

21
世纪
研究生
教材

实用数值分析

SHIYONG SHUZHI FENXI

张光澄 编著

SHIYONG SHUZHI FENXI



四川大学出版社

四川大学研究生教材建设基金重点资助项目

实用数值分析

SHIYONG SHUZHI FENXI

张光澄 编著

四川大学出版社



内容简介

本书主要介绍计算机上常用的数值计算方法及相关的基本概念和理论.全书分为两个部分:第一部分为正文,共包含8章内容(含习题).第1章介绍算法及其基本特点和误差的基本概念;第2章至第8章介绍工程上常用的数值计算方法以及相关的基本理论.第二部分包含两个附录.附录I主要介绍当今最流行的数学软件 Matlab 在数值计算方法、最优化方法以及数据处理等方面的应用;附录II为习题详解和参考答案.本书突出方法,突出应用.

本书可作为高等院校理工科硕士生、工程硕士生数值分析和数值计算方法课程的教材,也可供从事相关工作的科研人员和工程技术人员参考.

责任编辑:李川娜
责任校对:王 锋
封面设计:罗 光
责任印制:李 平

图书在版编目(CIP)数据

实用数值分析 / 张光澄编著. — 成都: 四川大学出版社, 2004.1

ISBN 7-5614-2729-8

I. 实... II. 张... III. 数值计算 - 研究生 - 教材
IV. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 105991 号

书名 实用数值分析

作者 张光澄 编著
出版 四川大学出版社
地址 成都市一环路南一段 24 号 (610065)
印刷 华西医科大学印刷厂
发行 四川大学出版社
开本 787mm×1092mm 1/16
印张 17.75
字数 405 千字
版次 2004 年 1 月第 1 版
印次 2004 年 1 月第 1 次印刷
印数 0 001~2 000 册
定价 35.00 元

版权所有◆侵权必究

- ◆读者邮购本书,请与本社发行科联系.电话:85408408/85401670/85408023 邮政编码:610065
- ◆本社图书如有印装质量问题,请寄回出版社调换。
- ◆网址:www.scupress.com.cn

序

“年年岁岁花相似，年年岁岁人不同”。在世纪之交，经过又一次高教体制改革，强强合并后的新四川大学已成为我国西部地区规模最大、学科门类最齐全的新型综合性研究型大学。

作为新世纪的献礼，我校研究生教材建设基金资助的第一批研究生优秀教材正式出版了，我在此表示热烈地祝贺。

众所周知，21世纪是知识经济的世纪，国际竞争空前激烈。竞争的焦点是科学技术，竞争的核心是创新型人才，竞争的关键是国民教育。对于四川大学这样的国家重点大学而言，则要注意大力发展研究生教育，扩大研究生规模，注重研究生质量。

校长、教师、教材是办学中的三大要素。教材是教学改革与师生智慧的重要的物化结晶。正是基于这种思考，我校决定在以学科建设为龙头的同时，努力加强研究生的教材建设，通过各种渠道筹集了专项基金，用以资助研究生优秀教材的编写和出版。我们首次资助的是有博士学位授权点的学科专业中涉及面大、使用面宽的研究生学位论文平台的优秀教材。今后，还将陆续扩大教材基金资助的范围，包括资助我校新增加的医学门类的有关教材的出版。

这次推出的研究生教材的基本特点是：符合该学科教学大纲的基本要求，有较强的理论性和系统性。它既反映了该学科发展的新知识、新动向、新成就，也反映了我校教师在该门学科教学与科研中的成果和经验。

前人说得好：古今之成大业、立大功者，都必须经过三种境界。“昨夜西风凋碧树，独上高楼，望尽天涯路”，此第一境也；“衣带渐宽终不悔，为伊消得人憔悴”，此第二境也；“众里寻他千百度，回头蓦见，那人正在灯火阑珊处”，此第三境也。研究生的优秀教材的建设应该算作一种“大事业”。本教材的作者们对于研究生教育改革的执着追求，令人钦佩；他们的无私奉献精神，值得赞扬；他们所取得的教学科研成果应该积极推广，使它产生应有的社会效益，为百年名校增添光彩。我希望在首批及以后陆续出版的我校研究生教材中能出现“传诸后世”的佳作，更希望我校有更多教授、名家动手撰写研究生教材，为建设国内一流、在国际上有影响的新四川大学做出更大的贡献。

