

 普通高等教育计算机规划教材

计算方法

孙俊逸 朱永松 主编



提供电子教案

下载网址 <http://www.cmpedu.com>



机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS



普通高等教育计算机规划教材

计 算 方 法

孙俊逸 朱永松 主编



机械工业出版社

本书共分 7 章, 分别介绍了数值计算方法与误差分析、非线性方程组的数值解法、线性方程组的数值解法、函数插值与曲线拟合、数值积分与数值微分、常微分方程初值问题的数值解法、矩阵特征值与特征向量数值解法等经典内容。在每章的后面分别介绍如何利用数学软件 MATLAB 求解相应的数学问题和应用实例, 方便学生上机实践和教师上机指导。

本书适合作为普通本科院校计算机、信息与计算科学、应用数学等专业及工科硕士研究生计算方法课程的教材, 也可供从事科学与工程计算工作者参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

计算方法 / 孙俊逸, 朱永松主编. —北京: 机械工业出版社, 2011.1

普通高等教育计算机规划教材

ISBN 978-7-111-32399-0

I. ①计… II. ①孙… ②朱… III. ①计算方法-高等学校-教材
IV. ①0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 213286 号

机械工业出版社 (北京市百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

责任编辑: 张宝珠

责任印制: 杨 曦

保定市中画美凯印刷有限公司印刷

2011 年 2 月第 1 版 · 第 1 次印刷

184mm×260mm · 15.5 印张 · 379 千字

0001—3000 册

标准书号: ISBN 978-7-111-32399-0

定价: 28.00 元

凡购本书, 如有缺页、倒页、脱页, 由本社发行部调换

电话服务

网络服务

社服务中心: (010) 88361066

门户网: <http://www.cmpbook.com>

销售一部: (010) 68326294

教材网: <http://www.cmpedu.com>

销售二部: (010) 88379649

读者服务部: (010) 68993821

封面无防伪标均为盗版

出版说明

信息技术是当今世界发展最快、渗透性最强、应用最广的关键技术，是推动经济增长和知识传播的重要引擎。在我国，随着国家信息化发展战略的贯彻实施，信息化建设已进入了全方位、多层次推进应用的新阶段。现在，掌握计算机技术已成为 21 世纪人才应具备的基础素质之一。

为了进一步推动计算机技术的发展，满足计算机学科教育的需求，机械工业出版社聘请了全国多所高等院校的一线教师，进行了充分的调研和讨论，针对计算机相关课程的特点，总结教学中的实践经验，组织出版了这套“普通高等教育计算机规划教材”。

本套教材具有以下特点：

- (1) 反映计算机技术领域的新发展和新应用。
- (2) 注重立体化教材的建设，多数教材配有电子教案、习题与上机指导或多媒体光盘等。
- (3) 针对多数学生的学习特点，采用通俗易懂的方法讲解知识，逻辑性强、层次分明、叙述准确而精炼、图文并茂，使学生可以快速掌握，学以致用。
- (4) 符合高等院校各专业人才的培养目标及课程体系的设置，注重培养学生的应用能力，强调知识、能力与素质的综合训练。
- (5) 适合各类高等院校、高等职业学校及相关院校的教学，也可作为各类培训班和自学用书。

机械工业出版社

前 言

计算方法(又称数值分析)是一门与计算机紧密结合的课程,其任务是在数学理论的基础上研究工程技术中数学问题的数值解法。随着计算机技术的快速发展和计算机应用的普及,熟练地运用计算机进行科学计算已成为许多领域研究人员必备的素质和技能。

为了更好地适应普通本科高校计算机、电子信息、机电类本科学生及工科专业硕士学习“计算方法”课程的需要,我们尝试在传统的“计算方法”教材数学知识的基础上添加数值计算软件 MATLAB 在计算方法中的应用以及各类数值方法的应用实例,以便学生真正体验理论与实践的结合,学以致用。

本书内容共分 7 章,分别介绍了数值计算方法与误差分析、非线性方程组的数值解法、线性方程组的数值解法、函数的插值与曲线拟合、数值积分与数值微分、常微分方程初值问题的数值解法、矩阵的特征值与特征向量等经典内容。在各章的后面分别介绍如何利用 MATLAB 求解相应的数学问题以及应用实例,附录部分列有部分习题答案、相关的定理及数值计算软件 MATLAB 简介。

