

高等学校教材

JISUAN FANGFA

计算方法

张保才 王亚红 主编

-43

中国铁道出版社

高等学校教材

计 算 方 法

张保才 王亚红 主编

中 国 铁 道 出 版 社

2003年·北京

(京)新登字 063 号

内 容 简 介

本系列教材为大学工科各专业公共课教材,共 5 册:高等数学(上、下册)、线性代数与几何、概率论与数理统计、计算方法。编者根据工科院校数学教改精神、多年教改课题研究和试验而编写,书中融入了许多新的教学思想和方法。本书为计算方法,内容包括计算方法的一般概念、解线性方程组的直接法、插值与拟合、迭代法、数值微积分、常微分方程数值解。

本书也适合作为大专、函授、夜大、自考计算方法课程教材。

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/张保才,王亚红主编. —北京:中国铁道出版社,2003.1
ISBN 7-113-05015-8

I. 计… II. ①张…②王… III. 计算方法—高等学校—教材
IV. 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 103691 号

书 名: 高等学校教材
计 算 方 法
作 者: 张保才 王亚红
出 版 发 行: 中国铁道出版社(100054,北京市宣武区右安门西街 8 号)
责 任 编 辑: 李小军
编辑部电话: 市电 (010)63583214 路电 (021)73133
封 面 设 计: 冯龙彬
印 刷: 中国铁道出版社印刷厂
开 本: 787mm×960mm 1/16 印张: 10.5 字数: 193 千
版 本: 2003 年 1 月第 1 版 2003 年 1 月第 1 次印刷
印 数: 0001—4500 册
书 号: ISBN 7-113-05015-8/O·105
定 价: 13.00 元

版权所有 侵权必究

凡购买铁道版的图书,如有缺页、倒页、脱页者,请与本社发行部调换。

发行部电话:市电 (010)63545969 路电 (021)73169

前 言

本系列教材是铁道部部级课题、河北省“九五”教育学科规划重点课题“面向 21 世纪高等工科教育数学系列课程教学内容与课程体系改革的研究与实践”的研究成果,通过几年的教学实践,广泛征求意见,反复修改而成的高等数学系列教材.

本书为计算方法分册.内容的深度和广度与现行的“计算方法课程教学基本要求”大体一致.编写中力求做到:渗透一些现代数学思想,淡化理论分析和论证,着重从最简单的例子来导出一些常用的算法,目的是提高学生对计算方法的初步认识和了解,在用计算机解决实际问题时可适当选择和使用算法,并能将一些基本算法用在后续课程的学习中.

本书重点介绍了计算方法中常用的一些算法.如线性方程组的直接解法与迭代法、矩阵分解、Lagrange 插值、Hermite 插值及样条插值、多项式拟合、非线性方程求根和矩阵特征值的幂法与 Jacobi 方法、数值微分及数值积分、常微分方程数值解.由于计算方法所涉及的内容较多,所用数学知识较广,本书着重讲述各种方法的构造和使用,对各种算法的稳定性、可靠性以及优缺点作了适当的分析,力求简单易学.

参加本书编写的有张保才(第一,二,三,四章),王亚红(第五,六章).

本书的书稿虽经多次试用和多次修改,但由于编者水平有限,书中难免有缺点、错误,恳请读者批评指正.

编 者

2002 年 12 月

目 录

第一章 计算方法的一般概念	1
第一节 引言	1
第二节 误差	6
第三节 减少运算误差的几个原则	12
习题一	14
第二章 解线性方程组的直接法	15
第一节 高斯(Gauss)消去法	15
第二节 矩阵的三角分解及其在解方程组中的应用	24
第三节 对称矩阵 LDL^T 的分解	28
第四节 解三对角线性方程组的“追赶”法	36
第五节 矩阵求逆	38
习题二	45
第三章 插值与拟合	46
第一节 基本概念	46
第二节 Lagrange 插值	47
第三节 差分、差商和 Newton 插值	54
第四节 Hermite 插值多项式	62
第五节 样条函数插值	67
第六节 最小二乘法	74
习题三	83
第四章 迭代法	85
第一节 非线性方程求根	85
第二节 线性方程组的迭代解	96
第三节 非线性方程组的迭代解	107
第四节 矩阵特征值的乘幂法与反乘幂法	110
第五节 矩阵特征值的 Jacobi 方法	117
习题四	123
第五章 数值微积分	125
第一节 数值微分	125