四川大学副校长

四川大学研究生院院长

中国科学院院士

刘应明 教授

2001年3月8日

前 言

本书是作者多年来在为四川大学相关理工科硕士生、工程硕士生、本科生、进修生开设数值分析、数值计算方法等课程及所编讲义的基础上,对搜集整理的大量材料经过充分酝酿、反复修订而成的。

本书在课程内容的处理上遵循以下原则:

1. 突出方法,适当淡化理论。本书主要介绍计算机上常用的数值计算方法及相关的基本概念和理论,强调学用一致,突出算法的实质和思路,不刻意追求理论的系统性和完整性,注重工程硕士生带岗参加学习的实际;在内容的处理上遵循“突出重点,循序渐进”的原则,在每一章的开头大都安排有引言,开门见山提出全章的研究主题,并对必要的基础知识作适当的补充。

2. 突出应用。本书结合实际问题介绍求解数学模型的常用算法,并配有大量的数值计算实例,引导学生主动思考,激发学生的学习兴趣。

3. 加强算法实现的基本训练。为了帮助初学者尽快掌握算法设计的基本技巧,对每一章中涉及的主要算法都分别介绍了两种计算方案,即手算方案(表格化的计算步骤)和程序设计方案。通过从算法到程序设计有序而系统的训练,提高学生从数值计算到简单程序设计的能力。

全书分为两个部分:第一部分为正文,共包含8章内容(含习题)。第1章介绍算法及其基本特点和误差的基本概念;第2章至第8章介绍工程上常用的数值计算方法及相关的基本理论。这部分内容的设计讲授课时数为60学时。第二部分包含两个附录。附录I主要介绍当今世界上最流行的数学软件Matlab在数值计算方法、最优化方法以及数据处理等方面的应用;附录II为习题详解和参考答案。由于数值分析课程研究的是离散对象,具有计算复杂、实践性强等特点,因而初学者对习题的解答长期感到困惑。为此,本书对所列习题中的一些计算题目均作了详细解答,旨在帮助初学者较快入门。

四川大学管理学院侯泽华副教授对本书的校订提出了中肯的意见,四川大学管理学院郑建国同志和四川大学2000届工程硕士班学员刘昌明同学对本书附录II部分的习题解答做了大量的工作,在此一并致以最诚恳的谢意。

作者十分感谢四川大学研究生院、四川大学出版社以及制造工程学院有关领导对本书编写出版所给予的关心和支持。

由于作者水平有限,本书在对内容的取舍、安排、衔接、表达等方面难免存在缺点甚至错误,恳请读者批评指正。

张光澄

2003年6月于四川大学数学学院

目 录

前 言	(I)
第 1 章 算法及误差分析	(1)
1.1 算法简介	(1)
1.1.1 数值分析的研究对象	(1)
1.1.2 算法的基本特点	(1)
1.2 误差分析	(5)
1.2.1 误差的来源	(5)
1.2.2 误差的基本概念	(6)
习题 1	(7)
第 2 章 非线性方程的数值解法	(8)
2.1 引言	(8)
2.1.1 一元非线性方程求根	(8)
2.1.2 求根的精确化方法	(10)
2.2 二分法	(10)
2.2.1 基本二分法	(10)
2.2.2 二分法算法设计	(12)
2.3 迭代法	(13)
2.3.1 简单迭代法	(13)
2.3.2 加速迭代公式	(17)
2.3.3 牛顿 (Newton) 迭代法	(19)
2.4 迭代法收敛性分析	(22)
2.4.1 收敛性定义	(22)
2.4.2 收敛性判别条件	(22)
2.4.3 收敛阶 (速度) 及其判定	(26)
2.5 Newton 迭代法的应用	(29)
2.5.1 求重根和复根	(29)
2.5.2 Newton 下降法	(30)
习题 2	(31)
第 3 章 线性方程组的直接解法	(33)
3.1 引言	(33)
3.1.1 线性方程组的分类	(33)
3.1.2 线性方程组的矩阵形式	(33)
3.1.3 线性方程组解的存在惟一性	(34)