本书具有如下特点:

(1) 注重训练实践能力。将数学建模与数学实验的思想与方法融入课程的教学,提炼出一些经典的数学建模教学案例,使学生能充分体会与掌握数学应用与应用数学的能力,培养学生的创新思维与创新能力。

(2) 突出实用性。讲述传统的数学内容和方法时,在适度把握数学严谨性的前提下,略去部分定理的烦琐证明,注重引导学生运用数学工具、数学手段和方法解决实际问题。

(3) 强化应用性。通过每章中列举的数学软件的应用及应用实例,力求做到数学知识与现代数值计算软件 MATLAB 应用的结合,提高学生的学习兴趣和实际应用水平。

参加本书编写的有孙俊逸、朱永松、许松林、黄毅、周宁琳,全书由孙俊逸、朱永松修改并统稿。

在本书的编写过程中,得到了湖北工业大学计算机学院、理学院领导和相关老师的大力支持和帮助,在此表示衷心的感谢。

虽然本书的作者都有多年从事“计算方法”教学和实践的经验,但受水平限制,书中可能存在疏漏和不妥之处,敬请广大同行专家、读者提出宝贵的意见和建议,以便再版时订正。

编 者

目 录

出版说明

前言

第 1 章 数值计算方法与误差分析	1
1.1 数值计算方法	1
1.2 误差的来源与误差分析的重要性	2
1.3 近似数的误差表示法	3
1.3.1 绝对误差与相对误差	3
1.3.2 舍入误差与有效数字	4
1.4 数值运算误差分析	5
1.5 数值计算中的一些基本原则	6
1.5.1 算法的数值稳定性	6
1.5.2 避免误差危害的若干原则	7
1.6 数学软件	9
1.7 应用实例: 计算圆周率 π 的算法	10
1.8 习题	12
第 2 章 非线性方程的数值解法	14
2.1 二分法	14
2.2 迭代法及其收敛性	15
2.2.1 不动点迭代法	16
2.2.2 不动点迭代法的全局收敛	17
2.2.3 局部收敛性与收敛阶	19
2.2.4 不动点迭代法的加速	20
2.3 Newton 迭代法	21
2.3.1 Newton 迭代格式	21
2.3.2 Newton 迭代法的收敛性	23
2.3.3 Newton 迭代法的变形	26
2.4 利用数学软件求解非线性方程	29
2.4.1 MATLAB 相关函数介绍	29
2.4.2 MATLAB 直接求解非线性方程	29
2.4.3 MATLAB 编程求解非线性方程	30
2.5 应用实例: 混沌 (Chaos) 问题	34
2.6 习题	38
第 3 章 线性方程组的数值解法	41
3.1 消元法	41

3.1.1	Gauss 消元法	41
3.1.2	列主元 Gauss 消元法	43
3.1.3	Gauss-Jordan 消元法	45
3.2	矩阵三角分解法	46
3.2.1	矩阵的三角分解	46
3.2.2	解线性方程组的三角分解	51
3.2.3	平方根法	53
3.2.4	追赶法	55
3.3	向量与矩阵的范数	57
3.3.1	向量范数	58
3.3.2	矩阵范数	59
3.4	消元法的误差分析	61
3.5	迭代法	64
3.5.1	Jacobi 迭代	65
3.5.2	Gauss-Seidel 迭代	67
3.5.3	超松弛 (SOR) 迭代	68
3.6	迭代法的收敛性	70
3.7	利用数学软件求解线性方程组	73
3.7.1	利用 MATLAB 命令直接求解	73
3.7.2	利用 MATLAB 编程求解	74
3.8	应用实例——投入产出分析	79
3.9	习题	84
第 4 章	函数的插值与曲线拟合	88
4.1	引言	88
4.1.1	插值问题与插值多项式	88
4.1.2	插值多项式的存在唯一性	89
4.2	Lagrange 插值	89
4.2.1	线性插值	89
4.2.2	抛物线插值	90
4.2.3	Lagrange 插值多项式	91
4.2.4	插值余项	92
4.3	均差与 Newton 插值	95
4.3.1	均差及其性质	95
4.3.2	Newton 插值公式	96
4.4	等距节点插值	97
4.4.1	差分	97
4.4.2	等距节点 Newton 插值公式	98
4.5	Hermite 插值	99
4.6	分段插值	101

