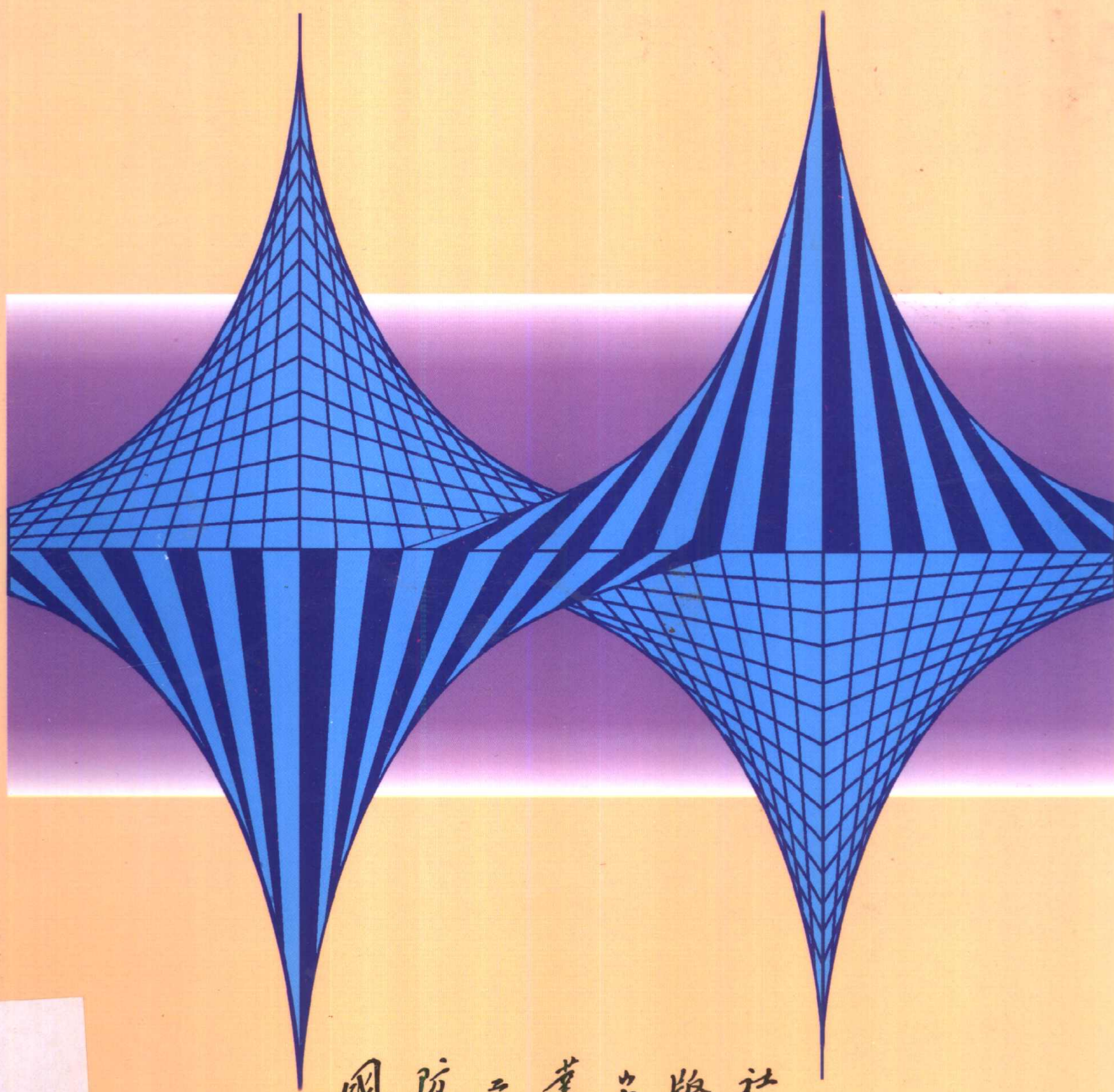


数值分析教程

主编 杨万利

副主编 牛庆银 董玉才 许世蒙 杜健



国防工业出版社

31

02-01-98
XZ
1

21 世纪高等学校教材

数值分析教程

主 编 杨万利
副主编 牛庆银 董玉才
许世蒙 杜 健

国防工业出版社

·北京·

图书在版编目(CIP)数据

数值分析教程/杨万利主编. —北京:国防工业出版社, 2002(2002.6 重印)