3.1.4	线性方程组的解法	(34)
3.2	高斯 (Gauss) 消元法	(35)
3.2.1	Gauss 顺序消元法	(35)
3.2.2	Gauss 顺序消元法的条件	(40)
3.3	选主元的 Gauss 消元法	(41)
3.3.1	Gauss 列主元消元法	(41)
3.3.2	高斯 - 若当 (Gauss - Jordan) 消元法	(45)
3.4	矩阵的三角分解	(47)
3.4.1	初等变换矩阵	(48)
3.4.2	矩阵的 LU 分解定理	(50)
3.4.3	LU 分解算法	(53)
3.5	追赶法	(59)
3.5.1	三对角阵的克劳特 (Crout) 分解	(59)
3.5.2	追赶法 (利用 Crout 分解解线性方程组)	(60)
3.5.3	追赶法求解公式的推导	(62)
习题 3		(64)
第 4 章	线性方程组的迭代解法	(66)
4.1	向量范数与矩阵范数	(66)
4.1.1	向量范数	(66)
4.1.2	向量序列的收敛性	(67)
4.1.3	矩阵范数	(68)
4.1.4	矩阵的特征值上界	(69)
4.1.5	矩阵序列的收敛性	(70)
4.2	迭代法	(71)
4.2.1	问题的提出	(71)
4.2.2	雅可比 (Jacobi) 迭代法	(71)
4.2.3	高斯 - 塞德尔 (Gauss - Seidel) 迭代法	(75)
4.2.4	迭代公式归纳	(78)
4.3	迭代法的收敛性	(79)
4.3.1	迭代法收敛的充要条件	(79)
4.3.2	迭代法收敛的充分条件 (一)	(80)
4.3.3	迭代法收敛的充分条件 (二)	(82)
4.3.4	迭代法收敛性判别归纳	(87)
4.4	逐次超松弛方法 (SOR 方法)	(87)
4.4.1	SOR 公式	(87)
4.4.2	SOR 公式的矩阵形式	(88)
4.4.3	SOR 方法的计算表格	(89)
4.4.4	SOR 方法的收敛性	(90)

习题4	(91)
第5章 矩阵的特征值和特征向量的计算	(93)
5.1 预备知识 (矩阵的特征值和特征向量)	(93)
5.2 幂法与反幂法	(94)
5.2.1 基本幂法	(94)
5.2.2 规范化幂法	(95)
5.2.3 原点平移法	(97)
5.2.4 反幂法	(100)
5.2.5 幂法与反幂法小结	(102)
习题5	(104)
第6章 插值法与曲线拟合	(105)
6.1 一元代数函数插值	(105)
6.1.1 插值问题	(105)
6.1.2 插值多项式的存在惟一性	(105)
6.2 拉格朗日 (Lagrange) 插值方法	(106)
6.2.1 插值基函数	(106)
6.2.2 Lagrange 插值多项式	(107)
6.2.3 $L_n(x)$ 的两种表达式	(107)
6.2.4 插值应用举例	(108)
6.2.5 插值余项	(110)
6.2.6 Lagrange 插值方法评价	(111)
6.3 Newton 均差插值方法	(112)
6.3.1 均差与均差表	(112)
6.3.2 Newton 均差插值多项式	(112)
6.3.3 均差的性质	(116)
6.4 埃尔米特 (Hermite) 插值方法	(118)
6.4.1 Hermite 插值多项式	(118)
6.4.2 两点三次 Hermite 插值公式	(119)
6.4.3 分段低阶插值	(121)
6.5 三次样条插值方法	(122)
6.5.1 三次样条插值函数	(123)
6.5.2 三次样条插值函数的构成	(123)
6.5.3 第一边界条件下样条插值算法	(126)
6.6 曲线拟合	(128)
6.6.1 问题的提出	(128)
6.6.2 实例分析	(129)
6.6.3 超定方程组的最小二乘解	(135)
6.6.4 多项式拟合的一般步骤	(136)

