)
10.5.4	MATHEMATICA 的求解方程	(183)
10.5.5	MATHEMATICA 数据拟合与插值	(184)
10.5.6	MATHEMATICA 中的微积分运算	(185)
习题		(186)
参考文献		(188)

第 1 章 绪 论

1.1 数值分析的一般概念

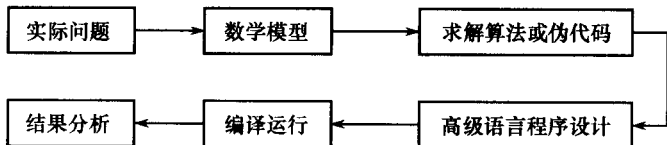
随着现代科学技术的发展,大量的工程问题被抽象为具体的符号化数学模型。模型的求解往往是一个复杂的数值计算问题。在实际解决这些计算问题的过程中,形成了数值分析(亦称计算方法)这门学科。今天,除了传统的理论方法和实验方法之外,计算数学的思想与方法已经渗透到自然科学的各个研究领域,并将许多领域的研究工作由定性阶段迅速推向定量阶段。

数值分析不同于传统的分析数学。数值分析是专门研究数学问题数值解法的分支,而分析数学是专门研究运算规则和表达方式的分支。高等数学和线性代数等传统分析数学为我们提供了解决各种不同类型数学问题的理论和结论,但对实际问题的解决还远远不够,即当计算不存在解析原函数的积分问题

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx, \quad \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

时,牛顿-莱布尼兹公式便失去了作用,需引入数值积分的计算方法。同样,求解线性代数方程组时,如果利用 Cramer 法则,则需计算许多行列式的值,计算量大得惊人,计算机根本无法实现,因此需引入一种可执行的算法来实现该目的。

为了说明数值分析研究的对象,首先考虑用计算机解决科学计算问题时的必需步骤,即



在上述步骤中,由实际问题结合相关学科专业知识和数学理论建立抽象数学模型的过程,需要熟悉相关学科知识及扎实的数学基本功,通常应归为应用数学的范畴。依据数学模型设计有效、稳定、便于实现的数值计算方法直到编写出程序并上机求解,属于数值分析研究的范畴。因此,数值分析是研究用计算机解决数学问题的数值计算方法及理论。本课程的主要内容包括线性方程组数值解法、插值与拟合、方程近似解、数值积分与数值微分、微分方程的数值解法、矩阵的特征值与特征向量的数值解法等,都是以数学问题为研究对象的。数值分析也是数学的一个分支,它不像传统的分析数学那样只研究数学本身的理论,而是主要研究求解数学模型的算法、算法的收敛性、稳定性、有效性及误差分析。因此,数值分析既具有纯数学高度抽象性与严密科学性的特点,又具有应用的广泛性与实际工程的高度技术性的特点,是一门与信息科学紧密结合的、实用性很强的数学课程。

结合数值分析这门课程的特点,学习时首先应注意掌握有关算法的基本原理和思想,各

不相同的方法可以源自于同一朴素直观的思想,如插值和拟合,与高等数学中的泰勒级数展开和傅里叶级数展开的基本原理是一致的,区别在于所选取的基函数不同;其次,要认真学习消化误差分析、收敛性及稳定性的基本理论;最后,为了掌握本课程的内容,还应做一定数量的理论分析与实际编程计算的练习,因为算法与算法的具体实现往往有一定差异,只有这样,才能真正学好这门课程。

1.2 误差的基本概念

实际工程中物理参量的实际数值即精确值,和用计算机算出来的值存在差异,这种差异称为误差。采用特定数值方法求出的解答往往是精确值的近似,因此研究和学习数值分析必须注重误差分析,要分析误差的来源和误差的传播情况,还要对计算结果给出合理的误差估计。

1.2.1 误差的来源与分类

误差的来源是多方面的,主要包括以下四类。

1. 模型误差

用数学模型描述实际问题时,往往只抓住少量主要因素,而忽略其余次要因素,因此数学模型是对被描述的实际问题的简化与抽象,仅仅是实际问题的近似。数学模型与实际问题之间的这种误差称为模型误差。只有实际问题的描述正确,建立数学模型时又抽象、简化得合理,才能得到好的结果。模型误差难于定量表示,且通常都假定数学模型是合理的,故这种误差可以忽略不计,在本课程中也不予讨论。