ISBN 7-118-02730-8

I. 数... II. 杨... III. 计算方法—教材
IV. 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 086769 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 100044)

涿中印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 787×1092 1/16 印张 12 271 千字

2002 年 1 月第 1 版 2002 年 6 月北京第 2 次印刷

印数:3001—6000 册 定价:23.00 元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

参加编写人员

主 编 杨万利

副 主 编 牛庆银 董玉才 许世蒙 杜 健

参编人员(以姓氏笔画为序)

马润波 牛庆银 刘文学 刘俊红

许世蒙 杜 健 李 军 杨万利

张海波 林 敏 徐万里 董玉才

前 言

数值分析方法是数学与工程技术应用不可或缺的“接口”,我们将传统的数值分析内容与目前流行的数学软件使用方法结合起来整合成这本《数值分析教程》。一改传统数值分析教学中只注重理论讲授的方法体系,将数学软件的使用原理穿插于数值分析讲授之中,使学员在数值分析的理论学习中能方便地借助于数学软件进行数值处理,并在数学软件的使用中了解其编程的数学理论与方法。也寄希望于在面向 21 世纪工程院校数学课程体系改革中做一些探索。

本教程作为讲义曾在装甲兵工程学院为本科生讲授过两届,这次由杨万利及主讲教员董玉才、牛庆银、杜健、刘文学等在原稿的基础上修改而成,其中,所有计算机编程都是由董玉才一人完成。

由于时间仓促,本书错误在所难免,恳请专家及学员同志们提出宝贵的意见。

编 者
2001 年 9 月

目 录

第 1 章 误差与范数	1
§ 1.1 误差与有效数字	1
1.1.1 误差的基本概念	1
1.1.2 有效数字	2
§ 1.2 误差的传播	4
1.2.1 误差估计的基本运算	4
1.2.2 数值稳定性	5
§ 1.3 数值计算中应注意的问题	7
§ 1.4 向量范数与矩阵范数	10
1.4.1 向量范数	10
1.4.2 矩阵范数	11
第 2 章 线性代数方程组的解法	14
§ 2.1 解线性方程组的直接法	14
2.1.1 Gauss 消元法	14
2.1.2 LU 分解法	16
2.1.3 条件数与误差分析	20
§ 2.2 解线性代数方程组的迭代法	22
2.2.1 迭代法的一般形式	22
2.2.2 Jacobi 迭代法	24
2.2.3 Gauss-Seidel 迭代法	27
2.2.4 迭代法收敛的另一判定准则	29
习题	30
第 3 章 代数特征值问题	32
§ 3.1 幂法与反幂法	32
3.1.1 幂法与 Rayleigh 商迭代法	32
3.1.2 反幂法	36
§ 3.2 QR 方法	38
3.2.1 反射变换(矩阵)	38
3.2.2 矩阵的 QR 分解	39
3.2.3 QR 方法	41
§ 3.3 Jacobi 方法	43
3.3.1 平面旋转变换	43

3.3.2 经典 Jacobi 方法	44
习题	48
第 4 章 代数插值与曲线拟合	50
§ 4.1 插值基本概念	50
4.1.1 代数插值问题的提法	50
4.1.2 插值多项式的存在唯一性	51
4.1.3 插值余项	51
§ 4.2 拉格朗日插值多项式	52
4.2.1 拉格朗日插值多项式的基本概念	52
4.2.2 线性插值与抛物插值	53
4.2.3 拉格朗日插值多项式的性质	54
4.2.4 拉格朗日插值多项式的误差估计	55
§ 4.3 牛顿插值公式	60
4.3.1 差商与牛顿基本插值公式	60
4.3.2 差分与等距结点下的牛顿公式	62
§ 4.4 Hermite 插值多项式	64
4.4.1 Hermite 插值多项式	64
4.4.2 Hermite 插值公式	65
4.4.3 Hermite 插值公式的余项	67
§ 4.5 分段(低次)插值法	70
4.5.1 高次插值的龙格现象	70
4.5.2 分段线性插值与分段二次插值	71
4.5.3 三次样条插值	72
§ 4.6 曲线拟合的最小二乘法	78
4.6.1 最小二乘问题的提法	78
4.6.2 最小二乘解的求法	79
习题	82
第 5 章 非线性方程求根	86
§ 5.1 根的搜索	86
5.1.1 逐步搜索法	86
5.1.2 二分法	86
§ 5.2 非线性方程求根的迭代法	89
5.2.1 迭代过程的收敛性	89
5.2.2 迭代公式的加工	95
§ 5.3 牛顿法	99
5.3.1 牛顿公式	99
5.3.2 牛顿法的几何解释	99
5.3.3 牛顿法的局部收敛性	100
5.3.4 牛顿下山法	101

