

713981

大学生常用数学微机计算



〔日〕平田光穗 须田精二郎 竹本宜弘 著

孔蜀江 宋湘河 译

王思玉 刘佳民 校

中南工业大学出版社



前 言

我们认为，近十年来，有关数值计算方法的教材，之所以广为流行，是因为当前学生们的练习手段已经从计算尺转而为台式计算机的缘故。今后，随着微型计算机、个人计算机的进一步普及，从台式计算机向微型计算机、个人计算机的转变将是大势所趋。

本书中，我们极为关心的不是严格的数学理论，而是对工程技术的应用，即如何熟练地使用数值计算方法。

本书是以我们的讲义作为基础修定而成的。在第一篇（基础篇）中，对数值计算汇集了最基本的，也是最便于使用的方法。书中的例题和练习，都能够立即在目前使用的大多数个人计算机上应用，在第二篇（应用篇——流程图·程序）中，应该指出的是，与流程图一起用来解答第一篇中问题的计算机程序，是我们自己编制的。

本书是为个人计算机编写的。当然，就内容看，也适用于一般的计算机。若是能够使之成为各种具体的数值计算的参考资料，那将使我们感到荣幸。

最后，谨向工业学院承担编制流程图、程序的森下英治、内田雅树、田村秀雄、铃木和弘氏诸君表示感谢。

作 者
1982年初春

目 录

第一篇 基础篇

第1章 实验数据的处理方法

1.1 误差	(1)
1.2 平均值	(3)
1.3 方差与标准偏差	(4)
1.4 频数分布	(5)
1.5 相关系数	(5)
1.6 数据的重排	(6)
1.6.1 选择法	(6)
1.6.2 合并法	(6)
1.7 多项式计算的注意事项	(7)
1.7.1 数字位丢失误差的防止	(7)
1.7.2 外插时的注意点	(8)

第2章 实验公式的构造方法

2.1 插值法	(9)
2.1.1 线性插值法	(9)
2.1.2 拉格朗日插值公式	(9)
2.1.3 牛顿插值公式	(11)
2.2 平均法	(11)
2.3 最小二乘法	(15)
2.4 数据的公式表示法	(17)
2.4.1 典型的曲线法	(17)
2.4.2 用差分法确定实验公式的方法	(20)

第3章 数值微分法和积分法

3.1 微分法	(25)
3.1.1 道格拉斯-阿瓦基安法	(25)
3.2 积分法	(26)
3.2.1 梯形法则	(27)
3.2.2 辛普生法则	(28)
3.2.3 高斯法	(29)

第4章 线性方程组的解法

4.1 克莱姆法则	(33)
4.2 高斯消去法	(35)
4.3 高斯-约当消去法	(37)
4.4 高斯-赛德尔法(迭代法)	(39)

第5章 代数方程的解法

5.1 公式法	(44)
5.1.1 二次方程式	(44)
5.1.2 三次方程式	(45)
5.2 弦截法	(46)
5.3 二分法	(47)
5.4 简单迭代法	(48)
5.5 劈因子法	(49)
5.6 牛顿法	(51)
5.7 牛顿-拉夫逊法	(52)
5.8 二元方程的弦截法	(54)

第6章 常微分方程

6.1 台劳级数法	(57)
6.2 欧拉法	(60)
6.3 改进的欧拉法	(61)
6.4 休恩法	(62)
6.5 龙格-库塔法	(63)
6.6 预报校正法	(67)
6.7 米尔恩法	(69)
6.8 高阶常微分方程的解法	(70)
6.9 龙格-库塔法在高阶常微分方程中的应用	(71)

第7章 偏微分方程

7.1 基于差分方程的解法	(74)
7.1.1 差分近似	(74)
7.1.2 克兰克-尼科尔森法	(81)
7.1.3 克兰克-尼科尔森法的一般化	(84)
7.2 基于迭代法的解法	(85)
7.3 松弛法	(90)

第8章 其它的特殊算法

8.1 蒙特卡洛法	(95)
8.2 随机走动法	(102)

