

高等学校十二五规划教材

The background of the cover is a complex, abstract geometric pattern in shades of blue and white, resembling a stylized architectural plan or a network diagram. The pattern consists of various lines, rectangles, and polygons that create a sense of depth and structure.

S 数值计算方法

HU ZHI **JISUAN FANGFA**

主编 王金柱

西北工业大学出版社

遠東經典·古代卷

山谷題跋校注

(宋)黃庭堅著 屠友祥校注

【内容简介】 本书较系统地介绍了科学与工程计算中常用的数值计算方法,并结合基本理论与实际应用,对这些方法作了简要分析.全书共8章,内容包括误差、函数插值、曲线拟合、数值积分与数值微分、方程求根、线性方程组的数值解法、矩阵特征值和特征向量的计算、常微分方程的数值解法等.每章都选有一定数量的例题和习题,供学生练习、提高.

本书可作为高等学校数学教育、数学与应用数学、信息与计算科学、应用物理及计算机科学等专业的教材,也可供从事科学与工程计算的科技工作者参考.

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/王金柱主编. —西安:西北工业大学出版社,2011.6
ISBN 978-7-5612-3098-5

I. ①数… II. ①王… III. ①数值计算—计算方法 IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011)第 120235 号

出版发行:西北工业大学出版社

通信地址:西安市友谊西路 127 号 邮编:710072

电 话:(029)88493844 88491757

网 址:www.nwpup.com

印 刷 者:陕西宝石兰印务有限责任公司

开 本:727 mm×960 mm 1/16

印 张:13.5

字 数:236 千字

版 次:2011 年 6 月第 1 版 2011 年 6 月第 1 次印刷

定 价:26.00 元

前 言

随着现代科技的飞速发展和广泛应用,科学计算已成为科学实践和数学应用的重要手段之一,其应用范围已渗透到大多数领域.作为科学与工程计算的数学工具,数值计算方法已成为各类高等学校数学教育、数学与应用数学、信息与计算科学和计算机科学等各专业学生的专业基础课以及工科硕士研究生的公共必修课程.

书中结合编者 20 多年的教学经验,根据学生的实际状况,比较系统全面地介绍了现代科学与工程计算中常用的数值计算方法,对这些数值计算方法的基本理论进行了分析,同时对这些数值算法的计算效果、收敛性、适用范围以及优劣性与特点进行了简要地分析.

全书共分 8 章,内容包括误差、函数插值、曲线拟合、数值积分与数值微分、方程求根、线性方程组的数值解法、矩阵特征值和特征向量的计算、常微分方程的数值解法等.

考虑到学生的知识结构和层次不同,在编写本书时,尽量从已经学过的数学知识和相关内容出发,对问题进行叙述和分析,简单明了、通俗易懂,并做到理论联系实际.本书着力于基本概念叙述清楚,理论分析严谨,在分析问题时注重启发性,例题的选择具有针对性,注重实际应用效果.本书取材合理,问题处理观点较新.各章附有一定数量的习题,供学生学习时进行练习,书后附有参考答案.

本书由王金柱任主编.具体编写分工如下:第一章由段胜军编写;第二、三、四、五、八章由王金柱编写;第六、七章由米红娟编写.全书由王金柱统稿.

由于水平有限,书中不足之处在所难免,敬请各位读者批评指正.

编 者

2011 年 3 月

目 录

第一章 误差	1
第一节 误差的来源	1
第二节 绝对误差、相对误差和有效数字	3
第三节 误差的传播	7
第四节 数值计算中需要注意的一些问题	8
习题一	11
第二章 函数插值	12
第一节 多项式插值问题	12
第二节 拉格朗日插值法	14
第三节 牛顿插值法	22
第四节 埃尔米特插值	30
第五节 分段低次插值	34
第六节 样条插值	40
习题二	47
第三章 曲线拟合	50
第一节 最小二乘法	50
第二节 多项式曲线拟合	51
第三节 加权最小二乘法	60
第四节 正交多项式拟合	62
习题三	66
第四章 数值积分与数值微分	69
第一节 牛顿-柯特斯求积公式	69
第二节 复化求积公式	77
第三节 龙贝格求积公式	85
第四节 高斯型求积公式	88
第五节 数值微分	94