5.3.5 应用举例	103
§ 5.4 弦截法与抛物线法	105
5.4.1 弦截法	106
5.4.2 抛物线法	108
§ 5.5 代数方程求根	110
5.5.1 多项式求值的秦九韶算法	111
5.5.2 代数方程的牛顿法	111
5.5.3 劈因子法	112
习题	115
第 6 章 常微分方程初值问题的数值解法	116
§ 6.1 欧拉方法	116
6.1.1 欧拉公式	116
6.1.2 后退的欧拉公式	118
6.1.3 梯形公式	121
6.1.4 改进的欧拉公式	122
6.1.5 欧拉两步公式	123
§ 6.2 龙格—库塔方法	125
6.2.1 Taloy 级数法	125
6.2.2 龙格—库塔法	126
6.2.3 二阶龙格—库塔公式	127
6.2.4 4 阶龙格—库塔公式	128
§ 6.3 单步法的收敛性与稳定性	129
6.3.1 单步法的收敛性	129
6.3.2 单步法的稳定性	131
习题	133
第 7 章 数值积分与数值微分	136
§ 7.1 插值型数值积分公式	136
7.1.1 求积公式和它的代数精度	136
7.1.2 插值型数值积分公式	137
§ 7.2 Newton-Cotes 求积公式	138
7.2.1 Newton-Cotes 求积公式	138
7.2.2 Newton-Cotes 公式的稳定性	140
7.2.3 Newton-Cotes 公式余项	141
§ 7.3 复化求积公式与外推算法	143
7.3.1 复化求积法	143
7.3.2 变步长算法	146
7.3.3 Richardson 外推算法	149
7.3.4 Romberg 算法	150
§ 7.4 样条插值积分	152

§ 7.5 Gauss 求积公式	153
7.5.1 Gauss 求积公式	153
7.5.2 Gauss 求积公式的收敛性与稳定性	155
7.5.3 带权的 Gauss 求积公式	157
§ 7.6 数值微分	158
7.6.1 两点公式	159
7.6.2 三点公式	160
习题	162
第 8 章 简单偏微分方程的解法	165
§ 8.1 典型偏微分方程	165
§ 8.2 分离变量法	168
§ 8.3 行波法	173
§ 8.4 偏微分方程的差分解法	176
习题	180
参考文献	182

第 1 章 误差与范数

§ 1.1 误差与有效数字

1.1.1 误差的基本概念

数值计算方法,是用于求得数学问题近似解的方法和过程,因此,在计算过程中,误差是不可避免的。引起误差的因素很多,主要有以下几种:

1. 模型误差

用数学方法解决实际问题,首先必须建立该问题的数学模型,即把实际问题经过抽象,忽略一些次要因素,简化成一个确定的数学问题。数学模型只是对实际问题的一种近似的描述,因而它与实际问题之间必然存在误差,这种误差称为模型误差。

2. 观测误差

数学问题中总是包含一些参量,它们的值往往是由观测得到的。而观测却不可能绝对准确,由此产生的误差称为观测误差。

3. 截断误差

一般来讲,求得一个数学问题的精确解往往是困难的甚至是不可能的,常常需要将问题进行简化,以简化问题的解作为原问题解的近似。对复杂的原问题进行简化的方法很多,常用的方法是“保留主部项,截去无穷项”,即用主部项“代替”整体项,这一方法特别称为截断法。如求一个收敛的无穷数列之和,总是用它的部分和作为它的近似值,也就是截去该级数后面的无穷多项。如此所引起的解的误差称为截断误差。例如

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!} + \cdots$$

当 $|x|$ 很小时,可以用 $1 - \frac{x^2}{2}$ 作为 $\cos x$ 的近似值。由交错级数判敛的莱布尼兹(Leibniz)