6.6.5	曲线化直	(137)
习题 6	(138)
第 7 章	数值积分	(141)
7.1	数值求积公式	(141)
7.1.1	关于牛顿 - 莱布尼兹 (Newton - Leibniz) 公式	(141)
7.1.2	数值求积公式	(141)
7.1.3	插值型求积公式	(142)
7.1.4	牛顿 - 柯特斯 (Newton - Cotes) 公式	(143)
7.2	数值求积公式的代数精度	(145)
7.2.1	代数精度的概念	(145)
7.2.2	插值型求积公式余项估计	(147)
7.3	复化求积公式	(148)
7.3.1	复化梯形公式	(148)
7.3.2	复化 Simpson 公式	(149)
7.3.3	复化 Cotes 公式	(149)
7.3.4	小结	(151)
7.4	龙贝格 (Romberg) 求积方法	(152)
7.4.1	变步长梯形方法 (逐次半分法)	(152)
7.4.2	Romberg 方法 (逐次半分加速法)	(154)
7.4.3	Romberg 算法设计	(155)
7.5	Gauss 型求积公式	(157)
7.5.1	两点 Gauss 公式	(157)
7.5.2	正交多项式	(158)
7.5.3	常用的 Gauss 型求积公式	(160)
习题 7	(164)
第 8 章	常微分方程初值问题的数值解法	(166)
8.1	初值问题与数值解	(166)
8.1.1	一阶常微分方程的初值问题	(166)
8.1.2	数值解与数值解法	(168)
8.2	欧拉 (Euler) 公式与梯形公式	(169)
8.2.1	Euler 公式 (显式与隐式)	(169)
8.2.2	两步 Euler 公式 (Euler 中点公式)	(170)
8.2.3	梯形公式	(170)
8.3	Euler 方法及其改进方法	(171)
8.3.1	Euler 方法	(171)
8.3.2	改进的 Euler 方法	(175)
8.4	单步方法的截断误差与阶	(177)
8.5	尤格 - 库塔 (Runge - Kutta) 方法	(179)

8.5.1	Runge - Kutta (简称 R - K) 方法的基本思路	(179)
8.5.2	二阶 R - K 公式	(180)
8.5.3	四阶 R - K 公式	(182)
8.6	一阶常微分方程组初值问题的数值解法	(184)
8.6.1	一阶常微分方程组的初值问题	(184)
8.6.2	一阶常微分方程组的数值解法	(184)
8.7	高阶方程初值问题的数值方法	(187)
8.8	单步法的收敛性和稳定性	(190)
8.8.1	引言	(190)
8.8.2	单步方法的收敛性	(191)
8.8.3	单步方法的稳定性	(192)
	习题 8	(194)
附录 I	Matlab 及其应用	(195)
1.1	Matlab 简介	(195)
1.2	最优化方法计算	(203)
1.3	数据分析	(211)
1.4	数值分析常用算法	(219)
附录 II	习题详解及参考答案	(231)

第 1 章 算法及误差分析

1.1 算法简介

1.1.1 数值分析的研究对象

微积分学是学习数值分析必备的基础课程之一,这两门课程从研究内容到研究方法既有联系又有较大的差异,对此我们作简要的比较:

微积分学(Calculus)主要研究一元函数及多元函数的微分、积分和统一两者的微分方程.以一元函数微积分为例,一元函数微积分主要研究一元函数 $y = f(x)$ 及其微分 $df(x)$ 、导数 $\frac{d}{dx}f(x)$ 、不定积分 $\int f(x)dx$ 、定积分 $\int_a^b f(x)dx$ 、微分方程 $\frac{dy}{dx} = \varphi(x, y(x))$ 等等.

微积分学以解析运算(或称符号运算)为其研究工具,如 $f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x}$, $df(x) = f'(x)dx$, $\int f(x)dx = F(x) + C$, $\int_a^b f(x)dx = F(x)|_a^b = F(b) - F(a)$ (其中 $F'(x) = f(x)$), $\frac{dy}{dx} = \varphi(x, y) \xrightarrow{\text{求 } y(x)} \frac{dy(x)}{dx} \equiv \varphi(x, y(x))$.

数值分析(Numerical Analysis)则主要研究数值微分、数值积分、数值代数、数值微分方程以及数据处理等等.它的研究工具是算法(Algorithm),包括算法设计、程序设计、误差分析以及算法上机执行等内容.

下面将简要介绍算法及其基本特点.

