

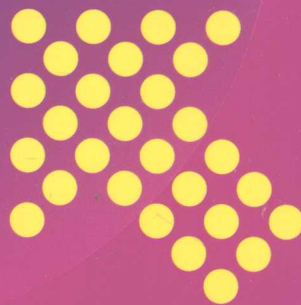
21世纪高等学校规划教材



SHUZHI FENXI

数值分析

邢丽君 张 杰 主 编
曲中宪 王晓慧 禹海兰 郭丽杰 副主编



中国电力出版社
<http://jc.cepp.com.cn>

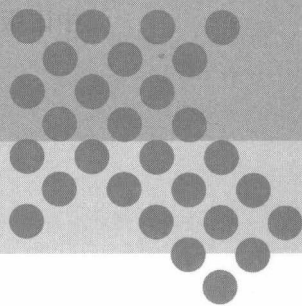
21世纪高等学校规划教材



数值分析

SHUZHIFENXI

主 编 邢丽君 张 杰
副主编 曲中宪 王晓慧 禹海兰 郭丽杰
编 写 徐 屹
主 审 周 硕



中国电力出版社

<http://jc.cepp.com.cn>

内 容 提 要

本书为 21 世纪高等学校规划教材。作者根据多年的教学实践经验,参考国内外的数值分析教材编写而成。全书共九章,其内容主要包括:非线性方程求根、线性方程组的直接解法与迭代法、插值方法、曲线拟合、数值积分、常微分方程初值问题的数值解法,以及矩阵特征值与特征向量的计算等。

本书选材深浅适度,叙述系统严谨,文字通俗易懂,注重内容的适用性,强调数值方法思想和原理,以及在计算机上的实现。同时对数值方法的收敛性、稳定性、误差分析亦做了适当分析。各章配有适量的例题和习题。

本书适合作为工科大学本科生和研究生数值分析的课程教材,也可作为从事科学与工程计算的科研工作者学习数值计算方法的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

数值分析/邢丽君,张杰主编. —北京:中国电力出版社, 2009

21 世纪高等学校规划教材

ISBN 978-7-5083-9181-6

I. 数… II. ①邢…②张… III. 数值计算-高等学校-教材
IV. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2009) 第 124764 号

中国电力出版社出版、发行

(北京三里河路 6 号 100044 <http://jc.cepp.com.cn>)

北京市同江印刷厂印刷

各地新华书店经售

*

2009 年 8 月第一版 2009 年 8 月北京第一次印刷

787 毫米×1092 毫米 16 开本 10.25 印张 243 千字

定价 16.50 元

敬告读者

本书封面贴有防伪标签,加热后中心图案消失
本书如有印装质量问题,我社发行部负责退换

版权专有 翻印必究

前言

数值分析是高等学校理工科专业本科生和研究生的重要数学基础课程。近几年来,随着计算科学与技术的发展,一方面,需要解决的数学问题越来越复杂;另一方面,计算机的功能越来越强大。因此,对数值分析的教学提出了新的和更高的要求。为了更好地适应数值分析课程的教学,我们根据国内外数值分析课程教材的发展变化情况,总结多年来的教学经验,编写了这本旨在加强实用性和应用性的教材。

本教材系统地介绍了现代科学与工程计算中常用的数值计算方法、概念,以及有关的理论与应用。全书共分九章,其内容主要包括:非线性方程求根、线性方程组的直接解法和迭代法、插值方法、曲线拟合、数值积分、常微分方程初值问题的数值解法,以及矩阵特征值与特征向量的计算等。

本教材主要有如下特点:内容的组织由浅入深,过渡自然,且将各门课程的内容有机结合,融会贯通;对数值分析的基本概念、理论、思想方法的阐述准确、简洁、透彻、深入;取材合理、观点较新、内容丰富、重点突出、强调应用,注重对学生实践能力的培养。各章配有适量的例题及习题,特别是综合性和实际应用性的习题,丰富和补充了书中的相应内容,有利于提高学生分析问题和解决问题的能力。