第二节 数值积分等距节点求积公式·····	130
第三节 龙贝格求积公式·····	134
第四节 Gauss 型求积公式 ·····	138
习题五·····	143
第六章 常微分方程数值解·····	145
第一节 欧拉法及其改进·····	145
第二节 龙格-库塔方法 ·····	149
第三节 线性多步法·····	153
第四节 微分方程组和高阶方程的解法·····	158
习题六·····	160
习题答案·····	161

第一章 计算方法的一般概念

第一节 引言

解决一个具体的科学或工程问题大致可分为三个环节. 首先, 科学研究人员或工程研究人员对具体的问题, 利用物理、力学、工程等原理或技术, 建立起物理模型; 然后, 进一步化为数学模型; 再经过基础研究工作者的艰苦努力, 证明数学模型解的存在唯一性; 但要找出解的表达式却是很困难的, 因此, 最后还需要数值分析专家对数学模型建立数值求解方法, 直至在计算机上得以实现. 数值分析方法正是研究和讨论各类数学问题进行数值求解的学科.

随着科学技术的发展, 特别是计算机的飞速发展和一些边缘学科的兴起, 已经很难对以上所述的三个环节给出明确的划分, 在许多领域, 一个优秀的科技工作者, 他也必须是优秀的数值分析专家, 即使是普通的工程技术人员, 他也必须掌握一些基本的数值分析方法以及在计算机上实施方法的技能.

数值分析方法, 或者说计算方法, 其内容大致可分为三个部分:

1. 数值逼近;
2. 数值代数;
3. 微分方程的数值求解.

例 1.1 建立 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx$ 的递推公式, 并求当 $n = 0, 1, 2, \dots, 20$ 时 I_n 的值.

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

$$I_0 = \int_0^1 \frac{dx}{x+5} = \ln 6 - \ln 5.$$

于是得递推公式

$$\begin{cases} I_0 = \ln 6 - \ln 5 \\ I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1} \end{cases} \quad (1.1)$$

按公式(1.1) 计算的结果见表 1.1 中“ I_n 的值(A)” (箭头表示递推方向).

同时,注意到 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx$ 具有下列特性:

(1) $I_n > 0$;

(2) 当 $x \in (0,1)$ 时, $\frac{x^n}{x+5} < \frac{x^{n-1}}{x+5}$,

所以 $I_n < I_{n-1}$;

(3) 由于 $I_n > 0$, 且

$$I_n + 5I_{n-1} = \frac{1}{n} \rightarrow 0 (n \rightarrow \infty);$$

所以 $\lim_{n \rightarrow \infty} I_n = 0$;

(4) 因为 $I_{n-1} > I_n > 0$,

所以 $5I_{n-1} < I_n + 5I_{n-1} < 6I_{n-1}$.

用 $I_n + 5I_{n-1} = 1/n$ 代入上式可得下面的不等式

$$0 < \frac{1}{6n} < I_{n-1} < \frac{1}{5n}.$$

表 1.1

n	I_n 的值(A)	I_n 的值(B)	n	I_n 的值(A)	I_n 的值(B)
0	↓ 0.1823215568	↑ 0.1823215568	11	↓ 0.0137748437	↑ 0.0140713383
1	↓ 0.0883922160	↑ 0.0883922160	12	↓ 0.0144591150	↑ 0.0129766419
2	↓ 0.0580389200	↑ 0.0580389199	13	↓ 0.0046275018	↑ 0.0120398676
3	↓ 0.0431387333	↑ 0.0431387341	14	↓ 0.0482910626	↑ 0.0112292335
4	↓ 0.0343063334	↑ 0.0343063296	15	↓ -0.174788646	↑ 0.0105204991
5	↓ 0.0284683333	↑ 0.0284683522	16	↓ 0.9364432305	↑ 0.0098975045
6	↓ 0.0243250004	↑ 0.0243249055	17	↓ -4.623392623	↑ 0.0093360067
7	↓ 0.0212321408	↑ 0.0212326152	18	↓ 23.17252867	↑ 0.00887552221
8	↓ 0.0188392962	↑ 0.0188369242	19	↓ -115.8099618	↑ 0.0082539683
9	↓ 0.0169146301	↑ 0.0169264899	20	↓ 579.099809	↑ 0.0087301587
10	↓ 0.0154268495	↑ 0.0154675505			

由(3)可见, I_n 的值随 n 的不断增加而趋近于零. 再由表 1.1 可见, 用(1.1)式计算的 $I_{15} < 0$, 从 $n = 15$ 开始, I_n 的值正负相间, 其绝对值不是趋于零, 而是不断递增. 理论分析与计算结果严重不符.