2. 观测误差

在数学模型中,往往有一些需要通过实验或测量而获得的数值参量,如温度、长度及电压等。观测得到的数据与实际数据本身总存在误差,这种误差称为观测误差。由于观测误差来源于观测或实验所使用的工具,故可看做是一个均值为零的随机量而忽略不计,也不属于本课程讨论的范畴。

3. 截断误差

任何一个实际计算问题必须在有限的步骤内结束,即只能采用有限项运算来完成,而理论上的精确值往往要对应无限项的求和过程,故只能截取有限项进行近似计算,由此产生的误差称为截断误差。

例如,已知 $x > 0$, 求 e^{-x} 时,由表达式

$$e^{-x} = 1 + (-x) + \frac{1}{2!}(-x)^2 + \frac{1}{3!}(-x)^3 + \cdots + \frac{1}{n!}(-x)^n + \cdots$$

当 $|x|$ 较小时,可取前三项之和,即 $S(x) = 1 - x + \frac{1}{2}x^2$ 作为 e^{-x} 的近似值。其截断误差为

$$E(x) = e^{-x} - S(x) = \frac{(-x)^4}{4!}e^{\theta x} \quad 0 < \theta < 1$$

4. 舍入误差

由于计算机的字长有限,故计算机只能用有限位表示浮点数的尾数和阶数,机器的可表示数集必为有限集,对超出尾数有效位数的部分都要采取措施进行舍入处理,由此产生的误

差称为舍入误差。

观测误差和原始数据的舍入误差虽然来源不同,但对计算结果的影响完全一致。数学模型和实际问题之间的模型误差,在现有理论水平和计算机计算能力的条件下,往往是无法解决的。基于上述原因,截断误差和舍入误差是数值分析研究的主要对象,讨论它们在计算过程中的传播和对计算结果的影响,研究如何控制其影响以保证计算的精度,并以此得到简便、有效、稳定的数值算法。

1.2.2 绝对误差

定义 1.1 设某一数的精确值为 x , 其近似值为 x^* , 那么称 x 与 x^* 之差

$$E(x) = x - x^*$$

为近似值 x^* 的绝对误差, 简称误差。

$E(x)$ 绝对值的大小标志着 x^* 的精度。一般在同一物理量的不同近似值中, $E(x)$ 的绝对值越小, x^* 的精度越高。绝对误差具有与精确值 x 完全相同的量纲。

由于精确值 x 未知, 故 $E(x)$ 的准确值也不能求出, 但如果根据具体测量或计算的情况, 预先确定一个正数 η , 使得

$$|E(x)| = |x - x^*| \leq \eta$$

则称 η 为 x^* 的绝对误差限, 即为绝对误差值的上限, 简称为 x^* 的误差限。显然有

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

有时也可用

$$x = x^* \pm \eta$$

表示近似值的精度或准确值所在的范围。

1.2.3 相对误差

对于不同量的近似值, 误差限的大小并不能完全反映近似值的近似程度, 如设

$$\begin{array}{ll} x^* = 10 & x = 10 \pm 1 \\ y^* = 10000 & y = 10000 \pm 10 \end{array}$$

则

$$|E(x)| = 1, |E(y)| = 10$$

$$|E(x)| = \frac{1}{10} |E(y)|$$

似乎 x^* 的近似程度要好于 y^* , 但 $\frac{|E(x)|}{x^*} = \frac{1}{10}$, $\frac{|E(y)|}{y^*} = \frac{10}{10000} = \frac{1}{1000}$, 即 x^* 的误差范围为 10%, y^* 的误差范围为 1‰, 显然 y^* 的近似程度要好于 x^* 。为解决这一问题, 我们引入相对误差的概念。

称绝对误差与精确值之比

$$E_r(x) = \frac{E(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x}$$

为近似值 x^* 的相对误差。相对误差没有量纲。由于精确值 x 一般不容易计算, 故实际计算时通常取

$$E_r^*(x) = \frac{E(x)}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*}.$$