本书由周硕教授仔细审阅并提出了宝贵意见,在此,我们表示衷心感谢。

编者

2009年6月

目 录

前言

第一章 引论	1
1.1 误差	1
1.2 避免误差的若干准则	5
1.3 算法的数值稳定性与收敛性	8
习题一	9
第二章 非线性方程求根	11
2.1 根的隔离与二分法	11
2.2 迭代法及其理论分析	13
2.3 牛顿法	17
2.4 弦截法与快速弦截法	19
2.5 迭代收敛的加速方法	21
习题二	23
第三章 线性方程组的迭代法	25
3.1 迭代法的基本概念	25
3.2 雅可比迭代法和高斯-塞德尔迭代法	28
3.3 迭代过程的收敛性	33
3.4 逐次超松弛迭代法 (SOR 法)	37
习题三	40
第四章 线性方程组的直接解法	43
4.1 消去法	43
4.2 追赶法	50
4.3 矩阵的三角分解	53
4.4 误差分析	57
习题四	60
第五章 插值方法	62
5.1 问题的提法	62
5.2 拉格朗日插值	64
5.3 牛顿插值公式	68
5.4 埃尔米特插值	71
5.5 分段插值法	75
5.6 样条函数	78
习题五	81

第六章 曲线拟合	84
6.1 曲线拟合的最小二乘法	84
6.2 函数逼近	87
习题六	94
第七章 数值积分	96
7.1 机械求积	96
7.2 牛顿-柯特斯公式	98
7.3 复化求积公式	102
7.4 龙贝格算法	106
7.5 高斯求积公式	111
习题七	114
第八章 常微分方程初值问题的数值解法	117
8.1 欧拉公式	117
8.2 龙格-库塔方法	121
8.3 单步法的收敛性与稳定性	126
8.4 线性多步法	128
8.5 微分方程组	131
习题八	133
第九章 矩阵特征值与特征向量的计算	136
9.1 幂法及反幂法	136
9.2 对称矩阵的特征值及特征向量的求法	141
9.3 QR 方法	145
习题九	147
附录 1 微积分若干基本定理的回顾	149
附录 2 矩阵及特征值问题的相关结论	150
附录 3 常微分方程的初值问题	153
参考文献	155

第一章 引 论

数值分析 (Numerical Analysis) 是对各种科学问题通过数值运算, 得到数值解答的方法和理论, 是研究如何用计算机等计算工具来求出数学问题数值解的一门学科. 随着计算机的广泛应用, 越来越多的实际问题, 可以通过数值计算而得到很好的解决. 数值计算的重要性, 使得科学计算与科学理论和科学实验相并列成为当今世界科学活动的第三种手段. 因此, 数值分析既是一门基础性的学科, 又是一门应用型的学科.

用数值计算的方法来解决具体的实际问题, 首先必须将具体问题抽象为数学问题 (即建立数学模型). 而有些数学问题往往得不到它的准确解, 或者解这种问题的计算量很大, 只能借助计算机求其近似解 (称为数值解).

应用计算机来求解数学问题 (数学模型) 的步骤是给出能在计算机上实现的数值方法, 用计算机语言编写程序, 然后上机计算求其结果.

建立和选择合适的算法是整个数值计算中非常重要的环节. 对所有算法在理论上要保证数值稳定性, 即舍入误差对解的准确性影响不大; 对近似算法在理论上还应保证其收敛性, 即近似解能逼近精确解到任意的程度. 同时, 对解决同一个问题的不同算法进行评价时, 还要考虑算法所占存储空间的大小和算法包含运算次数的多少. 因此, 建立一个数值方法 (算法) 的基本原则是:

- (1) 便于在计算机上实现.
- (2) 计算量尽量小.
- (3) 存储量尽量小.
- (4) 问题准确解与计算解的误差要小.

1.1 误 差

1.1.1 误差的来源

用数值方法求解问题时, 在计算过程中不可避免地存在误差, 其来源主要有:

(1) 模型误差. 从实际问题出发建立数学模型时, 通常要在一定条件下抓住主要因素, 而忽略次要因素. 这种理想化了的数学描述与实际之间总存在着误差, 这种误差称为模型误差.

(2) 观测误差. 数学模型中一般包含若干参数, 它们的值通常由观测得到, 而观测难免出现误差. 这种误差称为观测误差.

(3) 舍入误差. 在数值计算过程中经常遇到一些无穷小数, 例如, 无理数和有理数中的某些分数化成的小数

$$\pi = 3.141\ 592\ 65\cdots$$

$$\sqrt{2} = 1.414\ 213\ 56\cdots$$

$$\frac{1}{3} = 0.333\ 333\ 33\cdots$$

由于受计算机字长的限制, 计算机所能表示的数据只能是一定的有限位数, 这时就需要将数据按一定的舍入方式取一定位数的近似有理数, 由此产生的误差, 称为舍入误差.