第二篇 应用篇—流程图·程序

1. 算术平均	(107)
2. 算术平均与几何平均	(107)
3. 方差与标准偏差	(107)
4. 相关系数	(108)
5. 数据的重排(选择法)	(109)
6. 数据的重排(合并法)	(111)
7. 多项式计算	(114)
8. 线性插值法	(116)
9. 拉格朗日插值法	(119)
10. 牛顿插值法	(121)
11. 平均法	(124)
12. 最小 2 乘法	(127)
13. 道格拉斯-阿瓦基安法	(130)
14. 梯形法则	(131)
15. 辛普生法则	(135)
16. 高斯法	(137)
17. 克莱姆法则	(141)
18. 高斯消去法	(144)
19. 高斯-约当法	(147)
20. 高斯-赛德尔法	(151)
21. 2 次方程式	(153)
22. 4 次方程式	(155)
23. 弦截法	(158)
24. 2 分法	(160)
25. 简单迭代法	(162)
26. 劈因子法	(165)
27. 牛顿法	(168)
28. 牛顿-拉夫逊法	(171)
29. 2 元弦截法	(174)
30. 欧拉法	(176)
31. 改进的欧拉法	(179)
32. 休恩法	(182)
33. 龙格-库塔法	(185)
34. 龙格-库塔-吉尔法	(188)
35. 预报校正法	(192)
36. 米尔恩法	(197)

37. 高阶常微分方程的龙格-库塔法.....	(203)
38. 克兰克-尼科尔森法 (用雅可比法计算).....	(206)
39. 克兰克-尼科尔森法 (用高斯-赛德尔法计算)	(208)
40. 松弛法.....	(210)
41. 蒙特卡洛法 (计算 π)	(221)
42. 蒙特卡洛法 (逆矩阵的计算)	(224)
附录: BASIC 基础.....	(227)
参考文献.....	(229)

第1章 实验数据的处理方法

通常, 在产品设计、制造之前, 需要认真地进行实验, 通过观察实验所得到的实验数据, 分析过程的工作特性, 或者依据对实验数据的解释而作出重要的决定。

为了最大限度地提取隐藏在实验数据中的情报, 存在着各种各样的办法。例如, 根据实验数据作图, 求几次实验数据的平均值、方差及标准偏差, 等等, 或者是构造频数分布表, 偶而还要进行数据的重排操作。

另一方面, 在数值计算中, 必须经常注意“误差”这个问题。误差, 大致可以分为:

固有误差: 原始数据本身所带来的误差。

截断误差: 截断近似表达式或无穷级数所产生的误差。

舍入误差: 由于对超出计算机存储单元位数的以后部分的数值进行舍入而产生的误差。

然而, 在进行数值计算时, 对于所用的近似公式, 究竟含有多大的截断误差, 这要在建立近似公式时才能知道。所以, 事先用近似公式表示截断误差是件非常重要的事情。固有误差是由于实验手段等原因造成的, 这在实验阶段就要充分注意以不产生误差。舍入误差因随计算机机种的不同而异, 所以比较麻烦。例如, 象对积分和微分方程那样的数值计算中, 虽然减小步长(以后记为 h), 则精度提高(因为截断误差减少), 但若步长取得过小, 将由于舍入误差的积累而出现误差增大的现象。

本章中, 我们将阐述实验数据的最基本处理方法。

1.1 误差

在数值计算中, 必须经常注意误差的问题。因此本节将简单地介绍一下误差的基本概念。

① **误差**: 设真值 x 的近似值为 z , 这时, 称 $e = z - x$ 为 z 的误差, $|e|$ 为 z 的绝对误差, $c_e = e/x = (z - x)/x$ 为 z 的相对误差。

② **舍入误差**: 在用计算机进行各种计算时, 尽量使用较大的位数, 以得到准确的值。但是, 由于存储数值的计算机内存(称之为存储器)单元之字长是有限的, 所以, 实际上是将低位上的数字予以适当地省略(取存入存储器中的极限值)来进行计算的。这种操作称为舍入。由此而产生的误差叫做舍入误差。在舍入时, 一般采取四舍五入或截尾的方法。实际

上,在用计算机进行计算时,因为是用位数固定的有限位数值表示的,所以,每次四则运算都会产生舍入误差。同时,这种误差不仅在计算过程中,而且在将数据输入计算或者打印计算结果时也会产生。

③ **有效数字位**: 我们称因四舍五入而被舍入了的 s 位数值为具有 s 位有效数字的值, s 称为有效数字位 (或有效位数)。

④ **数字位相消**: 在运算过程中,称丢失有效数字位数的现象为数字位相消 (或数字位丢失)。

特别是在进行两个相近数值的减法运算时,就会产生有效数字位数的减少。要想一眼就发现由于数字位丢失而产生的误差是困难的,所以,在使用位数较少的计算机时,需要引起注意。

现以计算二次方程式的根作为数字位丢失的一个简例。设

$$ax^2 + bx + c = 0$$

的一个根,由公式

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (1.1)$$

求得。特别是,当 $b > 0$, $b^2 \gg 4ac$ 时,在计算 $-b + \sqrt{b^2 - 4ac}$ 时,将产生数字位丢失。一种减少这种数字位丢失误差的方法,是将式 (1.1) 的分子分母同乘以 $-b - \sqrt{b^2 - 4ac}$, 将它变成

$$x_1 = \frac{-2c}{b + \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

之后,再求 x_1 。这样,可以去掉成为数字位丢失原因的减法运算。例如,计算 $a = -2$, $b = 3$, c 在 $0.01 \sim 0.00000001$ 之间变化时的 x_1 , x_1' 的相对误差,如表 1.1 所示。因为 x_1 的有效数字位相互抵消,因此含有相当大的误差。