4.6.1	高次多项式插值的 Runge 现象	101
4.6.2	分段线性插值	102
4.6.3	分段三次 Hermite 插值	103
4.7	样条插值	103
4.7.1	三次样条函数	103
4.7.2	样条插值函数的建立	104
4.7.3	三次样条插值收敛性	106
4.8	曲线拟合的最小二乘法	106
4.9	利用数学软件求解插值与拟合问题	108
4.9.1	MATLAB 相关函数介绍	108
4.9.2	用 MATLAB 直接求解插值及拟合问题	108
4.9.3	Lagrange 插值的 MATLAB 程序	109
4.9.4	Newton 插值的 MATLAB 程序	110
4.9.5	等距节点 Newton 插值的 MATLAB 程序	110
4.10	应用实例: 给药方案设计	111
4.11	习题	113
第 5 章	数值积分与数值微分	115
5.1	数值积分概述	115
5.1.1	数值积分的基本思想	115
5.1.2	代数精度	116
5.1.3	插值型求积公式	117
5.2	Newton-Cotes 公式	119
5.2.1	公式的导出	119
5.2.2	代数精度	121
5.2.3	低阶求积公式的余项	121
5.2.4	复化求积法及其收敛性	122
5.3	变步长求积和 Romberg 算法	124
5.3.1	变步长梯形求积法	124
5.3.2	外推法与 Romberg 算法	125
5.4	Gauss 型求积公式	127
5.4.1	概述	127
5.4.2	Gauss-Legendre 求积公式	128
5.4.3	Gauss 型求积公式的稳定性	130
5.5	数值微分	130
5.5.1	机械求导法	130
5.5.2	插值型求导公式	131
5.6	利用数学软件求解数值积分与数值微分	133
5.6.1	数值积分	133
5.6.2	数值微分	134

5.7	应用实例——计算定积分的 Monte Carlo 方法	135
5.8	习题	137
第 6 章	常微分方程初值问题的数值解法	139
6.1	Euler 法与改进的 Euler 法	140
6.1.1	Euler 法	140
6.1.2	改进的 Euler 法	142
6.2	Runge-Kutta 法	145
6.2.1	Runge-Kutta 方法的基本思想	145
6.2.2	二阶 Runge-Kutta 方法	146
6.2.3	三阶与四阶 Runge-Kutta 方法	147
6.3	单步法的收敛性和稳定性	150
6.3.1	单步法的收敛性	150
6.3.2	单步法的稳定性	152
6.4	线性多步法	153
6.4.1	Adams 显式法与 Adams 隐式法	154
6.4.2	Milne 方法	157
6.4.3	Hamming 方法	158
6.5	方程组与高阶方程的数值解法	159
6.5.1	一阶常微分方程组的数值解法	159
6.5.2	高阶微分方程的初值问题	161
6.6	利用数学软件求解常微分方程	161
6.6.1	利用 MATLAB 命令直接求解	161
6.6.2	利用 MATLAB 编程求解	164
6.7	应用实例: 导弹追击问题	167
6.8	习题	172
第 7 章	矩阵的特征值与特征向量	174
7.1	引言	174
7.2	幂法与反幂法	175
7.2.1	幂法	175
7.2.2	反幂法	180
7.3	Jacobi 方法	182
7.4	QR 方法	184
7.5	利用数学软件求解矩阵的特征值与特征向量	186
7.6	应用实例: 主成分分析方法的应用	188
7.7	习题	190
附录		193
附录 A	部分习题答案	193
附录 B	MATLAB 软件简介	203
参考文献		237

第1章 数值计算方法与误差分析

1.1 数值计算方法

现代科学技术发展十分迅速，它们有一个共同的特点，就是都存在大量的数据计算问题。计算问题可以说是现代社会工业、农业、交通运输、医疗卫生、文化教育等各个领域普遍存在的共同问题。研究计算问题的解决方法和有关数学理论问题的一门学科就叫做计算数学。计算数学主要研究有关数学和逻辑问题怎样由计算机加以有效解决。

数值计算方法简称计算方法，又称“数值分析”，是计算数学的一个主要部分。它研究用计算机求解数学问题的数值计算方法及其软件实现，是数学科学的一个分支。计算数学几乎与数学科学的一切分支有联系，它利用数学领域的成果发展了新的更有效的算法及其理论，反过来，很多数学分支都需要探讨和研究适用于计算机的数值方法。