习题四	98
第五章 方程求根	100
第一节 二分法	101
第二节 迭代法	102
第三节 牛顿迭代法	108
第四节 弦割法和抛物线法	113
习题五	117
第六章 线性方程组的数值解法	119
第一节 高斯消去法	119
第二节 主元素高斯消去法	126
第三节 直接三角分解法	130
第四节 解对称正定矩阵方程组的平方根法	134
第五节 解三对角方程组的追赶法	137
第六节 向量范数和矩阵范数	138
第七节 迭代法	141
第八节 超定线性方程组的最小二乘解	151
习题六	152
第七章 矩阵的特征值及特征向量的计算	157
第一节 幂法	157
第二节 反幂法	162
第三节 雅可比方法	164
习题七	171
第八章 常微分方程的数值解法	172
第一节 欧拉方法和改进欧拉方法	172
第二节 龙格-库塔方法	179
第三节 阿达姆斯方法	186
第四节 一阶常微分方程组和高阶方程	191
习题八	195
习题参考答案	198
参考文献	210

第一章 误差

数值计算方法是研究数学问题的数值解及其理论的一个数学分支,它涉及面很广,如微积分、代数和微分方程等都有数值解的问题.数值计算方法是将欲求解的数学模型或数学问题简化成一系列算术运算和逻辑运算,以便在计算机上求出问题的数值解.求得的结果往往是原先问题准确解的近似,这两者之间存在着的差异就是所谓的误差.当然,人们总是希望近似结果有令人满意的精确度.因此对这些结果的误差进行分析和估计是数值计算方法的基本内容.

第一节 误差的来源

在解决实际问题的过程中,会出现各种各样的误差,造成误差的原因往往是多方面的,主要归结为下述 4 种.

1. 模型误差

实际问题往往是十分复杂的,在建立数学模型时对被描述的实际问题进行简化,即抓住问题的主要因素,忽略一些次要因素.因此数学模型与实际问题之间总会有一些差别.这种数学模型与实际问题之间出现的误差称为模型误差.

例如,通常用 $s = \frac{1}{2}gt^2$ 来描述自由落体下落的规律.这就是一个数学模型,这个模型忽略了空气阻力的因素,因此若自由落体在时间 t 的实际下落距离为 s ,由该模型算出的下落距离为 s^* ,则 $s - s^*$ 为模型误差.

2. 观测误差

在数学模型中,通常总要包含一些观测或测量得来的参数,由于受到所用观测仪器、设备精度的限制,这些数据与其真实值是有误差的,这种误差称为观测误差或参数误差.

例如,在自由落体运动方程 $s = \frac{1}{2}gt^2$ 中,若取重力加速度 g 为 9.81 m/s^2 ,则 $g - 9.81$ 就为观测误差.

3. 截断误差

在解决实际问题时,数学模型往往很复杂,因而不易获得分析解,这就需要建立一套行之有效的近似方法或数值方法.模型的准确解与用数值方法求得的解之间会有误差,这种由数值方法本身引起的误差称为方法误差或截断误差.

例如,利用无穷级数展开计算 $\ln(1+x)$. 易知

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \cdots \quad (-1 < x \leq 1)$$

若取级数前 3 项部分和作为 $0 < x < 1$ 时的近似计算公式,则

$$\ln(1+x) \approx x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3}$$

从第 4 项后截断,自然会产生误差. 它的截断误差很容易估计,因为该级数是一交错级数,且满足交错级数的收敛条件,故截断误差可估计为

$$|R_4(x)| \leq \frac{x^4}{4}$$

4. 舍入误差

在数值计算过程中,遇到的数据可能位数很多,也可能是无穷小数,而计算时只能对有限位进行运算,这时就需要把数据按四舍五入表示成具有一定位数的近似数. 由此产生的误差称为舍入误差.