根据(4)建立新的计算公式可得

$$\frac{1}{6 \times 21} < I_{20} < \frac{1}{5 \times 21},$$

所以可取 $I_{20} \approx \left(\frac{1}{6 \times 21} + \frac{1}{5 \times 21} \right) \times \frac{1}{2} = 0.0087301587$.

于是得新的递推公式

$$\begin{cases} I_{20} = 0.0087301587 \\ I_{n-1} = -\frac{1}{5}I_n + \frac{1}{5n} \end{cases} \quad (1.2)$$

由 I_{20} 为起始值,按(1.2)中第二式逐次递推的计算结果见表 1.1 中“ I_n 的值(B)”.

比较(1.1)、(1.2)计算结果, I_0 是一样的. 在(1.1)中,当 n 越大时, I_n 的值越不可靠;而在(1.2)中,尽管粗略地取 $I_{20} = 0.0087301587$,但按逆递推方向算下去,基本符合 I_n 的特性,最后求得的 I_0 又很准确. 这是为什么呢?我们作如下分析:

在(1.1)中,设准确的理论递推公式为

$$I_1 = -5I_0 + 1.$$

实际的运算递推公式为

$$\hat{I}_1 = -5\hat{I}_0 + 1,$$

式中 I_0 是理论上的准确值,即 $I_0 = \ln 6 - \ln 5$,由于电子计算机只能取有限位小数进行计算,故取用 $\hat{I}_0 = 0.1823215568$,它是带有舍入误差的 I_0 的近似值. 记 $I_0 - \hat{I}_0 = \epsilon$, 则

$$I_1 - \hat{I}_1 = 5(I_0 - \hat{I}_0) = -5\epsilon;$$

$$\begin{aligned} \text{同理} \quad I_n - \hat{I}_n &= -5(I_{n-1} - \hat{I}_{n-1}) = (-5)^2(I_{n-2} - \hat{I}_{n-2}) \\ &= \cdots = (-5)^n(I_0 - \hat{I}_0) = (-5)^n\epsilon. \end{aligned}$$

尽管 ϵ 取得非常小,但误差的传播逐步扩大, I_n 与 $\hat{I}_n$ 的误差为 $(-5)^n\epsilon$, 当 n 较大时,其值就可能很大,因此计算的数值很不可靠.

在(1.2)中,

$$I_0 - \hat{I}_0 = \frac{1}{-5}(I_1 - \hat{I}_1) = \frac{1}{(-5)^2}(I_2 - \hat{I}_2) = \cdots = \frac{1}{(-5)^n}(I_n - \hat{I}_n).$$

尽管 $\hat{I}_{20}$ 粗略地取 $\frac{1}{2} \left(\frac{1}{6 \times 21} + \frac{1}{5 \times 21} \right)$,但因误差的传播逐步缩小,故计算的数值可靠.

例 1.2 求方程 $\lambda^2 + (\alpha + \beta)\lambda + 10^9 = 0$ 的根,其中 $\alpha = -10^9, \beta = -1$.

解 我们知道,方程 $a\lambda^2 + b\lambda + c = 0$ 的根

$$\lambda_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

其中

$$\begin{aligned} -b &= -(\alpha + \beta) = 10^9 + 1 \\ &= 0.1 \times 10^{10} + 0.000\,000\,000\,1 \times 10^{10}, \end{aligned}$$

式中 0.1×10^{10} 为 10^9 的浮点表示; $0.000\,000\,000\,1 \times 10^{10}$ 为按 10^{10} 对阶后的 1 的浮点表示.

若用一般的电子计算机计算,如果取数只能取到小数点后第八位,这时 β 在计算中不起作用,于是有

$$-b \approx -\alpha = 10^9.$$

类似地有

$$b^2 - 4ac \approx b^2,$$

$$\sqrt{b^2 - 4ac} \approx |b| = 10^9,$$

结果得

$$\lambda_1 = \frac{10^9 + 10^9}{2} = 10^9;$$

$$\lambda_2 = \frac{10^9 - 10^9}{2} = 0.$$

而由初等数学可知

$$\begin{aligned} \lambda^2 + (\alpha + \beta)\lambda + 10^9 &= \lambda^2 - (10^9 + 1)\lambda + 10^9 \\ &= (\lambda - 1)(\lambda - 10^9). \end{aligned}$$

因此 $\lambda_1 = 10^9, \lambda_2 = 1$.