运用计算机求解实际问题通常需要经历以下步骤：

- ① 根据实际问题建立数学模型（建立数学模型）。
- ② 由所建立的数学模型给出相应的数值计算方法（给出计算方法）。
- ③ 根据计算方法编制算法程序，然后在计算机上计算出结果，并对结果进行分析（程序设计及结果分析）。

其中，第一步通常是应用数学的任务，而第二步及第三步就是计算数学的任务，也就是计算方法所研究的对象，它涉及数学的各个分支，内容十分广泛。但本书作为“计算方法”基础，只介绍科学与工程计算中最常用的基本数值方法，包括线性方程组与非线性方程求根、插值与最小二乘拟合、数值积分及常微分方程数值解法等。这些都是计算数学中最基础的内容。

计算数学与计算工具的发展密切相关，在计算机出现以前，数值计算方法只能计算规模小的问题，并且也没形成单独的学科，只有在计算机出现以后，数值计算才得以迅速发展并成为数学科学中一个独立学科——计算数学。当代计算能力的大幅度提高，既来自计算机的进步，也来自计算方法的进步，计算机与计算方法的发展是相辅相成、互相促进的。计算方法的发展启发了新的计算机体系结构，而计算机的更新换代也对计算方法提出了新的标准和要求。例如，为在计算机上求解大规模的计算问题、提高计算效率，诞生并发展了并行计算机。自计算机诞生以来，经典的计算方法业已经历了一个重新评价、筛选、改造和创新的过程，与此同时，涌现了许多新概念、新课题和能充分发挥计算机潜力、有更大解题能力的新方法，这就构成了现代意义下的计算数学。这也是数值分析的研究对象与特点。

由于计算机的发展及其在科学技术领域的应用推广与深化，新的计算性学科分支纷纷兴起，如计算力学、计算物理、计算化学、计算经济学等。不论其背景与含义如何，要用计算机进行科学计算都必须建立相应的数学模型，并研究其适合于计算机编程的计算方法。因此，计算数学是各种计算性科学的纽带和共性基础，是一门兼有基础性、应用性和边缘性的数学学科。

概括地说, 计算方法是研究适合于在计算机上使用的实际可行、理论可靠、计算复杂性好的数值计算方法, 具体说就是:

第一, 面向计算机。要根据计算机特点提供实际可行的算法, 即算法只能由计算机可执行的加、减、乘、除四则运算和各种逻辑运算组成。

第二, 要有可靠的理论分析。数值分析中的算法理论主要是连续系统的离散化及离散型方程数值求解。对近似算法要保证收敛性和数值稳定性, 而这些都建立在相应的数学理论的基础上。

有关基本概念包括误差、稳定性、收敛性、计算量、存储量等, 这些概念是刻画计算方法的可靠性、准确性、效率以及使用的方便性。

第三, 要有良好的计算复杂性。计算复杂性包括时间复杂性(指计算时间多少)和空间复杂性(指占用存储单元多少)。时间复杂性好是指节省计算时间; 空间复杂性好是指节省存储空间。这些也是建立算法要考虑的问题, 它关系到算法能否在计算机上实现。

第四, 要有数值试验。任何一个算法只有通过数值试验来证明是行之有效的。

根据“计算方法”课程的特点, 学习该课程时, 首先要先复习微积分、线性代数与常微分方程的基础知识等相关的数学知识, 并具有一定的计算机编程能力; 其次, 在学习各章时, 要注意每章要解决什么问题, 是如何解决的, 以及各种方法的思想及其数学原理, 注重基本概念及基本方法, 不要死记硬背; 最后还要做一定数量的理论分析与计算练习。树立信心, 克服“怕”的思想, 就一定能够学好这门课程。

1.2 误差的来源与误差分析的重要性

用计算机求解科学计算问题, 首先要建立数学模型, 它是对被描述的实际问题进行抽象、简化而得到的, 因而会产生误差。将数学模型与实际问题之间出现的这种误差称为模型误差。由于模型误差难以用数量表示, 通常都假定数学模型是合理的, 这种误差可忽略不计, 在计算方法中不予讨论。在数学模型中往往还有一些根据观测得到的物理量, 如温度、重量、长度等, 显然也会产生误差, 这种误差称为观测误差, 在计算方法中也不予讨论。计算方法只研究数值求解数学问题时产生的误差, 它们主要有以下三类。