例如, $\sqrt{2} = 1.414\,213\cdots$, 在计算机上运算时只能用有限位小数,如取小数点后 4 位数字,则 $\sqrt{2} - 1.414\,2 = 0.000\,013\cdots$ 就是舍入误差.

概括起来,误差一般有模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差. 若记 x 为实际问题的准确解; x_1 为数学模型(假定参数是准确的)的准确解; x_2 为具有参数误差的数学模型的准确解; x_3 是在数学模型(含有参数误差)确定后,运用某种数值方法求解,在计算精确的条件下得到的数值解; x^* 为实际计算所得到的数值解. 则 $x - x_1$ 是模型误差, $x_1 - x_2$ 是由参数误差引起的误差, $x_2 - x_3$ 是所用数值方法的截断误差, $x_3 - x^*$ 是舍入误差. 最后,所得的数值解与实际问题的准确解之间的误差可表示为

$$x - x^* = (x - x_1) + (x_1 - x_2) + (x_2 - x_3) + (x_3 - x^*)$$

由以上误差来源的分析可以看到,误差是不可避免的,既然描述问题的方法都是近似的,那么要求解绝对准确也就没有意义了. 因此,在数值计算方法里讨论的都是近似解. 从误差来源的分析中可以看到,前两种误差是客观存在的,后两种是由计算方法所引起的. 本课程是研究数学问题的数值解法,因此只涉及后两种误差,即截断误差和舍入误差.

第二节 绝对误差、相对误差和有效数字

一、绝对误差与绝对误差限

定义 1.1 设某量的准确值为 x , x^* 表示其近似值, 则称 $e = x - x^*$ 为近似值 x^* 的绝对误差 (简称误差).

例如, $\sqrt{3}$ 的近似值 1.732 的绝对误差为

$$\sqrt{3} - 1.732 = 1.732\,05\cdots - 1.732 = 0.000\,05\cdots$$

注 绝对误差不是误差的绝对值.

由于准确值 x 往往是未知的, 因此无法得到绝对误差 e 的准确值. 但一般可以估计出 e 的取值范围, 例如, 用 1.732 作为 $\sqrt{3}$ 的近似值时, 其绝对误差的绝对值不会超过 0.000 06. 又如, 用毫米刻度的米尺测量物体的长度 l (准确值) 时, 测量值 l^* 的绝对误差介于 -0.5 mm 和 0.5 mm 之间, 即 $|l - l^*| < 0.5\text{ mm}$.

定义 1.2 设某量的准确值为 x , x^* 表示其近似值, 若有一正数 ϵ , 使

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

则称 ϵ 为 x^* 的绝对误差限 (简称误差限).

如果 ϵ 为 x 的近似值 x^* 的绝对误差限, 那么 $x^* - \epsilon \leq x \leq x^* + \epsilon$, 即 x 必位于区间 $[x^* - \epsilon, x^* + \epsilon]$ 上, 常用 $x = x^* \pm \epsilon$ 来表示近似值 x^* 的精确度, 或准确值 x 所在范围.

二、相对误差与相对误差限

在很多情形中, 绝对误差的大小还不能完全刻画一个近似值的精确度. 例如 $x_1 = 1.234 \pm 0.001$ 与 $x_2 = 0.002 \pm 0.001$, 虽然 x_1 的近似值 $x_1^* = 1.234$ 和 x_2 的近似值 $x_2^* = 0.002$ 的绝对误差限是一样的, 但显然 x_1^* 的精确度比 x_2^* 的精确度高. 这个例子表明, 一个近似值的精确程度除了与其绝对误差有关外, 还与准确值本身大小有关, 因此从另一角度考虑用绝对误差与准确值之比来描述误差的大小.

定义 1.3 设 x^* 为 x 的近似值, e 为它的绝对误差, 则称绝对误差与准确值比值 $e_r = \frac{e}{x} = \frac{x - x^*}{x}$ 为 x^* 的相对误差. 如果 $|e_r| = \left| \frac{x - x^*}{x} \right| \leq \epsilon_r$, 称 ϵ_r 为 x^* 的相对误差限.

