21世纪 高等学校本科系列教材

总主编　吴中福

计算方法

(16)

梁家荣　尹　琦　编

重庆大学出版社

计 算 方 法

梁家荣　尹　琦　编

重 庆 大 学 出 版 社

内 容 简 介

本书主要介绍了计算机常用的计算方法及其基础理论，C编程实现。全书内容包括：误差分析，插值法，方程求根，线性方程组求解，曲线的拟合，数值积分和数值微分，常微分方程的数值解法。

本书取材新颖，内容丰富，逻辑严谨，理例结合。可作为高等院校计算机科学与技术、信息、管理、自动化、土木工程、机械等专业的本科和研究生的教材，也可供其他专业的师生以及科研和工程技术人员自学或参考。

图书在版编目（CIP）数据

计算方法/梁家荣，尹琦编．—重庆：重庆大学出版社，2001.7

计算机科学与技术本科系列教材

ISBN 7-5624-2318-0

Ⅰ.计…　Ⅱ.①梁…②尹…　Ⅲ.电子计算机-计算方法-高等学校-教材　Ⅳ.TP301.6

中国版本图书馆CIP数据核字（2001）第25007号

计算方法

梁家荣　尹　琦　编

责任编辑：谭　敏　　版式设计：谭　敏

责任印制：张立全

*

重庆大学出版社出版发行

出版人：张鸽盛

社址：重庆市沙坪坝正街174号重庆大学（A区）内

邮编：400030

电话：（023）65102378　65105781

传真：（023）65103686　65105565

网址：http://www.cqup.com.cn

邮箱：fxk@cqup.com.cn（市场营销部）

全国新华书店经销

重庆大学建大印刷厂印刷

*

开本：787×1092　1/16　印张：9.5　字数：237千

2001年7月第1版　　2003年9月第2次印刷

印数：6 001—11 000

ISBN 7-5624-2318-0/TP・284　　定价：15.00元

前言

计算方法是用数值的方法研究科学与工程中的计算问题，它主要包括近似值的计算和误差的估计两方面。随着计算机的广泛普及，计算机已成为科学和工程设计中的数值计算的有力工具。因此，培养学生的科学和工程的计算能力，学习计算机的常用数值方法，正受到众多高校的广泛重视。"计算方法"已成为工科各专业，特别是计算机科学与技术、土木工程、机械、数学等专业的基础课和必修基础课。

本书是根据教育部制定的工科院校"计算机科学与技术专业教学计划"中"计算方法"课教学大纲及编者多年来讲授"计算方法"的课程讲义基础上修订而成。内容力求介绍计算机中基本的、常用的各类数值的计算方法，注重培养学生用计算机编程解决实际问题的能力，这包括程序框图及用 C 语言编写的程序。本书的基础课是线性代数、常微分方程、高等数学、C 语言。

本课程大约需 50～55 学时，并需安排一定的计算实验。本书由梁家荣编写第 2、6、7 章，尹琦编写第 1、3、4、5 章，王向东、陆建波参加了部分章节的录入和程序的编写工作，全书由梁家荣统稿。

华南理工大学刘水清教授仔细地审阅了全部书稿，提出了不少宝贵意见，我们作了修改和补充。在本书的使用、修改和出版过程中，得到了广西大学计算机科学与技术系，昆明理工大学计算机科学与技术系的有关教师及重庆大学出版社的支持和帮助，在此一并致以衷心的感谢。

由于作者水平有限，书中难免会有错误和不足之处，敬请读者批评指正。

编　者

2001 年 4 月

目录

第 1 章 数值计算中的误差分析

1.1 引　言

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。利用各种计算工具来求出数学问题的数值解的过程称为数值计算。

由于科学技术的发展,各行各业都有大量复杂的数值计算问题需要解决,但这决不是人工手算所能解决的问题,计算机的出现和飞速发展有力推动了数值计算方法的进展,它为众多浩繁的数值计算问题的解决,展现了光明的前景,许多复杂的数值计算问题现在都可以通过计算机得到妥善的解决。