例如: 用 3.1416 代替 π , 1.414 代替 $\sqrt{2}$ 等.

(4) 截断误差. 在计算中如果遇到超越运算或极限运算时, 则需要通过无穷过程才能求得精确的结果. 但实际上人们只能进行有限次步骤的计算, 用有限的步骤来求得近似的结果. 这种用有限的过程代替无限的过程, 一般由无穷级数的截断、有限差分代替导数或在收敛之前中止迭代等产生的误差, 称之为截断误差.

例如:

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \cdots$$

当 $|x|$ 较小 ($|x| \ll 1$) 时, 可以用前 3 项作为 $\sin x$ 的近似值, 其截断误差的绝对值不超过 $\frac{|x|^7}{7!}$.

数值分析课程中所涉及的误差, 通常指的是舍入误差和截断误差. 关于函数的插值和逼近、数值积分与微分、常微分方程的数值解等内容, 主要分析方法的截断误差; 而关于线性方程组的数值解等内容, 主要讨论输入数据误差和舍入误差的传播以及对计算结果的影响.

1.1.2 误差与有效数字

定义 1.1 设 x^* 是准确值 x 的一个近似值, 则称

$$e = x - x^*$$

为近似值 x^* 的绝对误差, 简称误差.

一般来说 e 的准确值很难求出, 只能根据具体测量或计算的情况估计其大小的范围, 即估计出 $|e|$ 的上界. 若存在一个正数 ϵ , 使得

$$|e| = |x - x^*| \leq \epsilon$$

则称 ϵ 是近似值 x^* 的绝对误差限或绝对误差界, 简称误差限或误差界.

有了误差限 ϵ , 就可以知道准确值 x 所在的范围 $x^* - \epsilon \leq x \leq x^* + \epsilon$. 有时也可以表示为 $x = x^* \pm \epsilon$.

绝对误差的大小不能完全刻画近似值的准确程度. 例如, 测量 1km 的长度时产生了 5m 的误差, 而测量 100m 的长度时产生了 1m 的误差. 就绝对误差而言, 前者为后者的 5 倍. 但如果考虑到被测量值本身的大小, 前者误差所占测量值的比例为 0.5%, 后者误差所占测量值的比例为 1%. 显然, 后者比前者的测量要精确些. 可见, 刻画近似值的精确度不仅要看绝对误差的大小, 还要考虑近似数本身的大小, 为此, 引入相对误差的概念.

定义 1.2 设 x^* 是准确值 x 的一个近似值, 则称

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

为 x 的近似值 x^* 的相对误差.

注意: 当 $x=0$ 时, 相对误差没有意义. 实际上准确值 x 往往是未知的, 所以, 常把

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

作为 x^* 的相对误差. 通常不能确定出 e_r^* 的准确值, 只能估计其大小的范围, 若

$$|e_r^*| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \epsilon_r^*$$

则称 ϵ_r^* 为 x^* 的相对误差限.

为给出一种近似值的表示方法, 使之既能表示近似值的大小, 又能表示其精确程度, 下面引入有效数字的概念.

对于 π , 分别截取它的前 2~5 位数字, 得到四个数

$$3.1, 3.14, 3.141, 3.1415$$

但它们只舍不入, 不全是位数限定下的最好近似值. 依四舍五入规则得到

$$3.1, 3.14, 3.142, 3.1416$$

可见, 它们中有两个与直接截取的数在末位上相差一个单位, 容易看出, 依四舍五入规则得到的近似值的绝对误差均不超过自身末位数字的半个单位. 例如

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

$$|\pi - 3.1416| < \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

由以上讨论, 我们给出下面的定义.

定义 1.3 如果近似值 x^* 的误差限不超过某一位的半个单位, 且该位到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位, 则称 x^* 有 n 位有效数字.

具体地, 设 x^* 是准确值 x 的一个近似值, 记

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

其中 $a_i (i=1, 2, \cdots, n)$ 是 0, 1, 2, $\cdots$, 9 中的一个数字, 且 $a_1 \neq 0$, m 为整数, 若

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

则称 x^* 是 x 的具有 n 位有效数字的一个近似值.

【例 1-1】 以 $\frac{22}{7} = 3.142\ 857\ 1\cdots$ 作为 π 的近似值, 问它具有几位有效数字?