(1) 截断误差或方法误差

截断误差是指将数学问题转化为数值计算问题时产生的误差, 通常是用有限过程近似无限过程时产生的误差。例如, 可微函数 $f(x)$ 用泰勒 (Taylor) 多项式

$$P_n(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n$$

近似代替时, 其截断误差为

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1}, \quad \xi \text{ 在 } 0 \text{ 与 } x \text{ 之间}$$

截断误差将结合有关数值方法进行讨论, 数值方法的误差估计指的就是这类误差。

(2) 舍入误差

数值计算时由于计算是有限位的, 所以原始数据、中间结果和最后结果都要舍入, 这就产生舍入误差。在十进制运算中一般采用四舍五入。如 $\frac{1}{3}$ 写成 0.3333, $\pi \approx 3.1416$, 等等, 都

有舍入误差。

(3) 输入数据误差

输入数据误差称为初始误差，这些误差对计算也将造成影响，但分析初始误差与对舍入误差分析相似，因此可将它归入舍入误差。

研究计算结果的误差是否满足精度要求就是误差估计问题。本书主要讨论算法的截断误差与舍入误差。截断误差一般结合具体算法讨论，而由于对大规模数值计算问题的舍入误差目前尚无有效方法进行定量估计，所以主要进行定性分析，但对误差估计的基本概念及较简单的数值运算误差估计还需作简单介绍。

1.3 近似数的误差表示法

1.3.1 绝对误差与相对误差

定义 1-1 设准确值 x 的近似值为 x^* ，称 $e = x^* - x$ 为近似值的绝对误差，简称误差，而近似值的误差 e 与准确值 x 的比值

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

称为近似值 x^* 的相对误差，记为 e_r 。

绝对误差可正可负。在实际计算中，由于真值 x 总是不知道的，所以 e 的准确值很难求出，往往只能求 $|e|$ 的一个上界 ε ，即 $|e| = |x^* - x| \leq \varepsilon$ ，称为 x^* 的绝对误差限，简称误差限，它总是正数。相对误差 e_r 当 $x=0$ 时没有意义，且准确值 x 往往未知，通常取

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

作为 x^* 的相对误差。

相对误差也可正可负，它的绝对值上限叫做相对误差限，记作 ε_r ，即 $\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|x^*|}$ 。

例 1-1 已知 $\pi=3.1415926\cdots$ ，若取近似数为 $x^*=3.14$ ，则误差

$$e = x^* - \pi = -0.0015926\cdots$$

其绝对值的上限

$$|e| \leq 0.002 = \varepsilon$$

为 x^* 的误差限，而相对误差限为

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|x^*|} < 0.7\%$$

通常在 x 有多位数字时，若取前有限位数的数字作近似值，都采用四舍五入原则。例如 $x=\pi$ ，取 3 位， $x^*=3.14$ ， $\varepsilon \leq 0.002$ ；取 5 位， $x^*=3.1416$ ， $\varepsilon \leq 0.00001$ 。它们的误差限都不超过近似数 x^* 末位数的半个单位，即

$$|\pi - 3.14| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}, \quad |\pi - 3.1416| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

1.3.2 舍入误差与有效数字

定义 1-2 设 x^* 是 x 的一个近似数, 可表示为

$$x^* = \pm 10^m \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n \quad (1-1)$$

其中, $a_i (i=1, 2, \dots, n)$ 为 $0 \sim 9$ 中的一个数字, $a_1 \neq 0$, m 为整数, 如果

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

则称近似值 x^* 近似具有 n 位有效数字或称 x 精确到 10^{m-n} 位。

例如, 用 3.14 近似 π 有 3 位有效数字, 用 3.1416 近似 π 有 5 位有效数字。

显然, 近似数的有效位数越多, 相对误差限就越小, 反之也对。

定理 1-1 设 x 的近似数 x^* 表示为 $x^* = \pm 10^m \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n$, 如果 x^* 具有 n 位有效数字, 则其相对误差限

$$\varepsilon_r \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} \quad (1-3)$$

反之, 若 x^* 的相对误差限 $\varepsilon_r \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$, 则 x^* 至少具有 n 位有效数字。

证明 显然

$$a_1 \times 10^{m-1} < |x^*| = 10^m \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n < (a_1 + 1) \times 10^{m-1}$$

由 x^* 具有 n 位有效数字知

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

所以

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

反之, 由

$$|x^* - x| = |x^*| \varepsilon_r < (a_1 + 1) \times 10^{m-1} \times \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

故 x^* 至少具有 n 位有效数字。证毕。

例 1-2 下列近似数有几位有效数字? 其相对误差限是多少?