1.1.2 算法的基本特点

1.1.2.1 算法

算法(在算法设计时简称 Algo.)是对解题步骤的准确描述,代表解题的一系列操作指令,即从输入数据或信息,经过有限步操作获得输出数据或信息.

从图 1-1 中可以看出算法在求解数学模型的过程中所起到的重要作用.

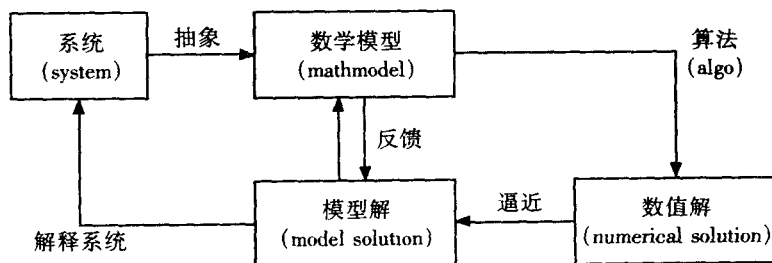


图 1-1

随着现代电子计算机和计算技术的迅速发展,算法的内容更加丰富,大致可分为如下几种类型.

1)数值型算法

数值型算法包括:数据处理,即插值、拟合、回归、列数据分析等;数值微积分,即数值微分、数值积分;数值代数,即线性方程组及非线性方程的数值解,矩阵特征值及特征向量的数值计算;数值微分方程,即微分方程的初值问题及边值问题的数值解法.

2)非数值型算法

从数值计算扩大到信息处理、数据传输,出现了相应的非数值型算法,如排序、查找、屏幕操作、图形操作、菜单设计等等.

3)密钥技术(加密、解密算法)

随着网络技术的发展,信息安全技术被提上了议事日程,电子签名、数据库存取控制、工作站执行控制、服务器存取控制等都大量使用加密、解密等算法.

1.1.2.2 算法的特点

(1)有效性.算法给出的每一步操作都有明确的指令,能在计算机环境下执行,不允许产生二义性.

例1 设一元二次方程 $ax^2 + bx + c = 0$,用笛卡儿(Descartes)公式求根,即

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad \begin{cases} b^2 - 4ac \geq 0 & (\text{二实根}), \\ b^2 - 4ac < 0 & (\text{二复根}). \end{cases}$$

当 $b^2 - 4ac \geq 0$ 时, $x_{1,2}$ 表示二实根;当 $b^2 - 4ac < 0$ 时, $x_{1,2}$ 表示二复根.为避免产生二义性,算法采用分支结构.

Algo.1.1(分支结构)

1° 输入 a, b, c .

2° 计算判别式 $b^2 - 4ac \Rightarrow p$.

3° $p \geq 0$?

是, $\frac{(-b + \sqrt{p})}{2a} \Rightarrow x_1, \frac{(-b - \sqrt{p})}{2a} \Rightarrow x_2$;

否, $\frac{(-b + i\sqrt{|p|})}{2a} \Rightarrow x_1, \frac{(-b - i\sqrt{|p|})}{2a} \Rightarrow x_2$.

4° 输出 x_1, x_2 .

(2)有穷性.任何算法都必须在有限步内完成,对于无穷过程实施有限化,其典型的方法是截断和离散.

例2(截断) 计算 $\sin x$ 的值, $x \in (0, \frac{\pi}{4})$.

解 据泰勒(Taylor)展式,将 $\sin x$ 在 $x = 0$ 处展开,即

$$\sin x = -\frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \dots \quad (1-1)$$

其余项 $R_n(x) = (-1)^{n+1} \frac{x^{2n+3}}{(2n+3)!} \cos \zeta, \quad \zeta = \theta x, \quad \theta \in (0, 1). \quad (1-2)$

计算 $\sin 0.5$,设在式(1-1)中取 $n = 3$,则

$$\sin 0.5 \approx 0.5 - \frac{0.5^3}{3!} + \frac{0.5^5}{5!} - \frac{0.5^7}{7!} = 0.479\ 425\ 533,$$