在实际计算中由于准确值 x 未知, 因此往往取 $e_r = \frac{x - x^*}{x^*}$ 作为 x^* 的相对误差, 由 $\left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \epsilon_r$ 得 ϵ_r 为 x^* 的相对误差限.

例如, $x_1 = 1.234 \pm 0.001$ 与 $x_2 = 0.002 \pm 0.001$ 的近似值 $x_1^* = 1.234$ 和 $x_2^* = 0.002$ 的相对误差分别为 0.000 81 和 0.5, x_2^* 的相对误差是 x_1^* 的相对误差的 600 多倍. 从这个意义上说, x_1^* 的精度比 x_2^* 的精度高得多.

又如, 真空中光速 c 的最好近似值为 $c^* = 2.997\,925 \times 10^{10}$ cm/s, 其绝对误差限为 $\epsilon = 0.000\,001 \times 10^{10}$ cm/s, 则 c^* 的相对误差限为

$$\epsilon_r = \frac{0.000\,001}{2.997\,925} \approx 0.000\,000\,33\cdots \leq 3.5 \times 10^{-7}$$

三、有效数字

在表示一个近似值时, 为了同时还能反映其准确程度, 常常用到有效数字的概念. 众所周知, 当准确数为无穷小数、循环小数或有很多位数时, 经常按四舍五入的原则得到它的近似值. 例如 $\pi = 3.141\,592\,65\cdots$, 若按四舍五入取 4 位小数, 则得 π 的近似值为 3.141 6; 若取 5 位小数, 则其近似值为 3.141 59. 这种近似值取法的特点是它们的误差限不超过末位数的半个单位, 即

$$|\pi - 3.141\,6| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

$$|\pi - 3.141\,59| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-5}$$

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少. 为此, 我们将四舍五入进行抽象概括, 引入有效数字的概念.

定义 1.4 设 x 为准确值, x^* 为 x 的近似值. 如果 x^* 的误差限是某一位上的半个单位, 该位到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位, 就说 x^* 有 n 位有效数字, 或者说 x^* 准确到该位.

具体地说, 若将 x^* 表示为 $x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m$ (m 为整数), 其中 $a_1, \cdots, a_n$ 为 0, 1, $\cdots$, 9 中的任一数字, 且 $a_1 \neq 0$. 如果 x^* 的误差限满足

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

则 x^* 具有 n 位有效数字, 或称 x^* 准确到第 n 位. 其中每一位数字 $a_1, \cdots, a_n$ 都是 x^* 的有效数字.

π 的近似值 3.141 6 和 3.141 59 的误差限均不超过其末位数字的半个单位, 因此分别具有 5 位和 6 位有效数字; 而 3.141 5 虽然有 5 位数字, 但它是 π

的具有 4 位有效数字的近似数,原因是

$$\frac{1}{2} \times 10^{-4} \leq |\pi - 3.1415| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

注 (1) 有效数字的位数与小数点后有多少位数并无直接关系.

(2) 用四舍五入得到的近似值,其被保留的最后一位到最左边非零数之间的所有数字都是有效数字.

(3) 把任何数字乘以 $10^k (k=0, \pm 1, \pm 2, \dots)$, 相当于移动该数的小数点,不影响其有效数字的位数.

例如, 3.1416 和 0.031416×10^2 都是 π 的具有 5 位有效数字的近似值; 若近似值 $200\,000$ 的绝对误差限不超过 50, 即 $\frac{1}{2} \times 10^2$, 则可将该近似值表示为 $2\,000 \times 10^2$ 或 0.2000×10^6 .

例 1.1 写出 $\frac{1}{37}$ 的具有 1 位、2 位、3 位和 4 位有效数字的近似值.

解 $\frac{1}{37} = 0.027\,027\,027\cdots$ 按照有效数字的定义, $\frac{1}{37}$ 的具有 1 位、2 位、3 位和 4 位有效数字的近似值分别为 $0.03, 0.027, 0.0270$ 和 0.02703 .