(1) $x = e \approx 2.71828 = x^*$;

(2) $x = 0.040032 \approx 0.0400 = x^*$ 。

解 (1) 由 $|e - 2.71828| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-5}$, 故 x^* 有 6 位有效数字。

又因 $a_1 = 2$, 所以相对误差限 $\varepsilon_r \leq \frac{1}{4} \times 10^{-5}$ 。

(2) 由 $|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$, 故 x^* 有 3 位有效数字。

又因 $a_1 = 4$, 所以相对误差限 $\varepsilon_r \leq \frac{1}{8} \times 10^{-2}$ 。

1.4 数值运算误差分析

设两个近似数 x_1^* 与 x_2^* 的误差限分别为 $\varepsilon(x_1^*)$ 及 $\varepsilon(x_2^*)$ ，则它们进行和、差、积、商运算得到的误差限满足

$$\begin{aligned}\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) &\leq \varepsilon(x_1^*) \pm \varepsilon(x_2^*) \\ \varepsilon(x_1^* x_2^*) &\leq |x_1^*| \varepsilon(x_2^*) + |x_2^*| \varepsilon(x_1^*) \\ \varepsilon\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) &\leq \frac{|x_1^*| \varepsilon(x_2^*) + |x_2^*| \varepsilon(x_1^*)}{|x_2^*|^2}, \quad x_2^* \neq 0\end{aligned}$$

更一般的情况是，当自变量有误差时计算函数值也产生误差，其误差限可利用函数的 Taylor 展开式进行估计。设一元函数 $f(x)$ 具有二阶导数，自变量 x 的一个近似值为 x^* ， $f(x)$ 的近似值为 $f(x^*)$ ，其误差限记作 $\varepsilon(f(x^*))$ 。用 $f(x)$ 在 x^* 点的 Taylor 展开估计误差，可得

$$f(x) - f(x^*) = f'(x^*)(x - x^*) + \frac{f''(\xi)}{2}(x - x^*)^2, \quad \xi \text{ 在 } x \text{ 与 } x^* \text{ 之间}$$

取绝对值得

$$|f(x) - f(x^*)| \leq |f'(x^*)| \varepsilon(x^*) + \frac{|f''(\xi)|}{2} \varepsilon^2(x^*)$$

如果 $f'(x^*)$ 与 $f''(x^*)$ 的比值不是很大，则可忽略 $\varepsilon(x^*)$ 的高阶项，于是可得计算函数的误差限及相对误差限

$$\begin{aligned}\varepsilon(f(x^*)) &\approx |f'(x^*)| \varepsilon(x^*) \\ \varepsilon_r(f(x^*)) &\approx \left| \frac{f'(x^*)}{f(x^*)} \right| \varepsilon(x^*)\end{aligned}$$

如果 f 为多元函数，例如计算 $A = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ ，自变量 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的近似值为 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$ ， A 近似值 $A^* = f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ 。由多元函数的 Taylor 展开，可得

$$\begin{aligned}e(A^*) &= A^* - A = f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) - f(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ &\approx \sum_{k=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_k} (x_k^* - x_k) = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* e_k\end{aligned}$$

于是误差限

$$\varepsilon(A^*) \approx \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \varepsilon_k(x_k^*) \quad (1-4)$$

及相对误差限

$$\varepsilon_r = \varepsilon_r(A^*) = \frac{\varepsilon(A^*)}{|A^*|} \approx \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \frac{\varepsilon_k(x_k^*)}{|A^*|} \quad (1-5)$$

例 1-3 得某场地长 l 的值为 $l^* = 110\text{m}$ ，宽 d 的值为 $d^* = 80\text{m}$ ，已知 $|l^* - l| \leq 0.2\text{m}$ ， $|d^* - d| \leq 0.1\text{m}$ ，试求面积 $S = ld$ 的绝对误差限与相对误差限。