解 由于

$$\left| \frac{22}{7} - \pi \right| = 0.001\ 264\cdots < \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

故 $3.142\ 857\ 1\cdots$ 具有三位有效数字.

定理 1.1 设 x^* 是准确值 x 的一个近似值, 且 $x^* = \pm 10^m \times 0.a_1a_2\cdots$

(1) 若 x^* 具有 n 位有效数字, 则 $\left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}$;

(2) 若 $\left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{1-n}$, 则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证明 显然 $a_1 \times 10^{m-1} \leq |x^*| \leq (a_1+1) \times 10^{m-1}$.

(1) 当 x^* 具有 n 位有效数字时,

$$\frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{a_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n} \quad (1.1)$$

$$(2) \text{ 若 } \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{1-n},$$

则

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

说明 x^* 至少具有 n 位有效数字.

定理 1.1 说明近似值的有效数字位数越多, 相对误差限就越小, 反之也成立.

1.1.3 误差的传播

在数值计算的过程中, 初始数据的误差对计算结果的影响称为误差的传播问题.

设某数学问题的解 y 与 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 有关, 即 $y = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_n)$. 且 y 在点 $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 附近可微分. 若测得 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的一组近似值 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$, 记为 $x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$, 相应的 $y^* = \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$. 当数据较小时, 解的误差为

$$\begin{aligned} e(y) &= y - y^* = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_n) - \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) \\ &\approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i^*} (x_i - x_i^*) \end{aligned} \quad (1.2)$$

解的相对误差为

$$e_r^*(y) = \frac{e}{y^*} \approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i^*} \cdot \frac{x_i^*}{\varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)} e_r^*(x) \quad (1.3)$$

系数为

$$\frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i^*}$$

或

$$\frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i^*} \cdot \frac{x_i^*}{\varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}$$

上面两式表示结果误差相对于数据误差的放大或缩小倍数, 若

$$\left| \frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i^*} \right| \quad \text{和} \quad \left| \frac{\partial \varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i^*} \cdot \frac{x_i^*}{\varphi(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)} \right|$$

很大, 则 $e(y)$ 或 $e_r^*(y)$ 可能很大, 数据 x_i^* 很小的变化可能引起结果 y^* 很大的误差.

对于加减乘除及开方等几种运算, 从式 (1.2) 和式 (1.3) 即可推出数据误差和计算结果误差之间的关系.

(1) 和的误差

$$\left. \begin{aligned} e(x_1^* + x_2^*) &\approx e(x_1^*) + e(x_2^*) \\ e_r^*(x_1^* + x_2^*) &\approx \frac{x_1^*}{x_1^* + x_2^*} e_r^*(x_1^*) + \frac{x_2^*}{x_1^* + x_2^*} e_r^*(x_2^*) \end{aligned} \right\} \quad (1.4)$$

当 x_1^* 与 x_2^* 同号时, $\frac{x_1^*}{x_1^* + x_2^*}$ 与 $\frac{x_2^*}{x_1^* + x_2^*}$ 的绝对值都在 0 和 1 之间, 由式 (1.4) 知,

必有

$$\begin{aligned} |e(x_1^* + x_2^*)| &\leq |e(x_1^*)| + |e(x_2^*)| \\ |e_r^*(x_1^* + x_2^*)| &\leq |e_r^*(x_1^*)| + |e_r^*(x_2^*)| \end{aligned}$$

这两个等式说明加法运算结果的误差限或相对误差限, 都不超过相加各项的误差限或相对误差限之和.

当 x_1^* 与 x_2^* 异号时, $\frac{x_1^*}{x_1^* + x_2^*}$ 与 $\frac{x_2^*}{x_1^* + x_2^*}$ 的绝对值可能大于 1, 则上面的结论不成立. 特别的, 若 $x_1^* + x_2^* \approx 0$, 上式的绝对值可能很大, 可能出现

$$|e_r^*(x_1^* + x_2^*)| \gg |e_r^*(x_1^*)| + |e_r^*(x_2^*)|$$

因此, 绝对值相近的异号两数相加或者大小相近的同号两数相减, 会造成结果误差的严重增大.

(2) 积的误差

$$\begin{aligned} e(x_1^* x_2^*) &\approx x_2^* e(x_1^*) + x_1^* e(x_2^*) \\ e_r^*(x_1^* x_2^*) &\approx e_r^*(x_1^*) e_r^*(x_2^*) \end{aligned} \quad (1.5)$$

由式 (1.5) 知, 当 x_1^* 或 x_2^* 的绝对值很大时, $|e(x_1^* x_2^*)|$ 可能很大. 这说明乘积绝对值很大, 可能使误差严重增大, 减少精确度.