用数值计算方法来解决实际生活中的具体问题时,首先必须将具体问题抽象为数学模型,即建立该实际问题的数学模型,然后选择适当的算法,编制程序,上机调试并运行出结果。在这些环节中,每一步都可能产生误差。数值计算方法是将要求解的数学模型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,并对算法的收敛性、稳定性和误差进行分析、计算。所谓“算法”,不只是单纯的数学公式,而是由基本运算及运算顺序的规定所构成的完整的解题方案和步骤。计算方法的根本任务,也可说就是研究算法。

选定合适的算法是整个数值计算中非常重要的环节,如果算法选得不恰当,不仅影响到计算的速度,还会影响到计算结果的精度,甚至直接影响到计算的成败。

例如,要计算多项式

$$p(x) = a_nx^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_1x + a_0$$

的值时,若直接计算每一项 $a_ix^i(i=0,1,2,\cdots,n)$ 的值,再逐项相加,共需做

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

次乘法和 n 次加法。$n=10$ 时,需做乘法 55 次和加法 10 次。若用我国宋朝数学家秦九韶的著名算法“秦九韶算法”,将多项式 $p(x)$ 改写成

$$p(x) = (((\cdots((a_nx + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \cdots + a_2)x) + a_1)x + a_0$$

来计算时,只需要做 n 次乘法和 n 次加法。由此可见,同一个问题不同的算法直接影响计算的

速度和效率。

在许多数学问题的求解中，不可能经过有限次算术运算计算出结果来，例如要计算任意角的三角函数值，求一般方程的根，计算任意函数的积分，求一般微分方程的解，解方程组等。对于这类问题，常常采用近似代替的方法。因此，在研究算法的同时，还必须正确掌握误差的基本概念，误差在近似运算中的传播规律，误差分析，估计的基本方法和算法的数值稳定性概念，否则，一个合理的算法也可能会得出一个错误的结果来。

1.2 误差的概念及误差的来源

1.2.1 误差的种类与来源

在数值计算过程中，估计计算结果的精确度是十分重要的工作，而影响精确度的是各种各样的误差，它们可分为两大类：一类称为“过失误差”，它完全是人为造成的，这是完全可以避免的，我们不讨论它；而另一类称为“非过失误差”，这在数值计算中往往是无法避免的，这就是我们要研究的。按照它们来源的不同，可分为以下 4 种：

(1)模型误差

将实际问题转化为数学问题，即建立数学模型时，对被描述的实际问题进行了抽象和简化，忽略了一些次要因素，这样建立起来的数学模型其实只是复杂客观现象的一种近似描述，这种数学模型与实际问题之间存在着一定的差别，我们把数学模型与实际问题之间出现的这种不可避免的误差称为**模型误差**。

例如：用

$$s = \frac{1}{2}gt^2$$

描述地球上某一质点自由下落时的规律，就是一个数学模型(g 是重力加速度)。

在建立自由落体运动方程时，忽略了空气阻力等因素，如果用 $f(t)$ 表示真正的运动规律，那么模型误差为：

$$f(t) - \frac{1}{2}gt^2$$

(2)观测误差

在建立数学模型以及数值计算过程中出现的各种物理量，往往是通过实验和观测得到的，由于受到所用观测仪器、设备精度的限制，它们同实际量的大小之间也有误差，这种误差称为**观测误差**。

(3)截断误差

在计算中常常遇到只有通过无限过程才能得到的结果，但实际计算时，只能用有限过程来计算。如无穷级数求和，只能取前面有限项的和来近似代替，于是产生了有限过程代替无限过程的误差，这种误差称为**截断误差**，这是计算方法本身出现的误差，所以也叫方法误差，这种误差是本课程中主要研究的对象。

如指数函数 e^x 有 Taylor 展开式：

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots \qquad (|x| < 1)$$

利用上式可计算积分 $\int_0^1 e^{-x^2}dx$ 得到：

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{2!}\cdot\frac{1}{5} - \frac{1}{3!}\cdot\frac{1}{7} + \frac{1}{4!}\cdot\frac{1}{9} - \cdots$$