表 1.1 数字位丢失误差的例子

c	x_1	x_1'	$ 1 - x_1/x_1' $
0.010000000	-0.326237958E-01	-0.326237925E-01	0.996515155E-07
0.001000000	-0.332596048E-02	-0.332595874E-02	0.524800271E-06
0.000100000	-0.333259959E-03	-0.333259290E-03	0.200839713E-05
0.000010000	-0.333331573E-04	-0.333325952E-04	0.168620609E-04
0.000001000	-0.333288585E-05	-0.333332616E-05	0.132093031E-03
0.000000100	-0.332792752E-06	-0.333333290E-06	0.162161505E-02
0.000000010	-0.347695899E-07	-0.333333370E-07	0.430875821E-01
0.000000001	-0.496726793E-08	-0.333333383E-08	0.490180157E+00

⑤ **截断误差**: 将无穷连续级数在有限项截断时所产生的误差叫做截断误差。例如用梯形法或辛蒲生 (Simpson) 法近似表示定积分的值及用差分法解微分方程时所产生的误差, 即为此类误差。

⑥ **误差限**: 当 $|e| \leq \varepsilon$ 时, 称 ε 为误差 e 的限。设真值 x 的近似值为 z , 则 x 满足下面关系:

$$z - \varepsilon \leq x \leq z + \varepsilon$$

相对误差限为

$$|e_r| = \frac{|e|}{|z - e|} \leq \frac{|e|}{|z| - |e|} \leq \frac{|e|}{|z| - \varepsilon} \approx \frac{\varepsilon}{|z|}$$

其中 $\varepsilon/|z|$ 非常之小。

【例题1.1】 设 $z_1 = 1.23456$, $z_2 = 1.23432$ 为真值 x_1 、 x_2 的近似值, 且精确到小数点后 5 位。试回答下列问题:

- (1) z_1 , z_2 的误差限及 x_1 、 x_2 的存在范围;
- (2) z_1 , z_2 的相对误差限;
- (3) z_1 , z_2 的有效数字位数;
- (4) $z_1 - z_2$ 有数字位丢失吗? 如有, 是多少?

【解】 (1) z_1 的误差限 ε_a 为 $|e_a| \leq 0.5 \times 10^{-5}$

z_2 的误差限 ε_b 为 $|e_b| \leq 0.5 \times 10^{-5}$

x_1 , x_2 的存在范围为

$$1.234555 \leq x_1 \leq 1.234565$$

$$1.234315 \leq x_2 \leq 1.234325$$

(2) z_1 的相对误差限为

$$e_r(z_1) = \frac{|e|}{|z_1 - e|} \leq \frac{\varepsilon}{|z_1|} = \frac{0.5 \times 10^{-5}}{1.23456} < 0.41 \times 10^{-5}$$

z_2 的相对误差限为

$$e_r(z_2) = \frac{|e|}{|z_2 - e|} \leq \frac{\varepsilon}{|z_2|} = \frac{0.5 \times 10^{-5}}{1.234325} < 0.41 \times 10^{-5}$$

(3) z_1 , z_2 的有效数字位数均为 6 位。

(4) 因为 $z_1 - z_2 = 0.00024$, 有效数字位数从 6 位下降到 2 位, 从而产生了数字位丢失。

1.2 平均值

当有一组数据时, 各种意义下的平均值都是很重要的。最常用的是算术平均值, 对 n 个数据 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的算术平均值, 定义如下:

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + x_3 + \dots + x_n}{n} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \quad (1.2)$$

【例题1.2】从矿山的14个不同地点采集标本，在对某种成份进行分析时，得到如下数据：

8, 9, 10, 9, 12, 8, 10, 9, 11, 10, 12, 10, 11, 11,

试求这组数据的算术平均值。

【解】求算术平均值 $\bar{x}$ 的程序及其结果($XA=10$)，请参阅第二篇，且以 XA 表示 $\bar{x}$ 。算术平均值的更为一般的表示法，是用下面公式表示的加权平均值：

$$\text{加权平均值} = \frac{W_1x_1 + W_2x_2 + \cdots + W_nx_n}{W_1 + W_2 + \cdots + W_n} \quad (1.3)$$