准则,可知它的截断误差的绝对值不超过 $\frac{x^4}{24}$ 。

4. 舍入误差

在计算过程中往往要对数字进行舍入。如受机器字长的限制,无穷小数和位数很多的数必须舍入成一定的位数。这样产生的误差称为舍入误差。

研究上述四种误差在数值计算中所产生的影响程度,称为误差分析。一般,人们常用绝对误差、相对误差或有效数字来进行误差分析。

定义 1.1.1 设 x^* 为准确值 x 的一个近似值,称

$$e = x - x^* \tag{1.1.1}$$

为近似值 x^* 的绝对误差,简称误差。

一般情况下准确值 x 难以求出,从而也就不能算出绝对误差 e 的准确值,但可以根据测量工具或计算的情况估计出它的取值范围,即估计出误差绝对值的一个上界 ϵ

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

通常称 ϵ 为近似值 x^* 的绝对误差限,简称误差限。显然,误差限不是唯一的。

有了误差限及近似值,就可以得到准确值的范围

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

即准确值 x 必定在区间 $[x^* - \epsilon, x^* + \epsilon]$ 内,也常记作

$$x = x^* \pm \epsilon$$

容易看出,经过四舍五入得到的数,其误差必定不超过被保留的最后数位上的半个单位,即最后数位上的半个单位为其误差限。例如若取 π 的近似值为 3.14,则

$$|\pi - 3.14| \leq 0.0016 \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

若取 $\pi \approx 3.142$,则

$$|\pi - 3.14| \leq 0.0041 \leq \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

误差限的大小不能完全反映近似值的精确程度。例如测量百米跑道长时,误差不超过 10cm,而测量黑板长时得其长度为 3m,误差不超过 1cm。就误差限而言,前者为后者的 10 倍,但由于前者只占所量长度的千分之一,而后者误差则占所量长度的三百分之一,显然测量百米跑道的结果更为准确。因此,要刻画近似值的精确误差,不仅要看绝对误差的大小,还必须考虑所测量本身的大小,由此引出了相对误差的概念。

定义 1.1.2 设 x^* 为准确值 $x (x \neq 0)$ 的近似值,称绝对误差与准确值之比为近似值的相对误差,记为 e_r ,即

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

由于在计算过程中准确值 x 总是未知的,故一般取相对误差为

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

可以证明,当 $|e_r|$ 很小时, $\frac{e}{x} - \frac{e}{x^*}$ 是 e_r 的高阶无穷小,可以忽略不计。所以,取绝对误差与近似值之比为相对误差是合理的。

同样,相对误差也只能估计其上限。如果存在正数 ϵ_r ,使得

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

则称 ϵ_r 为 x^* 的相对误差。显然,误差限与近似值绝对值之比 $\frac{\epsilon}{|x^*|}$ 为 x^* 的一个相对误差限。

1.1.2 有效数字

有效数字是近似值的一种表示法。它既能表示近似值的大小,又能表示其精确程度。

在计算过程中,常常按四舍五入的原则取数 x 的前几位数为其近似值。例如 $x = \sqrt{2} = 1.4142135\cdots$,取前四位数得

$$x^* = 1.414$$

$x = \pi = 3.1415926\cdots$ 取前五位数得

$$x^* = 3.1416$$

前面已经提到,通过四舍五入得到的数,其绝对误差均不超过末位数字的半个单位,即

$$|\sqrt{2} - 1.414| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

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

如果近似值 x^* 的误差限是 $\frac{1}{2} \times 10^{-n}$, 则称 x^* 准确到小数点后第 n 位, 并从第一个非零数字到这一位的所有数字均称为有效数字。例如 $\sqrt{2}$ 的近似值 1.414 准确到小数点后的第 3 位, 它具有 4 位有效数字。3.1416 作为 π 的近似值精确到小数点后第 4 位, 有 5 位有效数字。一般地, 如果近似值 x^* 可写成规格形式

$$x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times \cdots 10^m \quad (1.1.5)$$

其中 m 为整数, $a_1 \neq 0$, $a_i (i = 1, 2, \cdots)$ 为 $0 \sim 9$ 之间的整数。且

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

则称近似值有 n 位有效数字。

式(1.1.6)表明, 可以用有效数字位数来刻画误差限。形如式(1.1.5)的数, 当 m 一定时, 其有效数字位数越大, 则误差限越小。例如若 $x^* = 1452.046$ 是具有 7 位有效数字的近似值, 则它的误差限为