(3) 商的误差

$$\begin{aligned} e\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) &\approx \frac{x_2^*}{x_2^{*2}} e(x_1^*) - \frac{x_1^*}{x_2^{*2}} e(x_2^*) \\ e_r^*\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) &\approx e_r^*(x_1^*) - e_r^*(x_2^*) \end{aligned} \quad (1.6)$$

由式 (1.6) 知, 除数接近于零时, 可能使误差严重增大, 减少精确度.

(4) 开方的误差

$$\begin{aligned} e(\sqrt{x^*}) &\approx \frac{1}{2\sqrt{x^*}} e(x^*) \\ e_r^*(\sqrt{x^*}) &\approx \frac{1}{2} e_r^*(x^*) \end{aligned} \quad (1.7)$$

由式 (1.7) 知, 平方根的相对误差是被开方数的相对误差的 $\frac{1}{2}$, 即方根的精确度比被开方数的精确度高.

1.2 避免误差的若干准则

在数值计算中的每一步都可能产生误差, 而解决一个问题往往要经过成千上万次运算, 我们不可能每步都加以分析, 只能从整体上考虑. 下面是在数值计算中, 为控制误差的传播应注意的几个问题.

1.2.1 简化计算步骤以减少运算次数

减少运算次数, 既可以提高解题速度, 又能使计算中的误差累积降低.

例如要计算和式 $\sum_{n=1}^{1000} \frac{1}{n(n+1)}$ 的值, 若逐项求和, 其运算次数多且误差累积也不小, 但和式简化为

$$\sum_{n=1}^{1000} \frac{1}{n(n+1)} = \sum_{n=1}^{1000} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{n+1} \right) = 1 - \frac{1}{1001}$$

则整个计算只要一次求倒数运算和一次减法运算即可。

再如要计算 n 次多项式 $p_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n$ 的值, 则其乘法的运算次数为 $1+2+3+\cdots+n = \frac{n(n+1)}{2}$ 。若采用递推算法

$$\begin{cases} u_n = a_n \\ u_k = x u_{k+1} + a_k \quad (k = n-1, n-2, \dots, 0) \\ p_n(x) = u_0 \end{cases}$$

则乘法的运算次数为 n 。

1.2.2 尽量避免相近的数相减

数值计算中出现两个相近的数相减时, 会使计算结果误差严重增大, 准确程度急速下降。为避免这种情况出现, 一般可以先将计算公式变形, 使变形后的算式不再含有相近数的减法运算。例如:

当 x 很大时, 计算 $\sqrt{x+1} - \sqrt{x}$ 的值, 可以利用下列变换, 提高有效数字的位数。

$$\sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}$$

当 x 接近于 0 时, 计算 $\frac{1 - \cos x}{\sin x}$ 的值, 可以利用下列变换, 提高有效数字的位数。

$$\frac{1 - \cos x}{\sin x} = \frac{\sin x}{1 + \cos x} \quad \text{或} \quad \tan \frac{x}{2}$$

1.2.3 避免用绝对值很小的数作除数

当用绝对值很小的数作除数或用绝对值很大的数作乘数时, 会使计算结果误差严重增大, 减少计算精确度。

【例 1-2】 线性方程组
$$\begin{cases} 0.000\,01x_1 + x_2 = 1 \\ 2x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 = \frac{200\,000}{399\,999} = 0.500\,001\,25 \\ x_2 = \frac{199\,998}{199\,999} = 0.999\,995 \end{cases}$$

假设用四位浮点数以及消元法求解, 上述方程可以写成

$$\begin{cases} 10^{-4} \times 0.1000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.1000 \\ 10^1 \times 0.2000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.2000 \end{cases}$$

用 $-10^6 \times 0.2000$ 乘以第一个方程加到第二个方程上可得

$$\begin{cases} 10^{-4} \times 0.1000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.1000 \\ 10^6 \times 0.2000x_2 = 10^6 \times 0.2000 \end{cases}$$

由此解得

$$\begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = 10^1 \times 0.1000 = 1 \end{cases}$$

显然, 结果严重失真.

