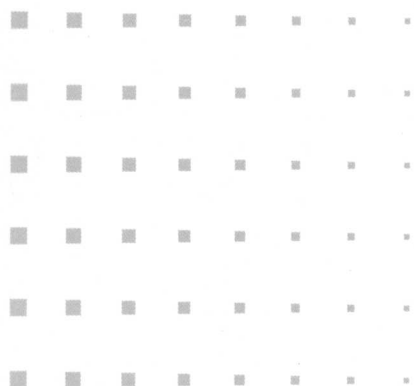




高等学校本科规划教材

计算方法

蔺小林 编著



西安电子科技大学出版社
<http://www.xduph.com>

21世纪高等学校本科规划教材

计算方法

蔺小林 主编

王莉 李莉 编著

卢琨 史胜楠

西安电子科技大学出版社

2009

内 容 简 介

本书比较全面地介绍了科学与工程计算中常用的计算方法,具体介绍了这些计算方法的基本理论与实际应用,同时对这些数值计算方法的计算效果、稳定性、收敛效果、适用范围以及优劣性与特点也作了简要的分析。全书共9章,内容包括引论、线性代数方程组求解方法、非线性方程求根、函数插值、函数逼近、矩阵特征值与特征向量的数值算法、数值积分与数值微分、常微分方程初值问题的数值解法、自治微分方程稳定区域的计算等。

本书概念清晰,语言叙述通俗易懂,理论分析严谨,结构编排由浅入深,在分析问题注重启发性,例题选择具有针对性且注重实际应用。前8章附有一定数量的习题,供读者学习时进行练习。

本书可作为高等院校数学与应用数学、信息与计算科学、应用物理学、计算机科学等专业的低年级本科生和工科硕士研究生使用,也可供从事科学与工程计算的科技工作者参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/蔺小林主编. —西安:西安电子科技大学出版社,2009.7

面向21世纪高等学校本科规划教材

ISBN 978-7-5606-2258-3

I. 计… II. 蔺… III. 计算方法—高等学校—教材 IV. 0241

中国版本图书馆CIP数据核字(2009)第071685号

策 划 杨 璠

责任编辑 马晓娟 杨 璠

出版发行 西安电子科技大学出版社(西安市太白南路2号)

电 话 (029)88242885 88201467 邮 编 710071

网 址 www.xduph.com 电子邮箱 xdupfxb001@163.com

经 销 新华书店

印刷单位 西安文化彩印厂

版 次 2009年7月第1版 2009年7月第1次印刷

开 本 787毫米×1092毫米 1/16 印张17

字 数 397千字

印 数 1~4000册

定 价 24.00元

ISBN 978-7-5606-2258-3/O·0097

XDUP 2550001-1

*** 如有印装问题可调换 ***

本社图书封面为激光防伪覆膜,谨防盗版。

前

言

随着现代科学技术的飞速发展,科学计算已成为科学实践的重要手段之一,其应用范围已渗透到所有科学活动领域。作为科学与工程计算的数学工具,计算方法已成为各高等院校数学与应用数学、信息与计算科学、应用物理学、计算机科学等本科生的专业基础课以及工科硕士研究生学位公共必修课。

本书比较全面地介绍了现代科学与工程计算中常用的数值计算方法,对这些数值计算方法的基本理论与实际应用进行了较详细的分析,同时简要地分析了这些数值算法的计算效果、稳定性、收敛效果、适用范围以及优劣性与特点。全书共9章,内容包括引论、线性代数方程组求解方法、非线性方程求根、函数插值、函数逼近、矩阵特征值与特征向量的数值算法、数值积分与数值微分、常微分方程初值问题的数值解法、自治微分方程稳定区域的计算等。