注 0.027 与 0.0270 是 2 个不同的近似值,前者有 2 位有效数字,可知绝对误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-3}$, 后者有 3 位有效数字,可知其绝对误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-4}$. 两者精确程度不相同,因此,有效数字尾部的零不可随意省去,以免损失精度.

例 1.2 下列各数均为有效数字,指出有效数字的位数和误差限.

$2.0004, -0.00200, -9\,000, 9 \times 10^3, 2.3 \times 10^{-3}$

解 2.0004 有 5 位有效数字, $\epsilon_1 = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$;

-0.00200 有 3 位有效数字, $\epsilon_2 = \frac{1}{2} \times 10^{-5}$;

$-9\,000$ 有 4 位有效数字, $\epsilon_3 = \frac{1}{2} \times 10^0$;

9×10^3 有 1 位有效数字, $\epsilon_4 = \frac{1}{2} \times 10^0 \times 10^3 = \frac{1}{2} \times 10^3$;

2.3×10^{-3} 有 2 位有效数字, $\epsilon_5 = \frac{1}{2} \times 10^{-1} \times 10^{-3} = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$.

四、有效数字与误差的关系

由有效数字的定义可以看出,有效数字的位数越多,绝对误差限越小. 同

样,相对误差限和有效数字也有类似的关系.

定理 1.1 设 x 的近似值为 $x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m (a_1 \neq 0)$, 如果 x^* 具有 n 位有效数字, 则 x^* 的相对误差满足

$$|e_r| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1} \quad (1.2.1)$$

证 对近似值 $x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m$, 显然有

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

故其相对误差满足

$$|e_r| = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{a_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$$

由上式可知, 有效数字的位数反映了近似值的相对精度. 有效数字的位数越多, 相对误差限越小.

定理 1.2 设 x 的近似值为 $x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m (a_1 \neq 0)$, 如果 x^* 的相对误差满足

$$|e_r| = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-n+1} \quad (1.2.2)$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证 由 $|x^*| < (a_1 + 1) \times 10^{m-1}$ 及式(1.2.2)可得

$$\begin{aligned} |e| = |x^*| |e_r| &\leq (a_1 + 1) \times 10^{m-1} \times \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-n+1} = \\ &= \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \end{aligned}$$

故 x 至少具有 n 位有效数字.

例 1.3 用 $x^* = 2.72$ 来表示 e 具有 3 位有效数字的近似值, 它的相对误差是多少?

解 $x^* = 2.72$ 具有 3 位有效数字, $a_1 = 2$, 由式(1.2.1)有

$$|e_r| \leq \frac{1}{2 \times 2} \times 10^{-2} = 0.25 \times 10^{-2}$$

例 1.4 为了使积分 $I = \int_0^1 e^{-x^2} dx$ 的近似值 I^* 的相对误差不超过 0.1%, 问至少取几位有效数字?

解 根据式(1.2.1), 只须求出满足

$$\frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1} \leq 0.1\%$$

的 n . 可以知道 $I = 0.7467\cdots$ 故所求近似值的第一位有效数字 $a_1 = 7$, 解不

等式

$$\frac{1}{14} \times 10^{-n+1} \leq 0.1\%$$

可得 $n \geq 3$. 故 I^* 只要取 3 位有效数字, 即 $I^* = 0.747$, 就能保证其相对误差不大于 0.1% .

第三节 误差的传播

数据运算中由于所给数据有误差必定会引起函数值的误差, 故需要考查初始误差对计算结果的影响.

以二元函数为例. 设给定函数 $y = f(x_1, x_2)$, x_1^*, x_2^* 为 x_1, x_2 的近似值, 于是可求 y 的近似值 $y^* = f(x_1^*, x_2^*)$, 下面估计 y^* 的绝对误差及相对误差.