1.2.4 应注意控制误差的积累

在数值计算中, 经常遇到递推公式的计算. 当采用递推公式计算时, 由于多次递推, 可能产生误差的积累, 以至于得出错误的结果.

【例 1-3】 计算积分

$$I_n = e^{-1} \int_0^1 x^n e^x dx \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

解 利用分部积分法, 可以得到计算 I_n 的递推公式

$$\begin{cases} I_0 = e^{-1} \int_0^1 e^x dx = 1 - e^{-1} \approx 0.6321 \\ I_n = 1 - nI_{n-1} \quad (n = 1, 2, \dots) \end{cases} \quad (1.8)$$

利用式 (1.8), 用四位小数计算依次得到

$$\begin{aligned} I_0 &= 0.6321 & I_1 &= 0.3679 & I_2 &= 0.2642 & I_3 &= 0.2074 & I_4 &= 0.1074 \\ I_5 &= 0.1480 & I_6 &= 0.1120 & I_7 &= 0.2160 & I_8 &= -0.7280 & I_9 &= 7.5520 \end{aligned}$$

由此看到, I_8 为负值, 显然与 $I_n > 0$ 矛盾.

事实上, 由估计式

$$\frac{e^{-1}}{n+1} = e^{-1} (\min_{0 \leq x \leq 1} e^x) \int_0^1 x^n dx < I_n < e^{-1} (\max_{0 \leq x \leq 1} e^x) \int_0^1 x^n dx = \frac{1}{n+1} \quad (1.9)$$

必有 $I_7 < \frac{1}{8} = 0.125$. 但是, 由上面计算知 $I_7 = 0.2160$, 可见, 有效数字严重丢失.

发生这个现象的原因是: I_0 的初始误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-4}$, 虽然在以后的递推计算中没有新的舍入误差, 但这个初始数据的误差在以后的每次计算时顺次乘以 1, 2, 3, ... 而传播积累到 I_n 中, 从而使计算到 I_7 时完全不准确了.

若将式 (1.8) 改写为

$$I_{n-1} = \frac{1 - I_n}{n} \quad (1.10)$$

再由式 (1.9) 知 $\frac{e^{-1}}{10} < I_9 < \frac{1}{10}$, 粗略地取

$$I_9 \approx \frac{1}{2} \left(\frac{1}{10} + \frac{e^{-1}}{10} \right) = 0.0684$$

按式 (1.10) 对 $n=9, 8, 7, \dots, 1, 0$ 进行倒推计算, 计算过程中小数点后第五位四舍五入, 得 $I_9, I_8, \dots, I_1, I_0$ 顺次为

$$\begin{aligned} I_9 &= 0.0684 & I_8 &= 0.1035 & I_7 &= 0.1121 & I_6 &= 0.1268 & I_5 &= 0.1455 \\ I_4 &= 0.1709 & I_3 &= 0.2073 & I_2 &= 0.2642 & I_1 &= 0.3679 & I_0 &= 0.6321 \end{aligned}$$

可见, $I_0 = 0.6321$ 全部为有效数字. 其原因为 I_9 的误差传播到 I_8 时要乘以 $\frac{1}{9}$, 到计算

I_0 时 I_9 的误差已缩小为原来的 $\frac{1}{9!}$ 倍.

1.3 算法的数值稳定性与收敛性

1.3.1 算法的数值稳定性

在设计或选用算法时,人们首先关心的是该算法能否产生符合精度要求的可靠结果.但是,对大量算法来说,要定量的分析舍入误差的累积是非常复杂困难的.因此,为了推断算法的舍入误差是否影响可靠性结果的产生,还需要建立定性分析的准则.为此,提出数值稳定性这一概念.

如果在执行一个算法的过程中舍入误差的增长不影响可靠结果的产生,则称该算法是**数值稳定的**,否则,称之为**数值不稳定的**.算法稳定的一个必要条件是:原始数据小的变化只会引起最后结果小的变化.这个必要条件是关于数值稳定的一个基本原则.符合这一准则的算法未必都是数值稳定的,但是,不符合这一准则的算法一定是数值不稳定的.为了刻画舍入误差的增长与算法稳定性的关系,下面引入一个定义.

定义 1.4 设给定的算法在执行某步运算时产生误差 ϵ , 在接下来的 n 步运算后产生的误差为 e_n , 且 e_n 仅由 ϵ 引起. 如果

$$|e_n| \approx cn\epsilon$$

c 是与 n 无关的常数, 则称误差呈**线性增长**. 如果

$$|e_n| \approx K^n |\epsilon|$$

K 为大于 1 的常数, 则称误差呈**指数增长**.