显然积分的准确值必须通过无穷步计算得到。实际上，只能截取有限项的代数和来获得近似值。若取前 3 项之和作为近似值，则有：

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \approx 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{2!}\cdot\frac{1}{5} =$$
$$1.0000 - 0.3333 + 0.1000 = 0.7667$$

这里所产生的截断误差：

$$R_4 = -\frac{1}{3!}\cdot\frac{1}{7} + \frac{1}{4!}\cdot\frac{1}{9} - \cdots$$

(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，如$\sqrt{2}$，$\frac{1}{3}$，π 等，但计算时只能对有限位数进行运算，因而往往要进行四舍五入，这样产生的误差称为**舍入误差**。

少量舍入误差是微不足道的，但在电子计算机上完成了千百次运算后，舍入误差的积累有时可能是十分惊人的。

综上所述，数值计算中除了可以完全避免的过失误差外，还存在难以回避的模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差。既然描述问题的方法都是近似的，那么要求解的绝对准确也就没有意义了。因此，我们在计算方法里讨论的解都是近似的；问题是怎样尽量减少误差，提高精度。在 4 种误差来源的分析中，前两种误差是客观存在的，后两种是由计算方法所引起的，本课程所研究的内容只涉及后两种误差。

1.2.2　绝对误差与绝对误差限

设 x^* 是准确值 x 的一个近似值，则 x 与 x^* 的差

$$\varepsilon(x) = x - x^* \tag{1.2.1}$$

称为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。

当 $\varepsilon(x) > 0$ 时，称 x^* 为亏近似值或弱近似值，当 $\varepsilon(x) < 0$ 时，称 x^* 为盈近似值或强近似值。

由于准确的 x 往往是未知的或无法知道的，因此 $\varepsilon(x)$ 的准确值也无法求出，但可以估计出 $\varepsilon(x)$ 的上界，即存在 $\eta > 0$，使

$$|\varepsilon(x)| = |x - x^*| \leqslant \eta \tag{1.2.2}$$

则称 η 为近似值 x^* 的绝对误差限，简称误差限或称精度。它表明准确值 $x \in [x^* - \eta, x^* + \eta]$，应用中也可记作

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

例如

$$\left|\int_0^1 e^{-x^2}dx - 0.7667\right| \leqslant \frac{1}{3!}\cdot\frac{1}{7}$$

因此，$\frac{1}{3!}\cdot\frac{1}{7}$ 是积分$\int_0^1 e^{-x^2}dx$ 的近似值0.7667 的一个误差限。

再如，用毫米刻度的直尺去测量一长度为 x 的物体，测得其长度的近似值为 $x^*=123\text{mm}$，由于直尺以毫米为刻度，所以其误差不超过0.5mm，即

$$|x-123|\leqslant 0.5$$

这样，虽然不能得出准确值 x 的长度是多少，但从这个不等式中可以知道 x 的范围

$$122.5\leqslant x\leqslant 123.5$$

即说明 x 必在[122.5,123.5]毫米区间内。

1.2.3 相对误差与相对误差限

用绝对误差来刻画近似数的精确程度是有局限性的，在很多场合它无法显示出近似值的准确程度，因为它没有反映出它在原数中所占的比例。如有两个量：

$$x=10\pm1,y=1000\pm5$$

即 $x^*=10,\varepsilon(x)=1,y^*=1000,\varepsilon(y)=5$。

虽然 $\varepsilon(y)$ 比 $\varepsilon(x)$ 大5倍，但是若考虑到原数的大小，会看到在1000内差5，显然比10内差1更准确一些，这说明一个近似值的准确程度除了与绝对误差有关外，还与准确值的大小有关，因此，为了较好地反映近似值的精确程度，必须考虑误差与其值的比值，即相对误差。

设 x^* 是 x 的一个近似值，x^* 的绝对误差 $\varepsilon(x)$ 与真值 x 之比，即

$$\varepsilon_r(x)=\frac{\varepsilon(x)}{x}=\frac{x-x^*}{x}\tag{1.2.3}$$

称为近似值 x^* 的相对误差。

在实际应用中，由于真值 x 总是无法知道的，通常取

$$\varepsilon_r(x)\approx\frac{\varepsilon(x)}{x^*}\tag{1.2.4}$$

作为相对误差的另一定义。

由于

$$\frac{x-x^*}{x}-\frac{x-x^*}{x^*}=\frac{-(x-x^*)^2}{x\cdot x^*}=-\frac{[\varepsilon(x)]^2}{x\cdot x^*}=\frac{[\varepsilon_r(x)]^2}{1-\varepsilon_r(x)}$$