作为近似值 x^* 的相对误差。显然

$$|E(x)| = |x^*| \times |E_r^*(x)|$$

与前面引入的误差一样,相对误差的取值也可正、可负,若存在一个正数 δ 使得 $|E_r^*(x)| \leq \delta$, 则称 δ 为近似值 x^* 的相对误差限。显然,相对误差限是相对误差绝对值的上限,且 $\delta = \frac{\eta}{|x^*|}$ 。

【例 1.1】 用有毫米刻度的尺子测量办公桌的长度,读出的长度为 $x^* = 1200\text{mm}$,由于存在观测误差,故这是一个近似值。由尺子的精度知道,该近似值的误差不超过 0.5mm ,则有

$$|E(x)| = |x - x^*| \leq 0.5\text{mm}$$

也可写成

$$x = (1200 \pm 0.5)\text{mm}$$

即

$$1199.5\text{mm} \leq x \leq 1200.5\text{mm}$$

其相对误差限为

$$\delta = \frac{\eta}{|x^*|} = \frac{0.5}{1200} = \frac{1}{2400}$$

1.2.4 有效数字

当准确值 x 的位数很多时,通常按四舍五入原则得到 x 的近似值 x^* 。例如

$$x = \pi = 3.1415926\cdots$$

取三位

$$x^* = 3.14 \quad |E(x)| \leq 0.005$$

取五位

$$x^* = 3.1416 \quad |E(x)| \leq 0.00005$$

它们的误差都不超过末位数字的半个单位,即

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

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

为了可以从近似数的有限位小数本身就能求出近似数的误差估计,现引入有效数字的概念。

定义 1.2 若近似值 x^* 的误差限是某一位的半个单位,该位到第一位非零数字共有 n 位,则称 x^* 有 n 位有效数字。

【例 1.2】 设近似值 $x^* = 0.06052$,它对应的精确值 $x = 0.0605173$,问 x^* 有几位有效数字。

解: 因为 x^* 是通过 x 在小数点后第六位四舍五入而产生的,因此 x^* 精确到 10^{-5} 位,由此推出 x^* 有 4 位有效数字。

由于任何一个实数 x 经四舍五入后得到的近似值 x^* 都可以表示为

$$x^* = \pm (a_1 \times 10^{-1} + a_2 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n}) \times 10^m \quad (1-1)$$

所以若其绝对误差限满足

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

则 x^* 有 n 位有效数字。其中, m 为整数, a_1 是 1~9 中的任一个数字, $a_2, a_3, \cdots, a_n$ 是 0~9 中的任一个数字。

【例 1.3】按四舍五入原则写出下列各数具有 5 位有效数字的近似值:

163.3426, 0.038674875, 6.000021, 2.7182817

解:按上述定义及结论,各数具有 5 位有效数字的近似值分别为:

163.34, 0.038675, 6.0000, 2.7183

注意:6.000021 的 5 位有效数字的近似值是 6.0000,而不是 6,因为 6 只有一位有效数字。

有效数字与绝对误差、相对误差的关系:

(1) 若某数 x 的近似值 x^* 有 n 位有效数字,则

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

显然,当 m 相同时, n 越大, 10^{m-n} 越小,即有效位数越多,其绝对误差限越小。

(2) 若 x^* 有 n 位有效数字,且 $x^* = \pm (a_1 \times 10^{-1} + a_2 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n}) \times 10^m$, $a_1 \neq 0$, 则其相对误差限为

$$|E_r^*(x)| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1} \quad (1-3)$$

反之,若 x^* 的相对误差限满足

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

则 x^* 至少具有 n 位有效数字。

证明:由于 $x^* = \pm (a_1 \times 10^{-1} + a_2 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n}) \times 10^m$, 故

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

从而

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

反之,若 x^* 的相对误差限满足

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

则由于

$$|E(x)| = |x^*| \times |E_r^*(x)|$$

$$|x^*| < (a_1 + 1) \times 10^{m-1}$$

故

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

由定义, x^* 至少具有 n 位有效数字。

上述结论说明,有效位数越多,相对误差限就越小。

1.2.5 数据误差影响的估计

任何抽象的数学模型总可以归纳为符号化的函数形式,即

$$y = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

其中,参量 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 为输入, y 为输出。如果给定的参量有误差,则解 y (输出)一定也有误差。对此,一般采用泰勒展开式近似估计。