解 因 $S = ld$, $\frac{\partial S}{\partial l} = d$, $\frac{\partial S}{\partial d} = l$, 由式 (1-4) 知

$$\varepsilon(S^*) \approx \left| \left(\frac{\partial S}{\partial l} \right)^* \right| \varepsilon(l^*) + \left| \left(\frac{\partial S}{\partial d} \right)^* \right| \varepsilon(d^*)$$

其中, $\left(\frac{\partial S}{\partial l} \right)^* = d^* = 80\text{m}$, $\left(\frac{\partial S}{\partial d} \right)^* = l^* = 110\text{m}$, 从而有

$$\varepsilon(S^*) \approx 80\text{m} \times 0.2 + 110\text{m} \times 0.1 = 27\text{m}^2$$

相对误差限为

$$\varepsilon_r = \varepsilon_r(S^*) = \frac{\varepsilon(S^*)}{|S^*|} \approx \frac{27}{110 \times 80} = 0.31\%$$

1.5 数值计算中的一些基本原则

上面给出的误差估计方法只对运算量很少的情形适用, 对大规模数值计算的舍入误差估计目前尚无有效的方法做出定量估计。为了确保数值计算结果的正确性, 应对数值计算问题进行定性分析, 以保证其舍入误差不会影响计算的精度。本节主要讨论算法的数值稳定性以及数值计算中的一些基本原则。

1.5.1 算法的数值稳定性

用一个数值方法进行计算时, 由于原始数据有误差, 在计算中这些误差会传播, 有时误差增长很快使计算结果误差很大, 影响到结果不可靠。

定义 1-3 一个算法如果原始数据有扰动(即误差), 而在计算过程中舍入误差不增长, 则称此算法是数值稳定的; 否则称此算法是不稳定的。

例 1-4 计算积分 $I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx (n=0,1,\dots)$, 并估计误差。

解 由分部积分法得递推公式

$$\begin{cases} I_n = 1 - nI_{n-1}, & n=0,1,\dots \\ I_0 = \int_0^1 e^{-1} dx = 1 - e^{-1} \end{cases} \quad (1-6)$$

若计算 I_0 时取 $e^{-1} \approx 0.3969$, 其截断误差 $|e^{-1} - 0.3969| < \frac{1}{2} \times 10^{-4}$, 由式 (1-6) 依次计算 $I_1, I_2, \dots, I_9$ 。计算过程中小数点后第 5 位的数字按四舍五入原则舍入, 由此产生的舍入误差这里先不讨论。当初值取 $I_0 \approx 0.6321 = \tilde{I}_0$ 时, 用式 (1-6) 递推的计算公式为

$$(A) \quad \begin{cases} \tilde{I}_0 = 0.6321 \\ \tilde{I}_n = 1 - n\tilde{I}_{n-1}, & n=1,2,\dots \end{cases} \quad (1-7)$$

计算结果见表 1-1 中的用方法 A 所计算的列。

表 1-1 两种方法计算积分的结果

n	$\tilde{I}_n$ (用方法 A)	$\tilde{I}_n$ (用方法 B)	n	$\tilde{I}_n$ (用方法 A)	$\tilde{I}_n$ (用方法 B)
0	0.6321	0.6321	5	0.148	0.1455
1	0.3679	0.3679	6	0.112	0.1268
2	0.2642	0.2642	7	0.216	0.1121
3	0.2074	0.2073	8	-0.728	0.1035
4	0.1704	0.1709	9	7.552	0.0684

从表 1-1 中看到 $\tilde{I}_8$ 出现负值, 这与 $I_n > 0$ 矛盾。实际上, 各步计算的误差 $E_n = I_n - \tilde{I}_n$ 满足

$$E_n = I_n - \tilde{I}_n = -(I_{n-1} - \tilde{I}_{n-1}) = \cdots = (-1)^n n! E_0$$

当 n 增大时, E_n 是递增的, 到计算 I_9 时的误差已达到 $-9!E_0$, 是严重失真的。它表明式 (1-7) 给出的算法是不稳定的。

现在换一种计算方案。由定积分性质可估值得

$$\frac{e^{-1}}{n+1} = \min_{0 \leq x \leq 1} e^{x-1} \int_0^1 x^n dx < I_n < \max_{0 \leq x \leq 1} e^{x-1} \int_0^1 x^n dx = \frac{1}{n+1}$$