所以当 $\varepsilon_r(x)$ 不大时，用(1.2.4)近似表示相对误差所产生的误差可忽略不计。

同绝对误差类似，相对误差也无法准确求出，只能估计它的大小范围，即求相对误差绝对值的上界。

若存在 $\delta>0$，使 $|\varepsilon_r(x)|\leqslant\delta$ 则称 δ 是近似值 x 的相对误差限。

前面提到的 $x=10\pm1$ 和 $y=1000\pm5$，其相对误差限分别是：

$$\varepsilon_r(x)=\frac{1}{10}=10\%,\quad \varepsilon_r(y)=\frac{5}{1000}=0.5\%$$

显然，y 的近似值 y^* 远比 x 的近似值 x^* 准确程度高。

1.2.4 有效数字与误差的关系

对于一个近似值，除了用误差来表示它的准确程度外，我们还希望这个近似值本身就能表示出它的准确程度，于是需要引进有效数字的概念。例如对无穷小数或循环小数，可用四舍五

入的办法来取其近似值。

例如：

$$x = \sqrt{3} = 1.732050808\cdots$$

取 3 位，$x^* = 1.73$　　$\varepsilon(x) < 0.005$

取 5 位，$x^* = 1.7321$　　$\varepsilon(x) < 0.00005$

这种近似值取法的特点是它们的误差都不超过末位数字的半个单位，即

$$\left|\sqrt{3} - 1.73\right| < \frac{1}{2} \times 10^{-2},\quad \left|\sqrt{3} - 1.7321\right| < \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

如果近似值 x^* 的误差限是某位上的半个单位时，称近似值“准确”到这一位，且该位直到 x^* 的第一位非零数字一共有 n 位，则称近似值 x^* 有 n 位有效数字。

引入有效数字概念后，我们规定所写出的数都应该是有效数字，如$\sqrt{3}$的近似值根据需要的不同有效数字位应是 1.73 或 1.732 或 1.7321，不能是 1.7320。同时，在同一问题中，参加运算的数，都应该有相同位数的有效数。

例 1　对下列各数写出具有 5 位有效数字的近似值。

236.478，0.00234711，9.000024，9.000024×10^3

解　上述各数具有 5 位有效数字的近似值分别是

236.48，0.0023471，9.0000，9000.0

注意 9.000024 的 5 位有效数值是 9.0000，而不是 9，因为 9 只有 1 位有效数字。前者精确到 0.0001，而后者仅精确到 1，两者相差是很大的，前者远较后者精确，由此可见，有效数尾部的零不能随意省去，以免损失精度。

一般地，设有一个数 x，其近似值 x^* 的规格化形式为：

$$x^* = \pm 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n \times 10^m \tag{1.2.5}$$

式中：$\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$都是 0，1，2，…，9 中的一个数字，且 $\alpha_1 \neq 0$，n 是正整数，m 是整数。

那么，x^* 的误差限为

$$|\varepsilon(x)| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \tag{1.2.6}$$

称 x^* 具有 n 位有效数字，或称它精确到 10^{m-n}。其中 x^* 的每一位数字 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$都是它的有效数字。(1.2.6)表达了有效数字与其绝对误差限之间的关系。

由此可知，从有效数字可以算出近似数的绝对误差限，有效数字的位数越多，其绝对误差限也就越小。

同样，还可从有效数字求出相对误差限。

由(1.2.5)可知

$$\alpha_1 \times 10^{m-1} \leqslant |x^*| \leqslant (\alpha_1 + 1) \times 10^{m-1}$$

从而

$$|\varepsilon_r(x)| = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leqslant \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{\alpha_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{-n+1} \tag{1.2.7}$$

即相对误差限为：

$$\delta = \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{-n+1} \tag{1.2.8}$$