考查 $f(x_1, x_2)$ 在点 (x_1^*, x_2^*) 的泰勒展开式

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) = & f(x_1^*, x_2^*) + \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_1} (x_1 - x_1^*) + \\ & \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_2} (x_2 - x_2^*) + \frac{1}{2!} \left[\frac{\partial^2 f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_1^2} (x_1 - x_1^*)^2 + \right. \\ & \left. \frac{\partial^2 f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_1 \partial x_2} (x_1 - x_1^*) (x_2 - x_2^*) + \frac{\partial^2 f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_2^2} (x_2 - x_2^*)^2 \right] \end{aligned}$$

式中, $e(x_1^*) = x_1 - x_1^*$ 和 $e(x_2^*) = x_2 - x_2^*$ 一般都是小量值, 若忽略高阶无穷小量, 即高阶的 $x_1 - x_1^*$ 和 $x_2 - x_2^*$, 则由上式可得

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) \approx & f(x_1^*, x_2^*) + \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_1} (x_1 - x_1^*) + \\ & \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_2} (x_2 - x_2^*) \end{aligned}$$

于是 y^* 的绝对误差为

$$e(y) = y - y^* \approx \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_1} e(x_1^*) + \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_2} e(x_2^*) \quad (1.3.1)$$

上式两端除以 y^* , 得

$$\frac{e(y)}{y^*} \approx \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_1} \frac{e(x_1^*)}{y^*} + \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_2} \frac{e(x_2^*)}{y^*}$$

故 y^* 的相对误差为

$$e_r(y) \approx \frac{x_1^*}{y^*} \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_1} e_r(x_1^*) + \frac{x_2^*}{y^*} \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_2} e_r(x_2^*) \quad (1.3.2)$$

式中, $e_r(x_1^*)$ 和 $e_r(x_2^*)$ 前面的系数 $\frac{x_1^*}{y^*} \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_1}$ 和 $\frac{x_2^*}{y^*} \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*)}{\partial x_2}$ 是 x_1^* 和 x_2^* 对 y^* 的相对误差增长因子, 反映了相对误差 $e_r(x_1^*)$ 和 $e_r(x_2^*)$ 经过传播后增大或缩小的倍数.

利用式(1.3.1)和式(1.3.2), 可以得到两数和、差、积、商的误差估计:

$$e(x_1^* \pm x_2^*) \approx e(x_1^*) \pm e(x_2^*) \quad (1.3.3)$$

$$e(x_1^* x_2^*) \approx x_2^* e(x_1^*) + x_1^* e(x_2^*) \quad (1.3.4)$$

$$e\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) \approx \frac{1}{x_2^*} e(x_1^*) - \frac{x_1^*}{x_2^{*2}} e(x_2^*) \quad (x_2^* \neq 0) \quad (1.3.5)$$

$$e_r(x_1^* \pm x_2^*) \approx \frac{x_1^*}{x_1^* \pm x_2^*} e_r(x_1^*) \pm \frac{x_2^*}{x_1^* \pm x_2^*} e_r(x_2^*) \quad (1.3.6)$$

$$e_r(x_1^* x_2^*) \approx e_r(x_1^*) + e_r(x_2^*) \quad (1.3.7)$$

$$e_r\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) \approx e_r(x_1^*) - e_r(x_2^*) \quad (1.3.8)$$

例 1.5 已测得某物体行程 s 的近似值 $s^* = 800$ m, 所需时间 t 的近似值为 $t^* = 35$ s, 若已知 $|t - t^*| \leq 0.05$, $|s - s^*| \leq 0.5$, 试求平均速度 v 的绝对误差限和相对误差限.

解 因为 $v = \frac{s}{t}$, 所以绝对误差 $e(v^*) \approx \frac{1}{t^*} e(s) - \frac{s^*}{t^{*2}} e(t)$. 而

$$|e(v^*)| \leq \left| \frac{1}{t^*} \right| |e(s)| + \left| \frac{s^*}{t^{*2}} \right| |e(t)|$$

因此在近似值为 $s^* = 800$ m, $t^* = 35$ s 时, 有

$$|e(v^*)| \leq \frac{1}{35} \times 0.5 + \frac{800}{35^2} \times 0.05 \approx 0.046\,939 < 0.05$$

即绝对误差限为 $\epsilon(v^*) < 0.05$, 相对误差限为

$$\epsilon_r(v^*) = \frac{\epsilon(v^*)}{v^*} = 0.05 \times \frac{35}{800} < 0.002\,2$$

第四节 数值计算中需要注意的一些问题

在数值计算中, 误差的传播和积累直接影响到计算结果, 为尽量避免误差, 防止有效数字的损失, 本节给出若干原则.