对于给定的非线性变化变量的平均值，可以采用几何平均值，其定义式为

$$\text{几何平均值} = (x_1x_2\cdots x_n)^{1/n} = \left(\prod_{i=1}^n x_i\right)^{1/n} \quad (1.4)$$

【例题1.3】试求例题1.2中所列数据的几何平均值，并与其算术平均值进行比较。

【解】求算术平均值 XA 和几何平均值 XG 的程序及其结果($XA=10$, $XG=9.92047$)将在第二篇中予以介绍。

从例题1.3可以知道，下式成立：

$$\text{算术平均值} = \frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n}{n} \geq (x_1x_2\cdots x_n)^{1/n} = \text{几何平均值} \quad (1.5)$$

1.3 方差与标准偏差

衡量一组数据偏离其平均值的尺度，叫做方差。方差的表达式为

$$\text{方差} = V = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n} \quad (1.6)$$

当 n 的值较小时，更多地采用下面的无偏方差：

$$\text{无偏方差} = NV = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1} \quad (1.7)$$

上面诸式中的 $\bar{x}$ 为算术平均值(参看式(1.2))。

表示一组测量数据的精度或偏离平均值的程度，较为方便的尺度是用标准偏差。标准偏差等于方差的平方根，即

$$\text{标准偏差} = S = \sqrt{V} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (1.8)$$

当 n 较小时，

$$\text{标准偏差} = SD = \sqrt{NV} = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (1.9)$$

【例题1.4】试求例题1.2中给定数据的方差及标准偏差。

【解】求这些值的程序及其结果，将在第二篇中予以介绍。平均值 $=XA$ ，方差 $=V$ ，无

偏方差 = NI , 标准偏差(式(1.8)) = S , 标准偏差(式(1.9)) = SD . S_2 表示 $\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$.

1.4 频数分布

把数据集分成具有某一大小范围的 n 个等级的子集, 它们是 $x_1 \sim x_2, x_2 \sim x_3, \dots, x_n \sim x_{n+1}$. 设各等级的数据个数分别为 $f_1, f_2, \dots, f_n$, 则称 $f_i (i=1, 2, \dots, n)$ 为频数. 各等级的中值称为等级值, 记为 $m_i (i=1, 2, \dots, n)$. 把对应于 i 的 f_i 的分布作成表, 这个表称为频数分布表, 通常用矩形图(直方图)表示它.

当未给具体数据而给出频数分布时, 欲近似地求出这个集合的平均值 $\bar{x}$ 及标准偏差 S 时, 可以这样计算:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n m_i f_i, \quad n = \sum_{i=1}^n f_i$$

$$S = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (m_i - \bar{x})^2 f_i}$$

1.5 相关系数

当给定的两个变量 x 和 y 之间以某种关系发生变化时, 我们把表示其关系强弱的尺度称为相关系数. 给相关系数下的定义式为

$$\text{相关系数} = r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\left(\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2\right) \left(\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2\right)}} \quad (1.10)$$

当 $|r| > 0.7$ 时, 称为强相关; 当 $|r| < 0.5$ 时, 称为弱相关. 为了便于理解, 将式(1.10)改写成下面的形式:

$$\text{相关系数} = r = \frac{\overline{xy} - \bar{x} \cdot \bar{y}}{\sqrt{(\overline{x^2} - \bar{x}^2)(\overline{y^2} - \bar{y}^2)}} \quad (1.11)$$

式中, $\overline{xy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i, \quad \overline{x^2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2, \quad \overline{y^2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i^2.$

【例题1.5】 空气在高温下的比热如下表所列:

$x(^{\circ}\text{C})$	200	300	400	500	600	700	800
$y(\text{Cal/mol} \cdot ^{\circ}\text{C})$	7.02	7.07	7.15	7.23	7.30	7.37	7.45

试求温度 x 和比热 y 之间的相关系数.

【解】 求解程序将在第二篇中介绍. 这里 $XA = \bar{x}, \quad YA = \bar{y}, \quad X2A = \overline{x^2}, \quad XYA = \overline{xy},$

$Y_2A=y^2, R=r, R=0.998667。$

1.6 数据的重排

将数据按照某种顺序（如大小或字母）来改变其排列的操作叫做分类，如果数据的数目很多，则分类所需的时间就成问题。就是说，分类的快慢乃是评价分类的基准。迄今，业已开发出了许多种分类方法。下面，我们仅以程序比较简单的选择法和所需分类时间较少而程序略为复杂的合并法为例予以说明。

1.6.1 选择法

兹考虑按升序（从小到大）改变 n 个数据 $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ 的排列。假定这 n 个数据的状态，如图1.1所示。设从 a_1 到 a_{k-1} 已完成重排，而从 a_k 到 a_n 尚未完成重排。