(1.2.8)表达了有效数字与其相对误差的关系。

以上结论表明,近似值的有效数字及其他的位数可以分别表示出绝对误差限与相对误差限的大小。

反之,若近似值 x 的相对误差限

$$\delta \leqslant \frac{1}{2(\alpha_1+1)} \times 10^{-n+1} \tag{1.2.9}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字。

因为:

$$|x-x^*| \leqslant |x^*|\delta \leqslant (\alpha_1+1)\times 10^{m-1} \times \frac{1}{2(\alpha_1+1)} \times 10^{-n+1} = \frac{1}{2}\times 10^{m-n}$$

所以近似值 x^* 的有效位至少是 n 位有效数字。

例2 为了使$\sqrt{20}$的近似值的相对误差小于0.1%,问$\sqrt{20}$应取几位有效数字?

解 由于$\sqrt{20}=4.4\cdots$,故 $\alpha_1=4$

由(1.2.8)有

$$\delta \leqslant \frac{1}{2\alpha_1}\times 10^{-n+1}$$

即

$$\frac{1}{2\times 4}\times 10^{-n+1} \leqslant 0.1\% = 10^{-3}$$

所以 $n=4$ 即可满足要求。

例3 为了使积分 $I=\int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x$ 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 由前面可知 $I=0.7667$

所以 $\alpha_1=7$, 由(1.2.8)有

$$|\varepsilon_r(I)| \leqslant \frac{1}{2\times 7}\times 10^{-n+1} \leqslant 0.1\%$$

可得 $n\geqslant 3$,即 I^* 只要取三位有效数字

即

$$I^*=0.767$$

就能保证 I^* 的相对误差不超过0.1%。

1.3 误差的传播与估计

数值计算中误差的产生与传播的情况非常复杂,参与运算的数据往往都是些近似数,它们都带有误差。这些数据的误差在多次运算中会进行传播,使计算结果产生一定的误差,这就是误差的传播问题。然而,确定计算结果所能达到的精度显然是十分重要的,在今后各章中都要对计算结果进行估计,但这往往也是件较困难的事。在此介绍用函数的 Taylor 公式来估计误差的方法,这也是最常用的一种方法。

1.3.1 误差的估计公式

Taylor 公式估计误差时,常使用多元函数的 Taylor 公式。这里以二元函数为例,给出误差

估计的一般公式。

对于二元函数

$$y = f(x_1, x_2)$$

设 x_1^* 和 x_2^* 分别是 x_1 和 x_2 的近似值，y^* 是函数值 y 的近似值，且 $y^* = f(x_1^*, x_2^*)$。将 $f(x_1, x_2)$ 在 (x_1^*, x_2^*) 处作泰勒展开，得：

$$f(x_1,x_2) = f(x_1^*,x_2^*) + \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^* \cdot (x_1 - x_1^*) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^* \cdot (x_2 - x_2^*)\right] + \frac{1}{2!}\left[\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}\right)^* \cdot (x_1 - x_1^*)^2 + 2\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}\right)^* \cdot (x_1 - x_1^*)(x_2 - x_2^*) + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}\right)^* \cdot (x_2 - x_2^*)^2\right] + \cdots$$

式中 $x_1 - x_1^* = \varepsilon(x_1)$，$x_2 - x_2^* = \varepsilon(x_2)$ 都是小量值，如忽略高阶小量，即高阶的 $(x_1 - x_1^*)$ 和 $(x_2 - x_2^*)$，则上式可简化为

$$f(x_1,x_2) \approx f(x_1^*,x_2^*) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^* \cdot \varepsilon(x_1) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^* \cdot \varepsilon(x_2)$$

因此，y^* 的绝对误差

$$\varepsilon(y) = y - y^* = f(x_1,x_2) - f(x_1^*,x_2^*) \approx \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^* \cdot \varepsilon(x_1) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^* \cdot \varepsilon(x_2) \tag{1.3.1}$$