(1) 避免两个相近的数相减. 当相近两数相减时将会严重损失有效数字, 因而导致很大的相对误差. 由式(1.3.6)可知, 两数 x_1^*, x_2^* 之差的相对误差满足

$$e_r(x_1^* - x_2^*) \approx \frac{x_1^* e_r(x_1^*) - x_2^* e_r(x_2^*)}{x_1^* - x_2^*}$$

因而 $|x_1^* - x_2^*|$ 很小, 相对误差就可能很大. 遇到这种情形要设法变换计算公式以防止这种情况的出现. 例如, 当 x 接近于零计算 $1 - \cos x$ 和 $e^x - 1$ 时, 应将它们先变换成

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

$$e^x - 1 = x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \dots$$

再进行计算. 当 x 充分大计算 $\sqrt{1+x} - \sqrt{x}$ 时, 应先变换 $\sqrt{1+x} - \sqrt{x}$ 为 $\frac{1}{\sqrt{1+x} + \sqrt{x}}$, 再做进一步的计算.

(2) 尽量避免用绝对值很小的数作除数或用绝对值很大的数作乘数. 由式(1.3.5)可知, 两数 x_1^*, x_2^* 商的绝对误差为

$$e\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) \approx \frac{x_2^* e(x_1^*) - x_1^* e(x_2^*)}{(x_2^*)^2}$$

当除数 x_2^* 接近于零时, 会导致 $\left|e\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right)\right|$ 很大; 同理, 由式(1.3.4)可知, 当乘数 x_1^* 或 x_2^* 的绝对值很大时, 两数 x_1^*, x_2^* 乘积的绝对误差 $|e(x_1^* \cdot x_2^*)|$ 也会很大. 因此, 在数值运算中, 应尽量避免用绝对值很大的数来作乘数或用接近于零的数作除数, 否则会增大原有的误差.

(3) 两个相差很大的数运算时, 要防止大数“吃掉”小数引起的失真. 在数值运算中, 参加运算的数有时数量级相差很大, 而计算机位数有限, 又要作对阶处理, 可能会出现大数“吃掉”小数的现象, 从而影响了计算结果的准确性.

例如, 在字长为 10 位的计算机上计算 $10^{10} + 1 - 10^{10}$. 按照规格化浮点数的表示方法, 10^{10} 和 1 可分别表示为

$$10^{10} = 0. \underbrace{10 \dots 0}_{10 \text{ 位}} \times 10^{11}$$

$$1 = 0. \underbrace{10 \dots 0}_{10 \text{ 位}} \times 10^1$$

在计算 $10^{10} + 1 - 10^{10}$ 时, 首先要对阶, 即把较低的阶提高到较高的阶的水平

$$10^{10} = 0. \underbrace{10 \dots 0}_{10 \text{ 位}} \times 10^{11}$$

$$1 = 0. \underbrace{0 \dots 01}_{10 \text{ 位}} \times 10^{11}$$

其中, 上式带下画线的“1”就处于第 11 位, 对有 10 位字长的计算机已无法存

储,因而经对阶舍入(用 $\triangle$ 标记),实际存储的是

$$\begin{aligned} 10^{10} &\triangle 0.\underbrace{10\cdots 0}_{10\text{位}} \times 10^{11} \\ 1 &\triangle 0.\underbrace{0\cdots 0}_{10\text{位}} \times 10^{11} \end{aligned}$$

于是得到计算结果为

$$10^{10} + 1 - 10^{10} \triangle 10^{10} - 10^{10} = 0$$

结果失真.