而

$$R_3(x) = (-1)^4 \frac{x^9}{9!} \cos \zeta, \quad \zeta \in (0, \frac{\pi}{4}),$$

$$|R_3(0.5)| \leq \frac{(\frac{\pi}{4})^9}{9!} = 3.13 \times 10^{-7} = 0.313 \times 10^{-8} < 0.5 \times 10^{-8}.$$

取 8 位小数, 则 $\sin 0.5 \approx 0.479\ 425\ 53$. 这是因为精确值 $\sin 0.5$ 、近似值 $0.479\ 425\ 53$ 及绝对误差限 0.5×10^{-8} 之间满足如下不等式

$$|\sin 0.5 - 0.479\ 425\ 53| < \frac{1}{2} \times 10^{-8}.$$

因此所计算出的近似值准确至第 8 位小数.

例 3(离散) 在微积分中, 定积分使用牛顿-莱布尼兹(Newton-Leibniz)公式

$$\int_a^b f(x) dx = F(x) \Big|_a^b = F(b) - F(a).$$

但在相当多的情况下, 原函数 $F(x)$ 的解析式不能用初等函数表出. 例如 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$ (正弦积分) 不存在初等函数 $F(x)$ 使得 $F'(x) = \frac{\sin x}{x}$; 又如道森(Dawson)积分 $\varphi(x) = e^{-x^2} \int_0^x e^{t^2} dt$, 仍然不存在初等函数 $F(t)$ 使得 $F'(t) = e^{t^2}$.

解决上述求积问题的办法是将连续问题离散化, 即用数值求积的方法.

将积分区间 $[a, b]$ 分成 n 个部分, 如图 1-2 所示. 令

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i). \quad (1-3)$$

式中 $f(x_i)$ 是分点 x_i 处的函数值, A_i 称为求积系数.

我们称式(1-3)为数值求积公式, 它将一个无穷过程转化为有穷过程, 即通过有限步完成积分计算. 如何确定求积系数 A_i , 我们将在第 7 章中详细介绍.

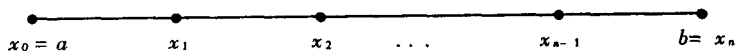


图 1-2

(3) 复杂性(计算复杂性). 算法的计算复杂性是指计算代价的估计, 它包括估计存储量(内存空间)和估计计算量(计算时间)两部分, 统称为时空代价的估计.

例 4 秦九韶算法: 设 n 次多项式为

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

试计算 $p_n(x)$ 的值, 并估计所用乘法的次数.

解 常规算法(逐项计算):

1 次项	1 次乘法	}	共计乘法次数为 $1+2+3+\cdots+n = \frac{n(n+1)}{2}$.
2 次项	2 次乘法		
⋮	⋮		
n 次项	n 次乘法		

秦氏算法(递推算法):

设 $n=4$, 则

$$p_4(x) = a_4x^4 + a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$$

$$= \{[(a_4x + a_3)x + a_2]x + a_1\}x + a_0,$$

$$a_4x + a_3 \Rightarrow s_1, \quad s_1x + a_2 \Rightarrow s_2, \quad s_2x + a_1 \Rightarrow s_3, \quad s_3x + a_0 \Rightarrow s_4 = p_4(x).$$

若计算一个 4 次多项式, 则 $p_4(x)$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{常规算法: 10 次乘法,} \\ \text{秦氏算法: 4 次乘法;} \end{array} \right.$

若计算一个 n 次多项式, 则 $p_n(x)$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{常规算法: } \frac{n(n+1)}{2} \text{ 次乘法,} \\ \text{秦氏算法: } n \text{ 次乘法.} \end{array} \right.$

可见当 n 很大时, 秦氏算法的优越性尤其显著. 该算法采用循环结构.

Algo.1.2(循环结构)

1° 输入 $a_i (i=0, 1, \cdots, n), x, n$.

2° $a_n \Rightarrow s_0, \quad k=1$.

3° $s_{k-1}x + a_{n-k} \Rightarrow s_k$.

4° $k \leq n?$

是, $k+1 \Rightarrow k$, 转 3°;

否, 输出 s_k , stop.

为了节省工作单元, 上述算法中的数组 s (其下标量分别为 s_0, s_1, \cdots, s_n) 可改用动态存储方式, 只需引入一个工作单元 s .