误差呈线性增长通常是不可避免的, 此时可以通过 $c\epsilon$ 来控制 e_n , 进而得到一个可靠的结果, 即误差呈线性增长的算法是数值稳定的. 误差呈指数增长时, 无论 $|\epsilon|$ 多小, K^n 都将使 e_n 失控, 即误差呈指数增长的算法是数值不稳定的. 数值不稳定的算法不能实际使用.

在实际计算中可以使用的算法有两类: 一类算法是对任何原始数据都是数值稳定的, 这种算法称为**无条件稳定的**或**绝对稳定的**; 另一类算法是对某些原始数据是数值稳定的, 而对另一些原始数据是数值不稳定的, 这种算法称为**条件稳定的**或**相对稳定的**.

1.3.2 算法的收敛性与收敛速度

凡是近似算法必须保证在理论上或实际上的收敛性, 才能用于解决问题. 下面简单阐述两个问题: 对近似算法的收敛性如何从概念去描述, 如何从应用上去比较与评价?

一般情况下, 近似解逼近精确解的程度是选用某种距离进行描述的. 关于给定计算问题的一个近似算法是收敛的, 指的是由该算法所产生近似解的一个无穷集合, 该集合按某种选定的距离能在任意程度上逼近精确解.

从应用方面说, 需要对近似算法收敛的性态进行比较与评价. 大多数近似算法按照产生近似解的方式可以分为两类: 第一类如函数的插值与逼近、数值积分及常微分方程数值解, 常常可以通过截断误差的先验估计, 直接提供一个符合要求的近似解. 其收敛的性态, 主要是比较截断误差的大小及计算复杂性的好坏; 第二类是数值代数及非线性方程的数值解的迭代算法, 常常通过产生收敛到精确解的序列来获得足够准确的近似解. 其收敛的性态, 主要是比较近似序列收敛速度的快慢及计算复杂性的好坏.

习 题 一

1. 求下列各数具有五位有效数字的近似值 (每个数求出一个近似值即可).

0.015 236 7, 816.954 6, 123 765 1, 600 045

2. 若 $x^* = 1234.64$ 是 x 的具有六位有效数字的近似值, 求 x^* 的绝对误差限.

3. 设 x^* 的相对误差限为 δ , 求 $(x^*)^k$ 的相对误差限.

4. 设 $x^* > 0$, x^* 的相对误差限为 δ , 求 $\ln x$ 的相对误差限.

5. 下列各对 x 与 a 的值中, 用 a 近似 x .

(1) $x = \pi$, $a = 3.15$;

(2) $x = \frac{1}{3}$, $a = 0.3333$;

(3) $x = \frac{\pi}{1000}$, $a = 0.003 15$;

(4) $x = \frac{100}{3}$, $a = 33.3$.

试求: (1) a 的绝对误差; (2) a 的相对误差; (3) a 的有效数字的位数.

6. 设 $x_1^* = -2.72$, $x_2^* = 0.021 18$, $x_3^* = 183.62$, $x_4^* = 12.430$ 均为经过四舍五入得出的近似值, 则它们各有几位有效数字?

7. 已知近似值 $x_1^* = 1.42$, $x_2^* = -0.018$, $x_3^* = 184 \times 10^{-4}$ 的绝对误差限均为 0.5×10^{-2} , 则它们各有几位有效数字?

8. 某数 x , $10 \leq x < 100$, 经数值计算求其近似值, 若要求具有四位有效数字, 则误差限应不超过多少?

9. 若 $\left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \frac{1}{2} \times 10^{1-n}$, 求证: x^* 至少具有 n 位有效数字.

10. 设 $f(x) = \ln(x - \sqrt{x^2 - 1})$, 或写成 $f(x) = -\ln(x + \sqrt{x^2 - 1})$, 开方时取六位有效数字的近似值. 用两种表达式分别计算 $f(30)$ 的值, 并估计误差.

11. 为尽量避免有效数字的严重损失, 当 $|x| \ll 1$ 时应该如何对下列计算公式进行变换.

(1) $\frac{1}{1+2x} - \frac{1-x}{1+x}$; (2) $1 - \cos x$; (3) $e^{-x} - 1$.