式中，$\varepsilon(x_1)$ 和 $\varepsilon(x_2)$ 前面的系数 $\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^*$ 和 $\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^*$ 分别是 x_1^* 和 x_2^* 对 y^* 的绝对误差增长因子，它们分别表示绝对误差 $\varepsilon(x_1)$ 和 $\varepsilon(x_2)$ 经过传播后增大或缩小的倍数。

由(1.3.1)可得出 y^* 的相对误差

$$\varepsilon_r(y) = \frac{\varepsilon(y)}{y^*} \approx \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^* \cdot \frac{\varepsilon(x_1)}{y^*} + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^* \cdot \frac{\varepsilon(x_2)}{y^*} = \frac{x_1^*}{y^*}\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^* \cdot \varepsilon_r(x_1) + \frac{x_2^*}{y^*}\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^* \cdot \varepsilon_r(x_2) \tag{1.3.2}$$

式中，$\varepsilon_r(x_1)$ 和 $\varepsilon_r(x_2)$ 前面的系数

$$\frac{x_1^*}{y^*}\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^* \quad 和 \quad \frac{x_2^*}{y^*}\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^*$$

分别是 x_1^* 和 x_2^* 对 y^* 的相对误差增长因子，它们分别表示相对误差 $\varepsilon_r(x_1)$ 和 $\varepsilon_r(x_2)$ 经过传播后增大或缩小的倍数。

(1.3.1)和(1.3.2)可推广到更为一般的 n 元函数

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

同二元函数类似，将函数 $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 在点 $(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$ 处作泰勒展开，并略去其中的 $\varepsilon(x_1), \varepsilon(x_2), \cdots, \varepsilon(x_n)$ 等小量的高阶项，即可得与(1.3.1)及(1.3.2)所对应的函数的近似值 $y^* = f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$ 的绝对误差和相对误差的估计式分别为

$$\varepsilon(y) \approx \sum_{i=1}^{n}\left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^* \cdot \varepsilon(x_i)\right] \tag{1.3.3}$$

和

$$\varepsilon_r(y) \approx \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{x_i^*}{y^*}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^* \cdot \varepsilon_r(x_i)\right] \tag{1.3.4}$$

上两式中的各项

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^* \quad 和 \quad \frac{x_i^*}{y^*}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^* \quad (i = 1,2,3,\cdots,n)$$

分别为各个 x_i^* $(i=1,2,\cdots,n)$ 对 y^* 的绝对误差和相对误差的增长因子。

例 4 设 $f(x,y)=\frac{\cos y}{x}$, $x=1.30\pm0.005$, $y=0.87\pm0.005$, 如果用 $u=f(1.3,0.871)$ 作为 $f(x,y)$ 的近似值,问 u 能有几位有效数字?

解

$$u = \frac{\cos 0.871}{1.30} \approx 0.49543$$

由于

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{\cos y}{x^2}, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = -\frac{\sin y}{x}$$

$$\varepsilon(u) \approx \left|\frac{\cos 0.871}{1.30}\right| \times 0.005 + \left|\frac{\sin 0.871}{1.30}\right| \times 0.005 \approx$$
$$0.0022 < 0.005$$

所以 u 只能有两位有效数字。

例 5 用电表测得一个电阻两端的电压和流过的电流范围分别为 $V=220\pm2$ V, $I=10\pm0.1$ A,求这个电阻的阻值 R,并估算其绝对误差和相对误差。

解 由欧姆定律有

$$R = \frac{V}{I}$$

则 R 的近似值 R^* 为

$$R = \frac{220}{10}\ \Omega = 22\ \Omega$$

由(1.3.1)可计算 R^* 的绝对误差

$$\varepsilon(R) \approx \left(\frac{\partial R}{\partial V}\right)^* \cdot \varepsilon(V) + \left(\frac{\partial R}{\partial I}\right)^* \cdot \varepsilon(I) =$$
$$\frac{1}{I^*} \cdot \varepsilon(V) - \frac{V^*}{(I^*)^2} \cdot \varepsilon(I)$$