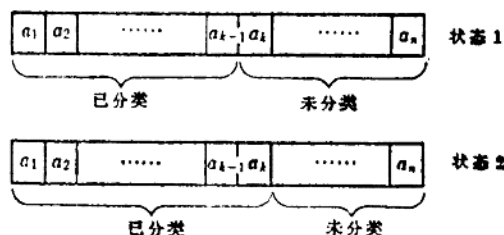


图1.1 选择法

从 a_1 到 a_{k-1} 有 $a_1 \leq a_2 \leq \dots \leq a_{k-1}$ ，且设 $a_l \leq a_j$ ($1 \leq l \leq k-1, k \leq j \leq n$)。这时，假定从 a_1 到 a_k 已按下述步骤进行过分类，按照图1.1从状态1变成了状态2。

步骤：

- (1) 从 $a_k, a_{k+1}, \dots, a_n$ 中寻找最小值 a_m 。
- (2) 将 a_k 和 a_m 进行交换。

若规定下标 k 前进一步，则再次转到状态1，从 $k=1$ 开始，顺序重复这一过程，就能把全部数值按照从小到大的顺序重新排列。这种方法叫做选择法，选择法的流程图如图1.2所示。

【例题1.6】 试根据选择法按照从小到大的顺序重排下列数据：

-2.8, 3.5, -2.3, 36.2, 582.1,
0.1, 0.2, -56.0, 1.1, -2.2

【解】 选择法重排程序及结果，将在第二篇里介绍。

1.6.2 合并法

在数据的数值已经按照大小顺序排好的部分（称之为子集或串）有多个的情况下，将它们合并起来以构成更大的子集，并使之按某一大小顺序排列起来，利用这种方法反复执

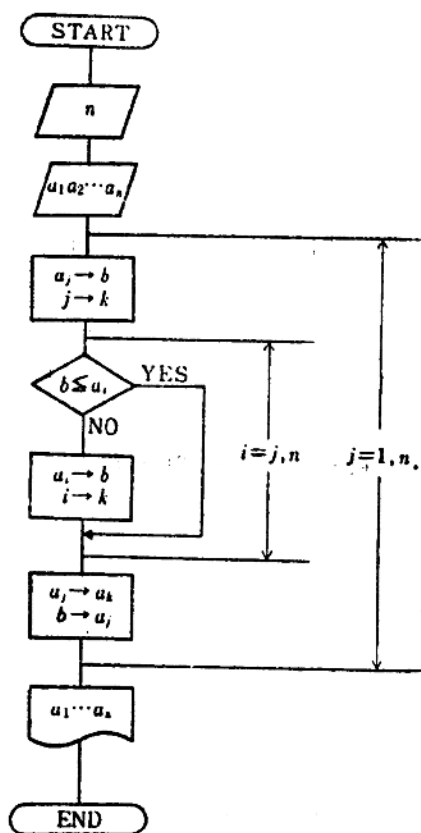


图1.2 选择法流程图

行, 最后全部数据就会变成一个集合。

步骤:

(1) 把全部数据分成多个子集。例如, 分成由 2 个数据组成的子集。

(2) 将两个以上的子集进行合并。合并时, 置子集的第一个数据为该子集的最小数据。

(3) 对于第一个位置上置好了数据的子集, 将置好第一个数据的下一个数据同应该与之合并的数据进行比较, 选其中的小者为第二个元素。

(4) 反复执行步骤 (3), 直至参与合并的全部子集的数据全部取出为止。

图 1.3 为上述步骤的简单示例。

【例题 1.7】 试用合并法按照从小到大的顺序重排下面的数据:

-2.8, 3.5, -2.25, 36.2, 582.1,
0.00021, 0.2, -56.0, 1.1, -2.2,
22.5, -63, 10.004, 2.14, 3.99

合并法的程序稍复杂些, 但
与选择法相比, 它所需的分类时
间却少得多。因此, 在数据个数
多的情况下, 宜采用合并法。

【解】 合并法的程序及结
果, 将在第二篇中介绍。

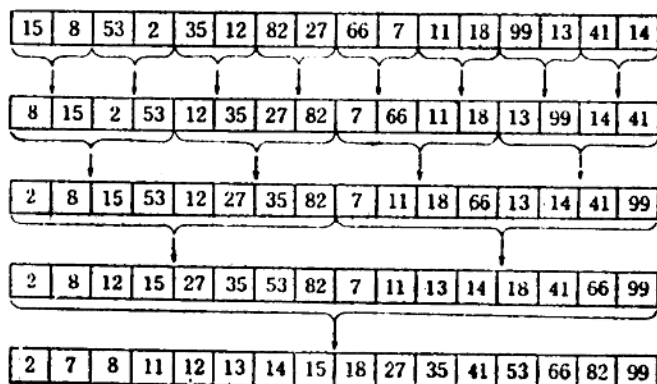


图 1.3 合并法

1.7 多项式计算的注意事项

1.7.1 数字位丢失误差的防止

通常会遇到计算下述多项式的值:

$$P_n(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + a_2 x^{n-2} + \cdots + a_{n-1} x + a_n \quad (1.12)$$