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

又若 $x^* = 1452.0$ 是具有 5 位有效数字的近似值, 则其误差限为 $\frac{1}{2} \times 10^{-1}$ 。

下面的定理给出了相对误差限与有效数字的关系。

定理 1.1.1 若 x 的近似值 $x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m (a_1 \neq 0)$ 有 n 位有效数字, 则 $\frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$ 为其相对误差限。反之, 若 x^* 的相对误差限 ϵ_r 满足

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

则 x^* 至少具有 n 位有效数字。

证明 由式(1.1.2)

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

从而有

$$|e_r| = \left| \frac{e}{x^*} \right| \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m} \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$$

所以 $\frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$ 是 x^* 的相对误差限。若 $\epsilon_r \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-n+1}$, 由式(1.1.4)

$$|e| = |x^* e_r| \leq 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m \epsilon_r \leq$$

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

由式(1.1.6), x^* 至少有 n 位有效数字。

定理 1.1.1 表明, 由有效数字位数可以求出相对误差限。如 $x^* = 2.72$ 是 $x = e$ 的具有 3 位有效数字的近似值, 故其相对误差限为

$$\varepsilon_r = \frac{1}{2 \times 2} \times 10^{-3+1} = 0.25 \times 10^{-2}$$

§ 1.2 误差的传播

1.2.1 误差估计的基本运算

本节中所分析的基本运算, 是指四则运算与一些常用函数的计算。首先利用微分运算公式来导出误差运算公式。

设数值计算中求得的解与参数(原始数据) $x_1, x_2, \dots, x_n$ 有关, 记为

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (1.2.1)$$

参数的误差必定引起解的误差。设 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的近似值分别为 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$, 相应的解为

$$y^* = f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) \quad (1.2.2)$$

假定 f 在点 $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ 可微, 则当数据误差较小时, 解的绝对误差为

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

解的相对误差为

$$\begin{aligned} e_r(y^*) &= \frac{e(y^*)}{y^*} \approx d(\ln f) = \\ &\sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} \frac{e(x_i^*)}{f(x_1^*, \dots, x_n^*)} = \\ &\sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} \frac{x_i^*}{f(x_1^*, \dots, x_n^*)} e_r(x_i^*) \end{aligned} \quad (1.2.3)$$

特别地, 由式(1.2.2) 及式(1.2.3) 可得和、差、积、商之误差公式

$$\begin{cases} e(x_1 \pm x_2) = e(x_1) \pm e(x_2) \\ e_r(x_1 \pm x_2) = \frac{x_1}{x_1 \pm x_2} e_r(x_1) \pm \frac{x_2}{x_1 \pm x_2} e_r(x_2) \end{cases} \quad (1.2.4)$$

$$\begin{cases} e(x_1 x_2) \approx x_2 e(x_1) + x_1 e(x_2) \\ e_r(x_1 x_2) \approx e_r(x_1) + e_r(x_2) \end{cases} \quad (1.2.5)$$

$$\begin{cases} e\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \frac{1}{x_2}e(x_1) - \frac{x_1}{x_2^2}e(x_2) \\ e_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx e_r(x_1) - e_r(x_2) \end{cases} \quad (1.2.6)$$

式(1.2.4) ~ 式(1.2.6) 表明, 和、差之误差为误差之和、差, 积、商的相对误差为相对误差之和、差。由以上各式还可得出

$$|e(x_1 \pm x_2)| = |e(x_1) \pm e(x_2)| \leq |e(x_1)| + |e(x_2)| \quad (1.2.7)$$

$$|e_r(x_1 x_2)| \approx |e_r(x_1) + e_r(x_2)| \leq |e_r(x_1)| + |e_r(x_2)| \quad (1.2.8)$$

$$\left|e_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right)\right| \approx |e_r(x_1) - e_r(x_2)| \leq |e_r(x_1)| + |e_r(x_2)| \quad (1.2.9)$$

因此, 和、差的误差限不超过各数的误差限之各, 积、商的相对误差限不超过各数的相对误差限之和。

例 1.2.1 设 $y = x^n$, 求 y 的相对误差与 x 的相对误差之间的关系。

解 $e_r(y) \approx d(\ln x^n) = n d(\ln x) = n e_r(x)$

所以 x^n 的相对误差是 x 的相对误差的 n 倍。特别地, $\sqrt{x}$ 的相对误差是 x 的相对误差的一半。

1.2.2 数值稳定性

计算一个数学问题, 需要预先设计好由已知数据计算问题的运算顺序, 这就是算法。例如, 计算积分值

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

由关系式

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

及不等式

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

可设计如下算法

(算法 I)