Algo.1.3(动态存储)

1° 输入 $a_i (i=0, 1, \cdots, n), x, n$.

2° $a_n x \Rightarrow s, \quad n \Rightarrow k$.

3° $x(a_{k-1} + s) \Rightarrow s$.

4° $k > 2?$

是, $k-1 \Rightarrow k$, 转 3°;

否, 输出 $s + a_{k-1}$, stop.

注 秦九韶, 南宋时期我国杰出的数学家, 于公元 1247 年写成传世名著《数书九章》, 美国哈佛大学科学史家萨顿(Sarton)称秦氏是“他那个民族, 他那个时代, 并且确实也是所有时代最伟大的数学家之一”。

1.2 误差分析

1.2.1 误差的来源

在运用数学方法解决实际问题的过程中,每一步都可能带来误差.

(1)模型误差.在建立数学模型时,往往要忽略很多次要因素,把模型“简单化”、“理想化”,这时模型就与真实背景有了差距,即带入了误差.

(2)测量误差.数学模型中的已知参数,多数是通过测量得到,而测量受工具、方法、观察者的主观因素、不可预料的随机干扰等影响,必然带入误差.

(3)舍入误差.计算中常会遇到无理数或无穷有理数,如 $\pi, e, \sqrt{2}$ 等无理数(不尽不循环的数), $\frac{1}{3}$ 等无穷有理数(不尽循环的数).由于计算机只能处理有限数位的小数运算,因此对于上述数据或中间结果都必须进行修约,这必然产生修约误差.

(4)方法误差(截断、离散所致).求解数学模型的数值计算方法绝大多数是近似公式,这种简化带入的误差称为方法误差,它是本课程研究的主要对象.

(5)初值误差.本课程中所涉及到的迭代公式、递推公式均需要选取初始值,而初始数据不可避免地会带有误差,我们称之为初值误差或初始扰动.初值误差对算法的影响,即所谓算法稳定性问题,也是本课程的研究对象之一.稳定算法,即微小的初始扰动对计算结果影响不大;而非稳定算法,即微小的初始扰动对计算结果可能影响很大.

例5 计算含参数的积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx, \quad n=0, 1, \dots, 8.$$

解
$$I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n}. \quad (1-4)$$

Algo.1.4(正向递推)

据式(1.4)得递推公式

$$\begin{cases} I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1}, & n=1, 2, \dots, 8, \\ I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln(x+5) \Big|_0^1 = \ln \frac{6}{5} = \ln 1.2 = 0.182\ 321\ 556. \end{cases}$$

取 $I_0 \approx 0.182\ 3$ (保留4位小数),计算结果用 I_n 表示,其数值如下:

$$\begin{aligned} I_1 &= 0.088\ 5, & I_2 &= 0.057\ 5, & I_3 &= 0.045\ 8, & I_4 &= 0.021\ 0, \\ I_5 &= 0.095\ 0, & I_6 &= -0.308\ 3, & I_7 &= 1.684\ 4, & I_8 &= -8.297\ 0. \end{aligned}$$

通过理论分析可以证明,题中的积分 I_n 满足以下规律:

$$\text{对 } \forall n, 0 < I_n < 1 (n=1, 2, \dots, 8), \text{ 且当 } n \nearrow, I_n \searrow.$$

显然 Algo.1.4 与理论分析相悖.其原因是 Algo.1.4 为非稳定算法,初值 $I_0 \approx 0.182\ 3$ 的微小扰动将造成此后的计算失真.

Algo.1.5(逆向递推——改进算法)

据式(1-4)得逆向递推公式

$$\begin{cases} I_{n-1} = \frac{1}{5} \left(\frac{1}{n} - I_n \right), & n = 8, 7, \dots, 1, \\ I_8 = \int_0^1 \frac{x^8}{x+5} dx = 0.018\ 836\ 92. \end{cases}$$

取 $I_8 = 0.018\ 84$ (保留 4 位有效数字), 计算结果如下:

$$\begin{aligned} I_7 &= 0.021\ 23, & I_6 &= 0.024\ 33, & I_5 &= 0.028\ 47, & I_4 &= 0.034\ 31, \\ I_3 &= 0.043\ 14, & I_2 &= 0.058\ 04, & I_1 &= 0.088\ 39, & I_0 &= 0.182\ 3. \end{aligned}$$

显然, Algo. 1.5 的计算结果与理论分析一致, 即

$$0 < I_n < 1 \quad (n = 8, 7, 6, \dots, 1, 0), \text{ 且当 } n \nearrow, I_n \searrow.$$

以上计算结果说明, Algo. 1.5 为稳定算法, 初值 $I_8 = 0.018\ 84$ 的微小扰动不影响其后的计算值.