由于 $V^*=220\text{V}$, $|\varepsilon(V)|\leqslant 2\text{V}$, $I^*=10\text{A}$, $|\varepsilon(I)|\leqslant 0.1\text{A}$,代入上式可得 R^* 的绝对误差

$$|\varepsilon(R)| \leqslant \left|\frac{1}{I^*}\right| \cdot |\varepsilon(V)| + \left|\frac{V^*}{(I^*)^2}\right| \cdot |\varepsilon(I)| \leqslant$$
$$\frac{1}{10} \times 2\ \Omega + \frac{220}{10^2} \times 0.1\ \Omega = 0.42\ \Omega$$

R^* 的相对误差为:

$$|\varepsilon_r(R)| = \left|\frac{\varepsilon(R)}{R^*}\right| \leqslant \frac{0.42}{22} = 0.0191 = 1.91\%$$

1.3.2　误差的传播

通过以上分析,我们知道,一个问题的解决,往往要经过多次运算,而参与运算的数据都是带有误差的近似值,每一步运算都可能产生误差,在反复多次计算的过程中,必然会产生误差的传播和积累。显然,当误差积累偏大时,会使计算结果失真,因此,在每一步计算中,都应防止产生误差升级的现象。下面通过误差在算术运算中的传播规律的分析,提出一些应该注意的事项。

(1) 和的误差

设

$$f(x_1,x_2,\cdots,x_n) = \sum_{i=1}^{n} x_i$$

由 (1.3.3) 及(1.3.4)有

$$\varepsilon\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) \approx \sum_{i=1}^{n} \varepsilon(x_i) \tag{1.3.5}$$

及

$$\varepsilon_r\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) \approx \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i^*}{\sum_{i=1}^{n} x_i^*} \varepsilon_r(x_i) \tag{1.3.6}$$

由(1.3.5)可知,近似值之和的绝对误差,等于各近似值的绝对误差原代数和。可见初始数据的误差对求和运算结果的影响不大。

(2) 差的误差

设$f(x_1,x_2) = x_1 - x_2$,由(1.3.6)有

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

即

$$|\varepsilon_r(x_1 - x_2)| \leqslant \left|\frac{x_1^*}{x_1^* - x_2^*}\right| |\varepsilon_r(x_1)| + \left|\frac{x_2^*}{x_1^* - x_2^*}\right| |\varepsilon_r(x_2)|$$

当 $x_1^* \approx x_2^*$,即 x_1^* 与 x_2^* 大小接近,符号相同时,由上式可知,这时$|\varepsilon_r(x_1 - x_2)|$可能会很大,说明初始数据误差对计算结果产生很大影响,计算结果的有效数字将严重丢失,计算精度降低。因此在计算中,应尽量设法避免两相近数相减。当你估计会遇到这种情形时,就在取原始数据时多保留几位有效数字,或把算式变形,用等价的算式代替原算式后再计算。

例 6　设$\sqrt{2.01}$,$\sqrt{2}$都是准确数,计算

$$u = \sqrt{2.01} - \sqrt{2}$$

使其具有 3 位有效数字。

解　$\sqrt{2.01} = 1.4177446\cdots$

$\sqrt{2} = 1.4142135\cdots$

故$\sqrt{2.01}$ 及$\sqrt{2}$的近似值均应取 6 位有效数字才可得到

$$u = 1.41774 - 1.41421 = 3.53 \times 10^{-3}$$

才能得到具有 3 位有效数字的要求。如将算式变形,则得

$$u = \sqrt{2.01} - \sqrt{2} = \frac{0.01}{\sqrt{2.01} + \sqrt{2}} = \frac{0.01}{1.42 + 1.41} = \frac{0.01}{2.83} = 3.53 \times 10^{-3}$$

也能达到结果具有 3 位有效数字的要求,而这时 2.01 和 2 所需的有效数字只要 3 位,远比直接相减所需有效位数少。

(3)积的误差

$$f(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \prod_{i=1}^{n} x_i$$

由(1.3.3)及(1.3.4)有

$$\varepsilon\left(\prod_{i=1}^{n} x_i\right) \approx \sum_{i=1}^{n}\left[\left(\prod_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} x_j^*\right)\varepsilon(x_i)\right] \tag{1.3.7}$$

和

$$\varepsilon_r\left(\prod_{i=1}^{n} x_i\right) \approx \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_r(x_i) \tag{1.3.8}$$