取 $I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln 1.2$, 按顺序递推公式

$$I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (1.2.10)$$

依次计算 $I_1, I_2, \dots$ 的近似值。

(算法 II)

取 $I_n^* \approx \frac{1}{2} \left[\frac{1}{6(n+1)} + \frac{1}{5(n+1)} \right]$, 按反递推公式

$$I_{k-1} = \frac{1}{5} \left(\frac{1}{k} - I_k \right) \quad (k = n, n-1, \dots, 1) \quad (1.2.11)$$

依次计算 $I_{n-1}, I_{n-2}, \dots, I_0$ 的近似值。

分别取 $I_0^* = 0.182\ 321\ 55$, $I_{14}^* = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{6 \times 15} + \frac{1}{5 \times 15} \right) \approx 0.012\ 222\ 22$, 按算法 I、II 的计算结果列于表 1.1。

表 1.1

n	I_n (按算法 I 计算)	I_n (按算法 II 计算)
0	0.182 321 55	0.182 321 55
1	0.088 392 25	0.088 392 22
2	0.058 038 75	0.058 038 92
3	0.043 139 58	0.043 138 73
4	0.034 302 08	0.034 306 33
5	0.028 489 58	0.028 468 35
6	0.024 218 75	0.024 324 91
7	0.021 763 39	0.021 232 60
8	0.016 183 05	0.018 836 99
9	0.030 195 88	0.016 926 17
10	-0.050 979 41	0.015 369 14
11	0.345 806 12	0.014 063 39
12	-0.645 697 26	0.013 016 36
13	8.305 409 38	0.011 841 27
14	-41.455 618 31	0.012 222 22

由表中结果可见,按算法 I 得到 $I_{10}^* < 0$,这显然是不符实际的,因为对任意 $n \geq 0$,均有

$$I_n > \frac{1}{6(n+1)} > 0$$

而按算法 II 计算,尽管 I_{14}^* 取值精度不高,其误差限 $\epsilon = \epsilon = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{75} - \frac{1}{90} \right) \approx 0.0011$,但递推计算得到的 I_0^* 却有 8 位有效数字。为什么会出现这样的现象?下面的分析说明,这是舍入误差在计算过程中传播所引起的后果。

设 I_0^* 有误差 e_0 ,假设计算过程中不产生新的舍入误差,则由式(1.2.9)得

$$e_n = I_n - I_n^* = -5I_{n-1} + 5I_{n-1}^* = -5e_{n-1} \\ (n = 1, 2, \dots)$$

从而有

$$e_n = (-5)^n e_0 \quad (1.2.12)$$

即原始数据 I_0^* 的误差 e_0 经式(1.2.9) 计算一次,误差就扩大到 5 倍,因而由算法 I 计算出的 I_n^* 的误差应是 e_0 的 5^n 倍。在上例中, I_0^* 有 8 位有效数字,故

$$e_0 = \frac{1}{2} \times 10^{-8}$$

由式(1.2.12)

$$e_9 = 5^9 e_0 = \frac{10^9 \times 10^{-8}}{2^{10}} = \frac{10}{1024} > \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

而 $I_9^* = 0.030\ 195\ 88$,这说明 I_9^* 已无一位有效数字。

完全类似地,按算法 II 从 I_k 计算 I_{k-1} ,应有

$$e_{k-1} = -\frac{1}{5} e_k$$

从而有

$$e_0 = \left(-\frac{1}{5}\right)^n e_n$$

因此,从 I_{14}^* 出发计算到 I_0^* 时,其误差 e_0 已由起初的误差 e_{14} 缩小到 $\frac{e_{14}}{5^{14}}$ 。

上述事实说明,对于同一数学问题,使用的算法不同,效果也可能大不相同。称计算过程中舍入误差不增长的算法具有数值稳定性,否则称为数值不稳定。在上例中,算法 II 具有数值稳定性,而算法 I 则是数值不稳定的。显然,只有选用数值稳定性好的算法,才能求得较准确的结果,也才是有意义的算法。

§ 1.3 数值计算中应注意的问题

由于误差传播的影响,计算过程中可能出现一些不合理的现象,要尽可能防止,一般应注意如下问题:

1. 避免两个相近的数相减

由式(1.1.3),两数之差 $u = x - y$ 的相对误差为

$$e_r(u) = e_r(x - y) = \frac{e(x) - e(y)}{x - y}$$

当 x 与 y 很接近时, u 的相对误差会很大,有效数字位数将可能发生严重丢失的现象。

例 1.3.1 求 $x = \sqrt{1 + 10^{-7}} - 1$ 的近似值。

解 如果运算过程中取 8 位有效数字,则得 $x \approx 0.5 \times 10^{-7}$ 只有一位有效数字。为了避免这种情形出现,常常需要改变计算公式。当然也可以通过在计算过程中多保留几位有效数字来改善计算效果,但不如前者有效。如若把 $x = \sqrt{1 + 10^{-7}} - 1$ 变换成以下公式计算

$$x = \frac{10^{-7}}{\sqrt{1 + 10^{-7}} + 1}$$

计算过程仍保留 8 位有效数字,则得 $x \approx 0.499\,999\,99 \times 10^{-7}$,结果仍有 8 位有效数字。又如:

例 1.3.2 利用四位数学用表求 $x = 1 - \cos 2^\circ$ 的近似值。

解 由查表得 $\cos 2^\circ \approx 0.9994$,于是

$$x = 1 - \cos 2^\circ \approx 1 - 0.9994 = 0.0006 = x^*$$

且

$$|x - x^*| = |\cos 2^\circ - 0.9994| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

故近似值 $x^* = 0.0006$ 有一位有效数字。

若改用公式

$$1 - \cos 2^\circ = 2 \sin^2 1^\circ$$

计算,查表得 $\sin 1^\circ \approx 0.0175$,于是

$$x = 2 \sin^2 1^\circ \approx 2 \times (0.0175)^2 = 6.125 \times 10^{-4} = x^*$$

此时

$$e_r = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| = \frac{2 \times |\sin^2 1^\circ - (0.0175)^2|}{6.125 \times 10^{-4}}$$

因为 $\sin 1^\circ \geq 0.01745$, 故有

$$e_r < \frac{2 \times \frac{1}{2} \times 10^{-4}}{0.01745} = \frac{1}{1745} < \frac{1}{2(6+1)} \times 10^{-2+1}$$

由定理 1.1.1, $x^* = 6.125 \times 10^{-4}$ 至少有 2 位有效数字。

一般地, 当 x 接近于零时, 应作变换

$$1 - \cos x = 2 \sin^2 \frac{x}{2} \quad \frac{1 - \cos x}{\sin x} = \frac{\sin x}{1 + \cos x}$$

当 x 充分大时, 应作变换

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

$$\frac{1}{x} - \frac{1}{x+1} = \frac{1}{x(x+1)}$$

等等, 来避免由于两个相近数相减而产生的有效数字位数严重丢失现象的发生。

2. 避免大数“吃”小数现象

计算机在进行运算时, 首先要把参加运算的数写成绝对值小于 1 而“阶码”相同的数, 这一过程称为数的“对阶”。如 $a = 10^9 + 1$ 必须写成

$$a = 0.1 \times 10^{10} + 0.000\,000\,000\,1 \times 10^{10}$$

如果计算机只能表示 8 位小数, 则计算结果便出现大数“吃”小数的现象。这种情形有时是允许的, 有时则不允许。

例 1.3.3 求二次方程

$$x^2 - (10^9 + 1)x + 10^9 = 0$$

的根。

解 利用因式分解容易求出, 此二次方程的两个根分别为 $x_1 = 10^9, x_2 = 1$, 但若用求根公式, 则得

$$x = \frac{10^9 + 1 \pm \sqrt{(10^9 + 1)^2 - 4 \times 10^9}}{2}$$

若采用 8 位小数的计算机运算, 由于对阶, 有

$$10^9 + 1 \approx 10^9$$

$$\sqrt{(10^9 + 1)^2 - 4 \times 10^9} \approx 10^9$$

这样求得 $x_1 = 10^9, x_2 = 0$, 其结果显然是错的。为避免这种情形出现, 我们采用改变计算公式的方法。如将式

$$x_2 = \frac{10^9 + 1 - \sqrt{(10^9 + 1)^2 - 4 \times 10^9}}{2}$$

改写成

$$x_2 = \frac{2 \times 10^9}{10^9 + 1 + \sqrt{(10^9 + 1)^2 - 4 \times 10^9}}$$

可得 $x_2 = 1$ 。