为什么第一种算法会出错呢?这是因为忽略了一次项系数 $(\alpha + \beta)$ 中的 β 和整个常数项 c , 实际是求解了方程

$$\lambda^2 + a\lambda = 0.$$

结果当然是错的. 电子计算机在运算过程中, 由于加减法运算时要对阶, 在小数的阶数向大数的阶数对齐的过程中, 大数“吃掉”了小数, a “吃掉”了 β , 使 $b = a$, b^2 “吃掉”了 $4ac$, 使常数项 c 的作用被忽略, 导致计算 λ_2 时失败. 在计算中大数“吃掉”了小数, 在某种情况下是允许的, 如本例中计算 λ_1 ; 在某种情况下又不允许, 如本例中计算 λ_2 .

为了避免以上情况, 并考虑到分子部分有可能出现三个相近数相减而导致有效数位严重损失的不利情况, 在电子计算机上求

$$a\lambda^2 + b\lambda + c = 0$$

的根, 是按下列步骤进行的(退化情况 $a = 0$ 或 $b = 0$ 另考虑):

$$\begin{cases} \lambda_1 = \frac{-b - \operatorname{sgn}(b) \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \\ \lambda_2 = \frac{c}{a\lambda_1} \end{cases}$$

式中 $\operatorname{sgn}(b)$ 为符号函数, 其定义为

$$\operatorname{sgn}(b) = \begin{cases} 1 & \text{当 } b > 0 \\ 0 & \text{当 } b = 0. \\ -1 & \text{当 } b < 0 \end{cases}$$

例 1.3 计算 $0.0625x^4 + 0.425x^3 + 1.215x^2 + 1.912x + 2.1296$ 当 $x = x_0$ 值.

解 直接计算

$$0.0625x_0^4 + 0.425x_0^3 + 1.215x_0^2 + 1.912x_0 + 2.1296$$

需做十次乘法和四次加法, 但如果改用下式进行计算:

$$\{[(0.0625x_0 + 0.425)x_0 + 1.215]x_0 + 1.912\}x_0 + 2.1296$$

则只需做四次乘法和四次加法.

一般情况下计算多项式值最好采用第二种方法, 这种方法称为秦九韶算法, 是我国 13 世纪的数学家秦九韶所首创. 对多项式

$$p_n(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + a_2x^{n-2} + \cdots + a_{n-1}x + a_n$$

如果要算 $x = \alpha$ 的值 $p_n(\alpha)$, 记第 k 个括号内的值为 b_k , 又记 $b_0 = a_0, b_n = p_n(\alpha)$, 则秦九韶算法计算公式为

$$\begin{cases} b_0 = a_0 \\ b_k = a_k + \alpha b_{k-1}, \quad k = 1, 2, \cdots, n. \\ p_n(\alpha) = b_n \end{cases}$$

例 1.4 计算 $\sqrt{e}$ 的近似值, 精确到 10^{-5} .

解 因
$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = \sum_{k=0}^n \frac{x^k}{k!} + R_n(x),$$

其中 $R_n(x) = \frac{e^\xi}{(n+1)!} x^{n+1}$, 对于 $\sqrt{e}$, $|R_n(x)| \leq \frac{1}{(n+1)!}$.

$$\text{令 } a_0 = 1, \quad a_1 = \frac{1}{2} = \frac{a_1}{2}, \quad a_2 = \frac{1}{2!2^2} = \frac{a_1}{4},$$

$$a_3 = \frac{1}{3!2^3} = \frac{a_2}{6}, \quad a_4 = \frac{1}{4!2^4} = \frac{a_3}{8}, \quad a_5 = \frac{1}{5!2^5} = \frac{a_4}{10},$$

$$a_6 = \frac{1}{6!2^6} = \frac{a_5}{12}, \quad a_7 = \frac{1}{7!2^7} = \frac{a_6}{14}, \quad \cdots$$

而
$$e^{\frac{1}{2}} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2!2^2} + \frac{1}{3!2^3} + \frac{1}{4!2^4} + \cdots + \frac{1}{n!2^n} + R_n(x).$$