设参数 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的近似值为 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$, 相应解为 y , 则近似解 y^* 的绝对误差为

$$\begin{aligned} E(y) &= y - y^* = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_n) - \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) \\ &\approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} E(x_i) \end{aligned} \quad (1-5)$$

解的相对误差为

$$\begin{aligned} E_r^*(y) &= \frac{E(y)}{y^*} \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} \frac{x_i^*}{\varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)} E_r^*(x_i) \end{aligned} \quad (1-6)$$

利用式(1-6)可求出如下一些简单函数的误差估计(证明留做练习),即

$$\begin{cases} E(x_1 + x_2) = E(x_1) + E(x_2) \\ E_r^*(x_1 + x_2) = \frac{x_1^*}{x_1^* + x_2^*} E_r^*(x_1) + \frac{x_2^*}{x_1^* + x_2^*} E_r^*(x_2) \end{cases} \quad (1-7)$$

$$\begin{cases} E(x_1 x_2) = x_2^* E(x_1) + x_1^* E(x_2) \\ E_r^*(x_1 x_2) = E_r^*(x_1) + E_r^*(x_2) \end{cases} \quad (1-8)$$

$$\begin{cases} E\left(\frac{x_1}{x_2}\right) = \frac{E(x_1)}{x_2^*} - \frac{x_1^*}{x_2^{*2}} E(x_2) \\ E_r^*\left(\frac{x_1}{x_2}\right) = E_r^*(x_1) + E_r^*(x_2) \end{cases} \quad (1-9)$$

$$\begin{cases} E(\sqrt{x}) = \frac{1}{2\sqrt{x^*}} E(x) \\ E_r^*(\sqrt{x}) = \frac{1}{2} E_r^*(x) \end{cases} \quad (1-10)$$

1.3 选用和设计算法应注意的问题

衡量算法的标准有:算法是否稳定;算法的逻辑结构是否简单;算法的运算次数和算法的存储量是否尽量少等。当这些要求不能兼备时,应根据需要、权衡利弊而做出抉择。一般地,设计和使用算法应注意如下几个问题。

1. 构造计算机能用的算法

有许多数学问题的解不可能经过有限的算术运算来实现,如三角函数值(任意角),一般

方程的根,计算任意函数的积分,求一般微分方程的解等。

例如,要给出求 $f(x)=0$ 根的算法,可由 $f(x)-f(x_n)\approx f'(x_n)(x-x_n)$,当 x 为方程 $f(x)=0$ 的根时,有 $-f(x_n)\approx f'(x_n)(x-x_n)$,可解出 $x\approx x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$,令 $x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ 而得到迭代公式,通过给出初值 x_0 ,经上式逐步迭代得迭代序列 $x_0, x_1, \dots, x_n, \dots$,若该序列收敛,则可经 k 步迭代后中止迭代,取 x_k 作为近似解 x^* ,该方法就是第2章要介绍的牛顿迭代法。这样的算法就是计算机能用的算法。

如要求解 $x^2-2=0$ 的根,则可令 $x_{n+1}=x_n-\frac{x_n^2-2}{2x_n}=\frac{1}{2}\left(x_n+\frac{2}{x_n}\right)$,取 $x_0=1.4$,得 $x_1=1.414285714, x_2=1.414213564$,经两步迭代即可求得较好的近似解 $x^*=1.414213564\approx\sqrt{2}$ 。

2. 选用数值稳定的计算公式

一个算法是否稳定是十分重要的。如果算法不稳定,那么数值计算的结果就会严重背离数学模型的真实结果。下面我们通过一个例子加以说明。

【例 1.4】 计算定积分

$$I_n = e^{-1} \int_0^1 x^n e^x dx \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

解:利用分部积分法不难求得 I_n 的递推关系式为

$$\begin{cases} I_n = 1 - nI_{n-1} \\ I_0 = 1 - e^{-1} \approx 0.6321 \end{cases} \quad (1-11)$$