1.2.2 误差的基本概念

人们常用绝对误差或有效数字位数来描述一个近似值的准确程度, 由于这些概念早为读者所熟悉, 本书只作简要叙述.

1) 绝对误差与绝对误差限

设 x^* 是准确值 x 的一个近似值, 则称 $x - x^*$ 为近似值 x^* 的绝对误差, 并用 $e^*(x)$ 表示, 即

$$e^*(x) = x - x^*. \quad (1-5)$$

绝对误差 $e^*(x)$ 一般无法计算, 只能估计出它的绝对值的一个上限, 即求一个正数 ϵ^* , 使得

$$|e^*(x)| = |x - x^*| \leq \epsilon^*. \quad (1-6)$$

满足不等式(1-6)的正数 ϵ^* 称为近似值 x^* 的绝对误差限, 简称为误差限.

2) 有效数字与有效数字位数

设近似值 x^* 某位数的半个单位是它的误差限, 而且从该位数字到 x^* 最左边的那个非零数字共有 n 位 (见图 1-3), 那么我们把这 n 位数字都称为有效数字, 并称 x^* 具有 n 位有效数字.

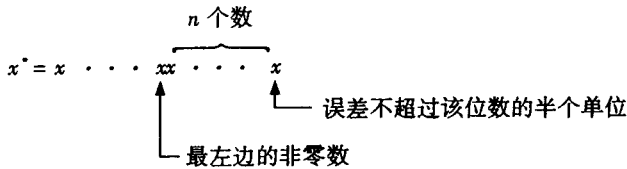


图 1-3

一个近似值, 它的有效数字的位数与它的绝对误差限之间有紧密的关系.

(1) 已知 ϵ^* , 确定 x^* 的有效数字的个数或者确定 x^* 准确至某一位.

[法则 1] 若 $\epsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-k}$, 则满足 $|x^* - x| \leq \epsilon^*$ 的近似数 x^* 准确至第 k 位小数, 而它的有效数字的位数等于第 k 位小数至第一个非零数字的位数.

例6 设 $\pi = 3.141\ 592\ 653\ 59\dots$ 讨论 π 的近似值的有效位数.

解 取 π 的 2 位小数的近似值 $x^* = 3.14$. 因为

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

即 $x = 3.14$ 准确至第 2 位小数, 具有 3 位有效数字.

取 π 的 3 位小数的近似值 $x^* = 3.142$. 因为

$$|3.142 - \pi| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-3},$$

即 $x^* = 3.142$ 准确至第 3 位小数, 具有 4 位有效数字.

(2) 已知 x^* 的有效数字的位数(或准确至某一数位), 确定 x^* 的绝对误差限.

[法则 2] 若 x^* 准确至第 k 位小数, 则

$$\epsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-k}.$$

在例 2 中, $\sin 0.5 \approx 0.479\ 425\ 53$, 即准确至第 8 位小数, 因为

$$|R_3(0.5)| = |\sin 0.5 - 0.479\ 425\ 53| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-8}.$$

对同一个数的近似值来说, 有效数字位数越多, 其绝对误差越小; 而绝对误差越小, 有效数字的位数有可能越多.

注 在南北朝时期, 我国伟大的数学家祖冲之以“更开密法”获得圆周率 π 的“盈朒二限”, 即

$$3.141\ 592\ 6 < \pi < 3.141\ 592\ 7.$$

“盈朒二限”的平均值为 $3.141\ 592\ 65$, 已准确至第 8 位小数, 这是当时世界上的最佳结果.

祖冲之用几何方法将圆周率表示成密率 $\frac{355}{113}$ 更是世界数学史上的卓越成就. 一千多年后德国数学家奥托(Otto)等人才重新获得这一结果.

习题 1

(略)