由上面推导不难计算得

$$a_0 = 1;$$

$$a_1 = \frac{a_0}{2} = 0.5000000; \quad a_2 = \frac{a_1}{4} = 0.1250000;$$

$$a_3 = \frac{a_2}{6} = 0.020\,833\,3; \quad a_4 = \frac{a_3}{8} = 0.002\,604\,2;$$

$$a_5 = \frac{a_4}{10} = 0.000\,260\,4; \quad a_6 = \frac{a_5}{12} = 0.000\,021\,7;$$

$$|R_7(x)| \leq a_7 = \frac{a_6}{14} = 0.000\,001\,6.$$

故得 $e^{\frac{1}{2}} \approx 1.648\,721\,2 \approx 1.648\,72$.

上述这种算法对用级数进行近似计算都是可以进行的.

前述四例初步描述了计算方法需要解决的问题:

1. 如何构造计算机能用的算法(例 1.2, 例 1.4).
2. 怎样计算才能既快又省(例 1.3).
3. 怎样计算才可靠(例 1.1).

第二节 误 差

2.1 误差的来源

一个物理量的真实值和我们用计算方法算出的值往往存在差异,它们之间的差异称为误差,这些误差主要是:

(1) 模型误差:从实际问题归结为数学问题时,通常要略去某些次要的因素,或再加以简化,由此而产生的误差称之为模型误差.

(2) 观测误差:在归结所得的数学问题中常含有一些数据需要观测.当用各种工具观察、测量这些数据时,人的观测与测量工具的使用都会给观测数据带来误差,这就是观测误差.

(3) 方法误差:当对数学问题求精确解有困难时,常用数值方法求其近似解,由此引起的误差称之为方法误差或截断误差.

(4) 舍入误差:由于计算机只能将数表示成有限位进行运算,所以对超过位数的数字要按一定的规则作舍入,由此产生的误差称为舍入误差.

例 1.6 研究一个单摆的摆角 θ 的变化规律.为了归结为数学问题,先略去空气阻力、支点的摩擦力、摆线的质量等,仅考虑摆锤所受的重力作用,由 Newton 第二定律得出:

$$ml \frac{d^2 \theta}{dt^2} = -mg \sin \theta.$$

其中 m 是摆锤的质量, l 是摆线的长度.

上式是比较复杂的非线性微分方程,在 $|\theta|$ 较小时, $\sin \theta \approx \theta$. 于是可以进一步把它简化为

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\omega^2\theta, \omega^2 = \frac{g}{l}.$$

经过上述略去次要因素与简化得出的上式已含有模型误差.

解上式得

$$\theta(t) = A\sin \omega t + B\cos \omega t.$$

由此得出单摆的周期 $T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$.

在实际计算 T 时,需要对 l 与 g 作观察与测量,这时不可避免会带来观测误差;当使用各种方法求 $2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$ 时,所用的近似方法求得的解与 $2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$ 之间还有方法误差;最后,按算式所作运算都用有限位数进行,于是又产生了舍入误差,利用初始条件确定 A 、 B 时也有类似的误差.

2.2 绝对误差和相对误差

设 x 为某一准确数, x^* 为 x 的近似数,则称

$$\Delta(x) = x - x^*$$

为 x^* 对 x 的绝对误差.

如 $x = \sqrt{2}$, $x^* = 1.4142$, 则 $\Delta(x) = \sqrt{2} - 1.4142 = 0.000\,013\,56\cdots$.

一般地说 $\Delta(x)$ 是未知的,往往只能根据实际情况得出 $|\Delta(x)|$ 的一个上界 ϵ : $|\Delta(x)| \leq \epsilon$, 并把 ϵ 称为 x^* 对 x 的绝对误差限.有了 ϵ , 可由 x^* 与 ϵ 得出 x 的范围:

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

在工程技术中将上述不等式表示成

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

如 $l = 10 \pm 0.01(\text{cm})$, 即 $l^* = 10$ 是 l 的一个近似值,其绝对误差差限 $\epsilon = 0.01$, $|\Delta(x)| \leq 0.01$.

例 1.7 考虑“四舍五入”的绝对误差限.