取 $n=9$, 得到

$$\frac{e^{-1}}{10} < I_9 < \frac{1}{10},$$

粗略取 $I_9 \approx \frac{1}{2} \left(\frac{e^{-1}}{10} + \frac{1}{10} \right) = 0.0684 = I_9$, 然后将式 (1-6) 倒过来计算, 即

$$B \quad \begin{cases} \tilde{I}_9 = 0.0684 \\ \tilde{I}_{n-1} = \frac{1}{n}(1 - \tilde{I}_n), \quad n=9, 8, \dots \end{cases} \quad (1-8)$$

计算结果见表 1-1 中的用方法 B 所计算的列。我们发现用方法 B 计算时, I_0 与 I_0 的误差不超过 10^{-4} 。这是由于

$$E_{n-1} = I_{n-1} - \tilde{I}_{n-1} = \frac{1}{n}(I_n - \tilde{I}_n) = \frac{1}{n} E_n$$

从而

$$|E_0| = \frac{1}{n!} |E_n|$$

计算是稳定的。反之, 用方法 A 计算时, 误差是逐步扩大的, 因而是稳定的。此例说明, 数值不稳定的算法是不能使用的。

1.5.2 避免误差危害的若干原则

数值计算中通常不使用数值不稳定性算法, 在设计算法时还应该尽量避免误差危害, 防止有效数字损失, 通常运算中应注意以下若干原则。

① 避免用绝对值很小的数做除法。

② 避免两个相近数相减, 以免有效数字损失。

③ 注意运算次序, 防止大数“吃掉”小数, 如多个数相加减, 应按绝对值由小到大的次序运算。

④ 简化计算步骤, 尽量减少运算次数。

为了说明以上原则, 下面给出一些例题。

例 1-5 求 $x^2 - 16x + 1 = 0$ 的小正根。

解 方程的两根为 $x_1 = 8 - \sqrt{63}$, $x_2 = 8 + \sqrt{63}$,

小正根 $x_1 = 8 - \sqrt{63} \approx 8 - 7.94 = 0.06$, 只有一位有效数字。

为避免两相近数相减, 可改用 $x_1 = 8 - \sqrt{63} = \frac{1}{8 + \sqrt{63}} \approx \frac{1}{8 + 7.94} \approx 0.0627$, 具有三位有效数字。

例 1-6 计算 $A = 10^4(1 - \cos 2^\circ)$ (用 4 位数学用表)。

解 由于 $\cos 2^\circ = 0.9994$, 直接计算得

$$A = 10^4(1 - \cos 2^\circ) = 10^4 \times (1 - 0.9994) = 6$$

只有一位有效数字。若利用 $1 - \cos x = 2 \sin^2 \frac{x}{2}$, 则

$$A = 10^4(1 - \cos 2^\circ) = 2 \times (\sin 1^\circ)^2 \times 10^4 = 6.13$$

具有三位有效数字(其中 $\sin 1^\circ = 0.0175$)。

此例说明, 可以通过改变计算公式避免或者减少有效数字的损失。

通常, 有以下几种经验性避免有效数字损失的方法:

$$\sqrt{x+\varepsilon} - \sqrt{x} = \frac{\varepsilon}{\sqrt{x+\varepsilon} + \sqrt{x}}; \quad \ln(x+\varepsilon) - \ln x = \ln\left(1 + \frac{\varepsilon}{x}\right)$$

当 $|x| \ll 1$ 时:

$$1 - \cos x = 2 \sin^2 \frac{x}{2}; \quad e^x - 1 = x \left(1 + \frac{1}{2}x + \frac{1}{6}x^2 + \cdots\right).$$

更一般地, 当 $f(x) \approx f(x^*)$ 时, 可用 Taylor 展开

$$f(x) - f(x^*) = f'(x^*)(x - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2}(x - x^*)^2 + \cdots$$

取右端的有限项近似左端。

例 1-7 计算多项式

$$p(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \cdots + a_{n-1} x + a_n, \quad a_0 \neq 0$$

在 x^* 处的值 $p(x^*)$ 。

若直接计算每一项 $a_k x^{n-k}$ ($k = 0, 1, \dots, n-1$), 再逐项相加, 共需进行

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

次乘法和 n 次加法。

若采用以下算法:

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

它可表示为