由式(1-11)可依次算得如下结果,即

$$\begin{array}{lll} I_0^* = 0.6321 & I_1^* = 0.3679 & I_2^* = 0.2642 \\ I_3^* = 0.2074 & I_4^* = 0.1704 & I_5^* = 0.1480 \\ I_6^* = 0.1120 & I_7^* = 0.2160 & I_8^* = -0.7280 \end{array}$$

由于

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

I_n 不可能为负,故 $I_8^* = -0.7280$ 显然是错误的。因此,当 n 较大时,按递推公式(1-11)所算出结果的误差很大。错误产生的原因是 I_0^* 本身有不超过 $E_0 = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$ 的误差,由此引起以后各步计算误差 $E_n = I_n - I_n^*$,它又与 I_1 的误差一起顺序乘以 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 而传播积累到 I_7^*, I_8^* 中去,从而使得 I_7^*, I_8^* 的结果面目全非。

如果将式(1-11)改为

$$I_{n-1} = \frac{1}{n}(1 - I_n) \quad (1-12)$$

则当 $n=7$ 时,由上面的估计式取 $I_7^* = 0.1124$ 开始,按式(1-12)计算有如下结果,即

$$\begin{array}{lll} I_7^* = 0.1124 & I_6^* = 0.1269 & I_5^* = 0.1455 \\ I_4^* = 0.1708 & I_3^* = 0.2073 & I_2^* = 0.2643 \end{array}$$

$$I_1^* = 0.3680 \quad I_0^* = 0.6320$$

由此可以看出,按递推关系式(1-12)算出 $I_0^* = 0.6320$,与按 $I_0^* = 1 - e^{-1} = 0.6321$ 的结果相差无几。

上例说明,不同的算法,对初始数据误差(或计算过程的某一步的舍入误差)的传播一般不同。一个算法,如果初始数据的误差对计算结果影响不大,则该算法的稳定性好;反之,如果初始数据的误差对计算结果的影响很大,则这种算法就不是稳定的算法。解决实际工程中的数值问题时,一定要选用稳定的算法。

3. 防止两个相近数相减

两个相近数相减,则这两个相近数的前几位相同的有效数字会在相减中消失,从而减少有效数字。所以遇到这种情形时,应当多保留这两个相近数的有效数字或者对公式进行处理,以避免减法,特别要避免再用这个差做除数。例如,求式

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

的值,当 $x = 1000$,取四位有效数字计算时得

$$\sqrt{x+1} = 31.64, \quad \sqrt{x} = 31.62$$

两者直接相减得

$$y = 0.02$$

结果只剩一位有效数字,损失了三位有效数字,从而使绝对误差与相对误差都变得很大,严重影响最终计算精度。

如果通过分母有理化操作,将式 $y = \sqrt{x+1} - \sqrt{x}$ 处理成

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

则可求得 $y = 0.01581$,不只有一位有效数字。由此可见,通过等价变换,避免两个相近数相减可减小运算中的精度损失,从而可获得较精确的结果。

4. 简化计算步骤,减少运算次数

虽然目前计算机的运算和存储能力都有了突飞猛进的发展,但人们在编程求解数值问题时仍面临着运算和存储能力不足的问题,如大量图像处理问题,一幅卫星彩图可能有高达 90MB 的数据量。对这类问题必须要考虑算法所需的运算量,要充分考虑先算什么量,后算什么量,哪些运算可以省略和简化。在此我们以多项式的求值为例,说明减少运算次数的重要性 and 有效性。计算多项式

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k$$

的值,若直接逐项求和运算,则计算 $a_k x^k$ 这一项就要做 k 次乘法,而 $P_n(x)$ 共有 $n+1$ 项,所以要做

$$1 + 2 + 3 + \cdots + n = \frac{1}{2} n(n+1)$$

次乘法和 n 次加法。但若按著名的秦九韶算法,即

$$\begin{cases} u_0 = a_n \\ u_k = u_{k-1} \cdot x + a_{n-k} \end{cases} \quad (1-13)$$

对 $k = 1, 2, \dots, n$ 反复执行算式(1-13),则最终得到的 u_n 就是所求的结果。这只需做 n