设有实数 x , 它的十进制标准表示式是

$$x = \pm 0.a_1a_2\cdots a_na_{n+1}\cdots \times 10^m,$$

其中 m 为整数, $a_i \in \{0, 1, 2, \cdots, 9\}$, $i = 1, 2, \cdots$, $a_1 \neq 0$. 若对 a_{n+1} 作四舍五入, 得 x 的近似值 x^* :

$$x^* = \begin{cases} \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m & \text{当 } a_{n+1} \leq 4 \text{ 时(四舍)} \\ \pm 0.a_1a_2\cdots (a_n + 1) \times 10^m & \text{当 } a_{n+1} \geq 5 \text{ 时(五入)} \end{cases}$$

则四舍时

$$|\Delta(x)| = |x - x^*| = (0.a_1a_2\cdots a_na_{n+1}\cdots - 0.a_1a_2\cdots a_n) \times 10^m$$

$$\leq 0.00\cdots 05 \times 10^m = \frac{1}{2} \times 10^{m-n};$$

五入时

$$|\Delta(x)| = |x - x^*| = |(0.a_1a_2\cdots(a_n+1) - 0.a_1a_2\cdots a_na_{n+1}\cdots)| \times 10^m \\ \leq 0.00\cdots 05 \times 10^m = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}.$$

即对 x 作四舍五入后,其绝对误差限为被保留的最后数位上的半个单位.

有时候,单用绝对误差的概念还不足以完整地反映误差的情况,如测量长为 100(m)的甲物时,有绝对误差 1(cm),测量长为 1(m)的乙物时,绝对误差也是 1(cm),虽然两个测量的绝对误差相同,显然测量甲物比测量乙物精确.

由此可见,要全面地反映近似值的精度,还需要考虑绝对误差与所讨论的数量的比.

把近似数 x^* 的绝对误差 $\Delta(x)$ 与准确数 x 之比

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

称为 x^* 对 x 的相对误差.实际上, x 是未知的,所以通常改用

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

作为 x^* 的相对误差,并记作 $\delta(x)$:

$$\delta(x) = \frac{\Delta(x)}{x^*}.$$

当 $\delta(x)$ 很小时, $\frac{\Delta(x)}{x^*}$ 与 $\frac{\Delta(x)}{x}$ 的差

$$\frac{\Delta(x)}{x^*} - \frac{\Delta(x)}{x} = \frac{(\Delta(x)/x^*)^2}{x/x^*} = \frac{(\Delta(x)/x^*)^2}{x/x^*} = \frac{(\delta(x))^2}{1 + \Delta(x)/x^*} \\ = \frac{(\delta(x))^2}{1 + \delta(x)} \approx \delta^2(x)$$

可以忽略不计.

$|\delta(x)|$ 的上界称之为 x^* 对 x 的相对误差限.记作 ϵ_r :

显然 $\frac{\epsilon}{|x^*|}$ 是 x^* 的一个相对误差限.

如国际大地测量会议建议光速

$$c = 299\,792\,458 \pm 1.2(\text{m/s}),$$

其绝对误差限

$$\epsilon = 1.2(\text{m/s})$$

相对误差限

$$\frac{\epsilon}{|c^*|} = \frac{1.2}{299792458} \leq 0.000\,000\,004\,1.$$

由此可见, $c^* = 299\,792\,458(\text{m/s})$ 的相对误差是很小的.

当 x 是有单位的量值时, 其近似值 x^* 对 x 的绝对误差和相对误差均为量值.

2.3 有效数字

设 x 的近似数

$$x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m$$

如果

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

那么称 x^* 作为 x 的近似数具有 n 位有效数字.

例如, 在用某种计算方法求 x 时, 所得的 x^* 往往具有若干位有效数字; 又如用四舍五入取准确数 x 的前 n 位作近似数 x^* , 则 x^* 具有 n 位有效数字. 在计算机中表示无理数时, 都是有限位的, 因此用(二进制下的)舍入法产生 x 的近似数 x^* 是常用的产生有效数字的方法.

例 1.8 对某地重力常数 g (以 m/s^2 为单位) 作四舍五入得 $g \approx g^* = 9.81(\text{m/s}^2)$:

$$|g - g^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \frac{1}{2} \times 10^{1-3}.$$

由 $m = 1$ 知它有 3 位有效数字. 若以 km/s^2 为单位, $g \approx g^* = 0.00981(\text{km/s}^2)$:

$$|g - g^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-5} = \frac{1}{2} \times 10^{-2-3},$$

由 $m = -2$ 知它也有 3 位有效数字.