比如, 描绘 $P_n(x)$ 的图形就是一例。这时, 如果 x 为非常小的值。则将 x 值代入式 (1.12) 求 $P_n(x)$, 便会产生数字位丢失等误差。例如, 设 $x=0.01$, $n=4$ 时, 则

$$x^4 = (0.01)^4 = 0.00000001$$

即使给这个值乘以 a_0 , 也几乎反映不出 a_0 。如设 $a_0=2.0$, 则

$$a_0 x^4 = 2.0 \cdot (0.01)^4 = 0.00000002$$

也是个非常小的值。为了解决数字位丢失的问题, 多半是改为求式 (1.12) 的递推公式之值。例如, 将式 (1.12) 改形为

$$P_n(x) = (\cdots (((a_0 x + a_1) x + a_2) x + \cdots + a_{n-1}) x + a_n \quad (1.13)$$

经此改形之后, 若计算含有 a_0 的部分, 则象上面所述的那种数字位丢失现象就可以减少。对于上例, 因

$$a_0 x = 2.0 \cdot 0.01 = 0.02$$

所以, 在这一步不必担心数字位丢失的问题。

从式 (1.13) 的最里层 () 中的式子开始, 依序记为 $p_k (k=0, 1, 2, \cdots, n)$, 则 p_k 的各项为

$$\begin{aligned}
p_0 &= a_0 \\
p_1 &= p_0x + a_1 = (a_0)x + a_1 \\
p_2 &= p_1x + a_2 = ((a_0)x + a_1)x + a_2 \\
p_3 &= p_2x + a_3 = (((a_0)x + a_1)x + a_2)x + a_3 \\
&\dots\dots\dots \\
p_k &= p_{k-1}x + a_k = (\dots(((a_0)x + a_1)x + a_2)x + \dots + a_{k-1})x + a_k \\
&\dots\dots\dots \\
p_n &= p_{n-1}x + a_n = (\dots(((a_0)x + a_1)x + a_2)x + \dots + a_{n-1})x + a_n
\end{aligned} \tag{1.14}$$

现在, 因为

$$p_n(x) = p_n$$

所以, 式(1.14)归结为下列递推公式:

$$\begin{aligned}
p_0 &= a_0 \\
p_k &= p_{k-1}x + a_k \quad (k=1, 2, \dots, n)
\end{aligned} \tag{1.15}$$

根据上述理由, 宜用式(1.15)代替式(1.12)来计算 $p_n(x)$ 。同时, 由于式(1.15)为递推公式形式, 因此称之为面向计算机的一种方法。

1.7.2 外插时的注意点

图 1.4 是对 3.1.1 节所介绍的道格拉斯阿瓦基安 (Douglas-Avakian) 法的例题进行作图的结果。在 $x=0.5$ 到 $x=1.1$ 的范围内, 含有 7 个已测出的实验点。为了了解其外侧曲线的趋势, 我们把 $x=0.5$ 时的 y 值从 0.23 到 0.28 以 0.01 间距稍稍变化的曲线形状表示出来。从这个图上可以看出, 在确定实验多项式时, 在所用到的实验数据范围之内, 几乎看不出有什么影响, 而在这个范围之外, 变化得十分显著。这种差异的产生, 是因为所依据的仅仅是一个点的数据。这个事实表明, 用最小二乘法和插值法所得到实验公式, 都不能保证所用数据以外部分的性态。一般说来, 应该避免实验公式的外插。这点在此图上是可以充分被理解的。

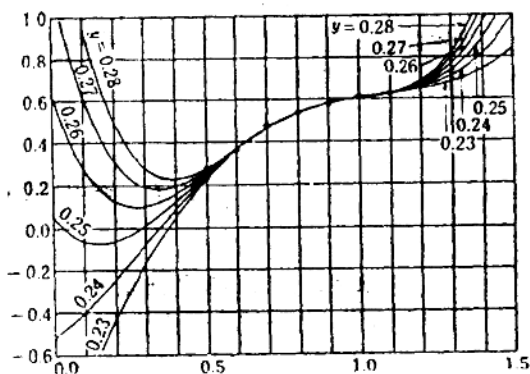


图1.4 对数据误差测量范围外的 y 值的影响
这里, 只注意从 $y=0.23$ 到 $y=0.28$
以 0.01 间距改变 y 值时的全部曲线变化即可

练 习 题

1.1 试求下列数据的方差及标准偏差:

74, 83, 69, 89

1.2 在 x 和 y 之间, 已得到下面的实验数据:

x	1	2	3	4
y	10	11	20	23

试求 x 和 y 之间的相关系数。

第2章 实验公式的构造方法

2.1 插值法

在以数值表形式给出实验数据或推算值,与自变量 x 相对应的因变量 y 的若干组关系 (x, y) 的情况下,“求对应于两组关系 (x, y) 之间的任一 x 的 y 值”的过程,即为插值法。有时称之为内插法。根据这种插值法,当给定的全部数据的个数为 n 时,就能得出通过全部给定点 (x, y) 的 $n-1$ 次多项式,这个多项式称之为插值多项式。作为实验结果,当得到了许多数据之后,在将其结果按等距关系进行整理以构成数据表或求出与期望的 x 值相对应的 y 值时,插值法是一种特别有用的方法。在后面各章所阐述的各种数值法中,往往需要等距离排列的数据。本章,将要介绍大家熟悉的拉格朗日(Lagrangé)插值法和牛顿(Newton)插值法,这两种方法都是十分重要的。

2.1.1 线性插值法

对图2.1所示的那种真实曲线,设在区间 (x_i, x_{i+1}) 内的曲线为一条直线,则对 $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ 范围内的某一点 x 来说,可用下式求得 y 值:

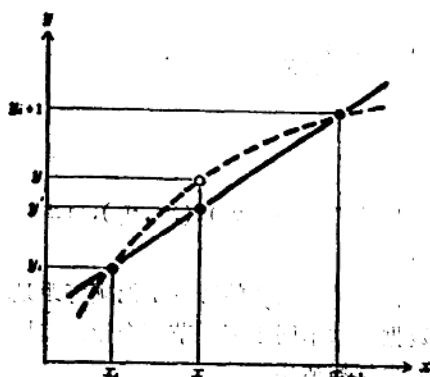


图2.1 线性插值

$$y \approx y' = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} (x - x_i) \quad (2.1)$$

象式(2.1)这样的插值,称为线性插值。因为这种方法只须缩小所选择的区间便可提高计算精度,所以说是一种简单、实用的插值法。这种方法的计算误差由下式给出:

$$|\text{误差}| \leq \frac{(x - x_i)(x_{i+1} - x)}{2} |y_{i+1}''(\theta)| \quad (2.2)$$

式中的 $y_{i+1}''(\theta)$ 是 $|y''(\theta)|$ 在 $x_i \leq \theta \leq x_{i+1}$ 上的最大值。

2.1.2 拉格朗日插值公式

若给定 n 组数据 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), \dots, (x_n, y_n)$, 则通过 n 个点的 $n-1$ 次多项式表示成下式:

$$\begin{aligned} y = & a_1(x - x_2)(x - x_3) \dots (x - x_n) \\ & + a_2(x - x_1)(x - x_3) \dots (x - x_n) \\ & + a_3(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n) \\ & \dots \dots \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &+ a_n(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_{n-1}) \\
 &= \sum_{i=1}^n a_i P_i(x)
 \end{aligned} \quad (2.3)$$

式中, $P_i(x)$ 为下列形式的 $n-1$ 次多项式:

$$\begin{aligned}
 P_i(x) &= (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n) \\
 &= \prod_{j=1, j \neq i}^n (x-x_j)
 \end{aligned} \quad (2.4)$$

对于式(2.4), 通过点 (x_1, y_1) 的条件是

$$\begin{aligned}
 y_1 &= a_1(x_1-x_2)(x_1-x_3)\cdots(x_1-x_n) \\
 \text{即 } a_1 &= y_1 / (x_1-x_2)(x_1-x_3)\cdots(x_1-x_n) \\
 &= y_1 / P_1(x_1)
 \end{aligned} \quad (2.5)$$

对于 $a_2, \dots, a_n$, 也可由

$$a_k = \frac{y_k}{P_k(x_k)} \quad (k=1, 2, \dots, n) \quad (2.6)$$

同样求得

将式(2.6)代入式(2.3), 得

$$y = \sum_{i=1}^n \frac{P_i(x)}{P_i(x_i)} \cdot y_i \quad (2.7)$$

在式(2.7)中, 当 $n=3$ 时,

$$\begin{aligned}
 y &= \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} \cdot y_1 + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} \cdot y_2 \\
 &\quad + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} \cdot y_3
 \end{aligned}$$