由(1.3.8)可知,近似值之积的相对误差等于相乘各因子的相对误差的代数和。

由(1.3.7)可知,当乘数 x_i^* 的绝对值很大时,乘积的绝对误差可能会很大,因此,也应设法避免绝对值较大的数相乘。

(4)商的误差

设

$$f(x_1, x_2) = \frac{x_1}{x_2}$$

由(1.3.3)及(1.3.4)有

$$\varepsilon_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \frac{1}{x_2^*}\varepsilon(x_1) - \frac{x_1^*}{(x_2^*)^2}\varepsilon(x_2) = \frac{x_1^*}{x_2^*}\left[\varepsilon_r(x_2) - \varepsilon_r(x_2)\right] \tag{1.3.9}$$

和

$$\varepsilon_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \varepsilon_r(x_1) - \varepsilon_r(x_2) \tag{1.3.10}$$

由(1.3.10)可知,两近似值之商的相对误差等于被除数的相对误差与除数的相对误差之差。

由(1.3.9)可知,当除数 x_2^* 的绝对值很小时,商的绝对误差可能会很大,甚至造成计算机的“溢出”错误,故应设法避免让绝对值小的数作除数。

(5)乘方及开方运算的误差

设 $f(x) = x^p$

由(1.3.3)及(1.3.4)有

$$\varepsilon(x^p) = p(x^*)^{p-1}\varepsilon(x) \tag{1.3.11}$$

及

$$\varepsilon_r(x^p) = p\varepsilon_r(x) \tag{1.3.12}$$

由(1.3.12)可知,乘方运算将使结果的相对误差增大为原值的相对误差的 p 倍,而开方运算则使结果的相对误差缩小为原值相对误差的 $1/q$(q 为开方的方次),精度得到提高。因此,在实际计算中,要尽量避免较大的乘方运算。

综上所述,可知初始数据误差对计算结果的影响情况,而误差增长因子能反映出计算结果的误差对原始数据误差的增长(或缩减)倍数,同时还能反映出一个很重要的数学问题,即当初始数据有微小变化时,计算结果的敏感程度。当初始数据有微小变化,而计算结果对之不敏感,即变化很小时,就说该数学问题是良态的。若计算结果对之很敏感,即变化很大时,就说这问题是病态问题。一个数学问题的敏感程度就是它的性态。

例 7　设 $f(x)=x^2-x-10100$,求 $f(99)$ 的相对误差,并讨论 $x=99$ 附近 $f(x)$ 的性态,其中 99 的相对误差为 1%。

解　由(1.3.4)知

$$\varepsilon_r(f) = f'(99)\times\frac{-99}{200}\times 1\% =$$

$$197\times\frac{-99}{200}\times 1\% \approx -99\%$$

即函数值的相对误差是初始数据相对误差的 99 倍。

其次,由于 $f(99)=-200$,$f(99.9)=-20.09$,所以 $f(99)\approx 20f(99.9)$,即 99 与 99.9 仅有 10% 的相差,但其对应的函数值都相差 20 倍,故 $f(x)$ 在 99 附近是病态的。

1.4　算法的数值稳定性分析

在用计算机解一个数学问题时,首先要考虑问题本身是否良态,然后构造(或选择)一个稳定的方法,只有用稳定的方法去解良态问题,才能获得满意的结果。通过前面对误差传播规律的分析可知,同一问题当选用不同的方法时,它们所得到的结果有时会相差很大,这主要是因为舍入误差在运算过程中传播的影响,这种影响常随算法而异。如果对于一个数值解法,计算结果受这种传播误差的影响很小,就说此算法是数值稳定的。反之,就说此算法是数值不稳定的。特别是用计算机解题时,运算次数成千上万,这种传播误差如果积累起来是相当可观的,甚至会使一个问题的解成为荒谬的,尤其是病态问题,舍入误差对其计算结果的影响往往是非常严重的。

下面通过其他一些例子来进一步说明算法稳定性的概念。

例 8　建立积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x \qquad (n=0,1,2,\cdots,20)$$

的递推关系式,并研究它的算法稳定性。

解　由