由此可见, 有效位数与近似数所用的单位无关.

如上所述, 绝对误差 $x - x^*$ 与相对误差 $\frac{x - x^*}{x}$ 是衡量 x^* 近似 x 时近似程度好坏的标志; x 与它的有 n 位有效数字的近似数 x^* 之间满足 $|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$, 于是自然猜测误差与有效数字这两个概念之间有一定的联系. 事实上, 有

定理 1.1 (有效数字与相对误差的关系)

(1) 若

$$x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m (a_1 \neq 0)$$

是 x 的有 n 位有效数字的近似数, 则

$$|\delta(x)| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n};$$

(2) 若

$$x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m (a_1 \neq 0)$$

是 x 的近似数, 且

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

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证 (1) 由 $|x^*| \geq a_1 \times 10^{m-1}$ 及 $|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$ 得

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

$$\text{故 } \epsilon_r \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}.$$

(2) 由 $|x^*| \leq (a_1 + 1) \times 10^{m-1}$ 及 $\epsilon_r \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{1-n}$ 得

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

故 x^* 有 n 位有效数字.

例 1.9 求 $\sqrt[3]{100}$ 的近似数, 使其相对误差小于 0.1%, 问应取几位有效数字?

解 由定理 1.1 的(1), 令

$$|\delta(x)| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n} < 0.1\%$$

而 $4 < \sqrt[3]{100} < 5$, 故 $a_1 = 4$, 代入上述不等式得

$$10^n > 10^4 / 8,$$

故可取 $n = 4$, 即取 4 位有效数字可使其相对误差小于 0.1%.

2.4 误差的传播

实际问题中欲求的量, 大都不是由直接测量求得, 而是测量与之有关的量再经过运算得出的. 如求长方体的体积, 通常由测量其长、宽、高再相乘得出, 而求圆的面积是通过测量圆的直径而算出圆的面积, 因此怎样从长、宽、高、直径的误差来了解所求得长方体体积和圆的面积的误差是一个有意义的问题.

一般地说, 设有多元函数

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

x_k^* 为 $x_k = x_k^{(0)}$ 的近似数, 记 $\Delta(x_k) = x_k^{(0)} - x_k^*$, $k = 1, \dots, n$; 现估计:

$$\Delta(y) = y^{(0)} - y^* = f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) - f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*).$$

设 f 对所有 x_k 有连续偏导数, 由一阶 Taylor 公式得

$$\Delta(y) = y^{(0)} - y^* \approx \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)_* \Delta(x_k).$$

其中 $\left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)_* = \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_k}$. 由 $\frac{\partial f}{\partial x_k}$, $k = 1, 2, \dots, n$, 的连续性可知, 当

$|\Delta(x_k)|$ ($k = 1, 2, \dots, n$) 很小时, 上式的近似程度一般很好. 相对误差

$$\delta(y) = \frac{\Delta(y)}{y^*} \approx \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)_* \frac{x_k^*}{y^*} \delta(x_k).$$

由上两式可见: 下列两组数

$$\left\{ \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)_* \right\}_1^n, \quad \left\{ \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)_* \frac{x_k^*}{y^*} \right\}_1^n,$$

表示原始的带误差的数经计算后得出结果的误差将原始误差的放缩倍数, 这些重要的数称之为求 y 的条件数. 当条件数的绝对值很大时, $\Delta(y)$ 、 $\delta(y)$ 就可能很大 (即使 $\Delta(x_k)$ 、 $\delta(x_k)$, $k = 1, 2, \dots, n$, 都很小), 这时候求 y 的问题称之为病态问题或坏条件问题.

例 1.10 考虑多项式方程

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

的求根问题的条件数.

解 为简单起见, 考虑某根 α 关于某个系数 a_i 的条件数: $\frac{\partial \alpha}{\partial a_i}$.

将恒等式

$$p(\alpha) = \sum_{k=0}^n a_k \alpha^k = 0$$

关于 a_i 求导, 注意到 $\alpha = \alpha(a_i)$, 得

$$\alpha^i + p'(\alpha) \frac{\partial \alpha}{\partial a_i} = 0,$$

当 $p'(\alpha) \neq 0$ 时

$$\frac{\partial \alpha}{\partial a_i} = -\frac{\alpha^i}{p'(\alpha)}.$$

由此可见, 当 $p'(\alpha) \approx 0$ 时, 问题是病态的.