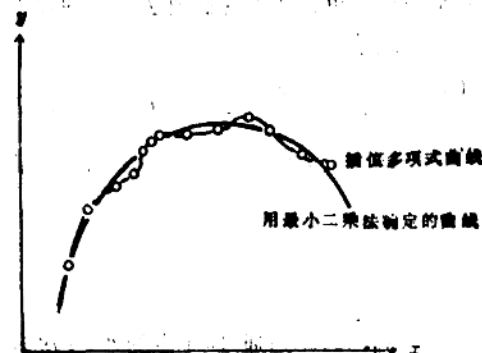


图2.2 实验数据的平滑曲线

这个式子, 显然必过 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)$ 的3点。
这种拉格朗日插值法的特点是无须等距地给出每个数据。这不同于下一节要介绍的需用等距数据的牛顿插值法。
应用插值公式时, 要注意的是应限定在公式约定的范围之内使用。象在2.3节所介绍的, 根据最小二乘法所确定的公式, 同样如此。任何时候, 都不能保证公式在约定范围之外的性态。通过外插所得的值, 多半是没有意义的值。最好不要认为插值多项式的次数愈高, 所得的插值精度也会愈高。使用这种式子求微分项, 往往是不理想的, 在一定需要微分时, 应根据2.3节和2.4节所述的那种平滑化了的公式求它。这样容易得到与实际情况相符合的值, 如图2.2所示。

另外, 拉格朗日插值法所引起的误差, 可表为

$$y = \sum_{k=1}^n \frac{P_k(x)}{P_k(x_k)} \cdot y_k = \frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{n!} \cdot |y^{(n)}_{\max}(\theta)| \quad (2.8)$$

式中, $|y_{\max}^{(n)}(\theta)|$ 表示 $|y^{(n)}(\theta)|$ 在 $x_1 \leq \theta \leq x_n$ 时的最大值, 而 (n) 表示 n 次微分。

【例题2.1】 试根据下表所列的4组数据

x_i	2.0	2.1	2.3	2.45
$y_i (= \ln x_i)$	0.6931	0.07419	0.8329	0.8961

利用拉格朗日插值多项式计算 $x=2.2$ 时的 y 值。

【解】 将所给数据代入式(2.6), 求出 $a_1 \sim a_4$:

$$a_1 = \frac{y_1}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_1-x_4)} = \frac{0.6931}{(2.0-2.1)(2.0-2.3)(2.0-2.45)} = -51.34$$

$$a_2 = \frac{y_2}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)(x_2-x_4)} = 106.0$$

$$a_3 = \frac{y_3}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)(x_3-x_4)} = -92.54$$

$$a_4 = \frac{y_4}{(x_4-x_1)(x_4-x_2)(x_4-x_3)} = 37.93$$

这里, 式(2.7)为

$$y = -51.34(x-x_2)(x-x_3)(x-x_4) + 106.0(x-x_1)(x-x_3)(x-x_4) \\ - 92.54(x-x_1)(x-x_2)(x-x_4) + 37.93(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)$$

若将 $x=2.2$ 代入, 使得

$$y = -0.1284 + 0.5299 + 0.4627 - 0.0759 = 0.7885$$

若将 $x=2.2$ 直接代入 $y = \ln x$, 得 $y=0.78846$ 。这与插值得到的值完全相一致。

2.1.3 牛顿插值公式

牛顿插值公式, 适用于 n 组数据对 x 呈等距排列的情况。我们取相邻 y 值之差, 再对其差不断取差, 这样做是为构造差分表所需, 这里,

$$\begin{aligned} \Delta^1 y_0 &= y_1 - y_0 \\ \Delta^1 y_1 &= y_2 - y_1 \\ &\dots\dots\dots \\ \Delta^1 y_n &= y_{n+1} - y_n \end{aligned} \quad (2.9)$$

这种取相邻两值的差, 称为差分。 $\Delta^1 y_n$ 为一阶差分。

同时, 若对一阶差分再取一次差分, 则为

$$\begin{aligned} \Delta^2 y_0 &= \Delta^1 y_1 - \Delta^1 y_0 = (y_2 - y_1) - (y_1 - y_0) = y_2 - 2y_1 + y_0 \\ \Delta^2 y_1 &= \Delta^1 y_2 - \Delta^1 y_1 = (y_3 - y_2) - (y_2 - y_1) = y_3 - 2y_2 + y_1 \\ &\dots\dots\dots \\ \Delta^2 y_n &= \Delta^1 y_{n+1} - \Delta^1 y_n = (y_{n+2} - y_{n+1}) - (y_{n+1} - y_n) = y_{n+2} - 2y_{n+1} + y_n \end{aligned} \quad (2.10)$$