为了避免这种情况出现,可以调整计算次序以使数量级相近的数进行运算,或者将某些算式改写成另一等价形式再计算.例如,将 $10^{10} + 1 - 10^{10}$ 的顺序调整为 $10^{10} - 10^{10} + 1$ 来计算,仍在字长为 10 位的计算机上,经对阶等处理再运算的结果为

$$10^{10} + 1 - 10^{10} = 10^{10} - 10^{10} + 1 = 0 + 1 = 1$$

例 1.6 计算 $\int_N^{N+1} \ln x dx$, 其中 N 为一很大的正整数.

$$\text{解} \quad \int_N^{N+1} \ln x dx = [x \ln x]_N^{N+1} - \int_N^{N+1} x \cdot \frac{1}{x} dx =$$

$$(N+1)\ln(N+1) - N\ln N - 1$$

由于 N 很大, N 与 $N+1$ 在计算机里是同一数, 计算便得

$$\int_N^{N+1} \ln x dx = 0 - 1 = -1 < 0$$

但在区间 $[N, N+1]$ 上 $\ln x \geq 0$, 故 $\int_N^{N+1} \ln x dx > 0$, 可见结果严重失真. 因此应改变计算方法, 按下面算式进行计算可以得到相当精确的结果.

$$\begin{aligned} \int_N^{N+1} \ln x dx &= (N+1)\ln(N+1) - N\ln N - 1 = \\ &N[\ln(N+1) - \ln N] + \ln(N+1) - 1 = \\ &N\ln\left(1 + \frac{1}{N}\right) + \ln(N+1) - 1 = \\ &N\left(\frac{1}{N} - \frac{1}{2N^2} + \frac{1}{3N^3} - \frac{1}{4N^4} + \cdots\right) + \ln(N+1) - 1 = \\ &\ln(N+1) - \frac{1}{2N} + \frac{1}{3N^2} - \frac{1}{4N^3} + \cdots \end{aligned}$$

(4) 注意简化计算步骤, 减少运算次数. 一般来说, 选用运算次数少的算式, 尤其是乘方幂次低, 乘法和加法的运算次数少, 可以减少舍入误差的大量累积, 同时也可节约计算机的计算时间.

例 1.7 计算多项式 $P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$ 的值.

解 方法一:直接计算每一项再求和.显然,计算 $a_k x^k$ 需要作 k 次乘法,因此,计算 $P_n(x)$ 值就需要作 $n + (n-1) + (n-2) + \cdots + 1 = \frac{n(n+1)}{2}$ 次乘法运算及 n 次加法.

方法二:采用秦九韶算法.作变换:

$$P_n(x) = (\cdots((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \cdots + a_1)x + a_0$$

有递推公式:

$$\begin{cases} S_n = a_n \\ S_{k-1} = xS_n + a_{k-1} \quad (k = n, n-1, \cdots, 2, 1) \end{cases}$$

则 $S_0 = P_n(x)$. 采用这种算法计算 $P_n(x)$ 值,只须作 n 次乘法和 n 次加法运算.

习 题 一

1. 求 $x_1 = \sqrt{101}$ 和 $x_2 = \frac{1}{101}$ 具有 4 位有效数字的近似值,并指出其绝对误差限和相对误差限.

2. 下列各数是对准确值进行四舍五入得到的近似值,指出他们的绝对误差限、相对误差限以及有效数字的位数.

(1) 0.031 5; (2) 0.301 5; (3) 31.50; (4) 5 000.

3. 已知所给数 $x_1 = 0.004\ 38$, $x_2 = 0.043\ 80 \times 10^{-1}$, $x_3 = 0.000\ 438\ 0 \times 10^1$ 均为有效数字.问这些数是否一样?若不一样有何区别?

4. 一近似数有 2 位有效数字,试求其相对误差限.

5. 为了使 $\sqrt{11}$ 的近似值的相对误差不超过 0.1%,问至少应取几位有效数字?

6. 下列各式如何计算才比较准确?

(1) $\frac{1}{x} - \frac{\cos x}{x}$, x 接近于零;

(2) $\frac{1 - \cos x}{\sin x}$, x 接近于零;

(3) $\sqrt{x + \frac{1}{x}} - \sqrt{x - \frac{1}{x}}$, $|x| \gg 1$;

7. 如何计算 x^{127} ,能使计算量最小?