12. 设 $|x| \gg 1$, 变换下列计算公式以尽量避免有效数字的严重损失.

(1) $\sqrt{x + \frac{1}{x}} - \sqrt{x - \frac{1}{x}}$; (2) $\int_x^{x+1} \frac{1}{1+t^2} dt$; (3) $\ln(x - \sqrt{x^2 - 1})$.

13. 若用下列两种方式计算 e^{-5} 的近似值, 问哪种方法能提供较好的近似值? 并分析其原因.

(1) $e^{-5} \approx \sum_{i=0}^9 (-1)^i \frac{5^i}{i!}$; (2) $e^{-5} \approx \left(\sum_{i=0}^9 \frac{5^i}{i!} \right)^{-1}$.

14. 下列式子是否要通过进行恒等变换, 才能避免有效数字的损失? 若要进行变换, 应该如何变换?

(1) $\sin x - \sin y$; (2) $\arctan x - \arctan y$;

(3) $\sqrt{x+4}-2$;

(4) $\frac{e^{2x}-1}{2}$.

15. 测得电压 $U=(110\pm 2)\text{V}$, 电流 $I=(20\pm 0.5)\text{A}$, 则由欧姆定律得 $R=\frac{U}{I}=5.5\Omega$, 求 R 的绝对误差和相对误差.

16. 已测得某场地长 x 的近似值 $x^*=110\text{m}$, 宽 y 的近似值 $y^*=80\text{m}$, 已知 x^* 的绝对误差是 0.2m , y^* 的绝对误差是 0.1m , 求场地面积 $S=xy$ 的绝对误差和相对误差.

第二章 非线性方程求根

解决科学技术中遇到的数学问题,常常需要先解决高次代数方程或超越方程的求解问题.这些方程的精确解往往很难求得,因此有必要研究它的数值求根方法.本章主要讨论单变量非线性方程 $f(x)=0$ 的求根问题,这里 $x \in \mathbf{R}$, $f(x)$ 是某个区间上的连续函数.我们主要介绍几种常见的方法:二分法、迭代法、迭代的加速方法、牛顿法等.

2.1 根的隔离与二分法

2.1.1 根的隔离

方程 $f(x)=0$ 的解 x^* 通常称为方程的根,又称为函数 $f(x)$ 的零点.如果 $f(x)$ 是关于 x 的 n 次多项式,对应的方程称为 n 次代数方程,方程的根也称为多项式的根,由代数基本定理可知, n 次代数方程 $f(x)=0$ 在复数域内有且只有 n 个根(重根的个数按重数计算),当 $n \leq 4$ 时,代数方程求根有计算公式,当 $n \geq 5$ 时,就不能用公式来表示方程的根.因此,一般对 $n \geq 3$ 时,多项式方程求根可采用迭代法求根.

关于方程求根大致包括下列三个问题:

- (1) 根的存在性.方程有没有根?如果有根,有几个根?
- (2) 根的隔离.先求出有根的大致范围,然后把范围分成若干个子区间,使每个子区间或者无根,或者只有一个根.有根子区间内的任意点都可以看成该根的一个近似值.以后称有根子区间为有根区间.
- (3) 根的精确化.已知一个根的近似值后,设法将它逐步精确化,直到满足精度要求为止.

以上三个问题是密切联系的,最为重要的是根的隔离及精确化问题.对于根的精确化方法将介绍二分法、牛顿法等.对于根的隔离,常常采用逐次搜索法来确定有根区间.所谓逐次搜索法就是求出函数 $f(x)$ 在若干个离散点上的函数值,观察函数值的变化情况,从而确定有根区间.

【例 2-1】 求方程 $f(x)=x^3-11.1x^2+38.8x-41.77=0$ 的有根区间.

解 根据有根区间的定义,对 $f(x)=0$ 的根进行搜索计算,得 $f(x)$ 在若干离散点处的符号见表 2-1.

表 2-1

x	0	1	2	3	4	5	6
$f(x)$ 的符号	-	-	-	+	-	-	+

由此可知,方程的有根区间为 $[1, 2]$, $[3, 4]$, $[5, 6]$.

2.1.2 二分法

设函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上连续,且 $f(a)f(b) < 0$. 根据连续函数的性质, $f(x)$ 在 $[a, b]$ 内一定有实的零点,即方程 $f(x)=0$ 在 $[a, b]$ 内一定有实根.假设它在 $[a, b]$ 内的唯一的单实根为 x^* .