考虑到读者的知识结构和层次不同,我们在编排本书内容时,尽量从涉及高等数学和线性代数的相关内容出发,在对问题进行叙述和分析时,尽量使得语言简单明了、通俗易懂,做到理论联系实际。学习者只要具有高等数学和线性代数的基本知识就可以学习本书的内容。本书基本概念叙述清晰,理论分析比较严谨,在分析问题时注重启发性,例题选择具有针对性,注重实际应用效果。通过本书的学习,可给学习者建立一条思考问题的清晰思路。本书取材全面合理,问题处理观点较新,既对经典的数值方法如线性代数方程组的消元法及迭代方法、非线性方程(组)的迭代方法、函数插值和逼近方法、矩阵特征值与特征向量的计算方法、数值积分与数值微分等进行了较全面的介绍,同时也增加了一些方法的推广和最新发展,包括微分方程波形松弛方法和稳定域的计算等内容,以适应不同学习者的需要。本书各章附有一定数量的习题,供读者学习时进行练习,书后附有部分习题的解答或参考答案。

本书全部讲完需要60学时左右,授课老师可根据学生的情况及实际学时,有选择地讲解部分内容。

参加本书讨论和编写的有:史胜楠(第一、二章)、卢琨(第三、四章)、王莉(第五、六章)、李莉(第七、八章)、蔺小林(第九章),全书由蔺小林统纂主编。

在本书的编写过程中得到了陕西科技大学许多同仁的帮助,刘海峰仔细审阅了全书,提出了宝贵意见,王玉萍绘制了全书所有图形,刘利明、桑园校对

了本书全部打印稿，西安电子科技大学出版社的有关同志对本书的出版也付出了辛勤的劳动，在此我们深表谢意。

由于水平有限，加之时间仓促，本书不足之处在所难免，敬请各位同仁批评指正。

前 言

作 者

2009年5月



第一章 引论	1
1.1 计算方法的研究内容	1
1.2 误差基础知识	2
1.2.1 误差来源与分类	2
1.2.2 绝对误差和相对误差	3
1.2.3 有效数字	4
1.2.4 数据误差在运算中的传播	6
1.3 数值计算中应注意的问题	7
1.3.1 算法的数值稳定性	7
1.3.2 避免误差危害的若干原则	8
习题 1	10
第二章 线性代数方程组求解方法	12
2.1 向量与矩阵基本知识	12
2.1.1 引言	12
2.1.2 向量和矩阵	13
2.1.3 特殊矩阵	14
2.1.4 向量与矩阵的范数	15
2.2 高斯消去法	19
2.2.1 高斯顺序消去法	19
2.2.2 高斯主元消去法	23
2.3 矩阵的三角分解	25
2.3.1 直接三角分解法	26
2.3.2 平方根法	30
2.3.3 解三对角方程组的追赶法	33
2.4 矩阵的条件数与方程组的性态	35
2.5 解线性代数方程组的迭代法	41
2.6 基本迭代法	43
2.6.1 雅克比迭代法(J-迭代法)	43

2.6.2 高斯-赛德尔迭代法(GS-迭代法)	44
2.6.3 逐次超松弛迭代法(SOR-迭代法)	45
2.7 迭代法的收敛性	47
2.7.1 一般迭代法的基本收敛定理	47
2.7.2 J-迭代法和GS-迭代法收敛判定定理	53
2.7.3 SOR-迭代法收敛性判定定理	54
习题2	56

第三章 非线性方程求根 60

3.1 二分法	60
3.2 迭代法	62
3.2.1 不动点迭代法	62
3.2.2 不动点迭代的一般理论	63
3.3 加速迭代收敛的方法	67
3.3.1 两个迭代值组合的加速方法	67
3.3.2 三个迭代组合的加速方法	69
3.4 牛顿迭代法	70
3.5 弦割法与抛物线法	74
3.5.1 弦割法	74
3.5.2 抛物线法	78
3.6 非线性方程组零点的迭代方法	80
3.6.1 实值向量函数的基本概念与性质	81
3.6.2 压缩映射原理与不动点迭代法	83
3.6.3 牛顿迭代法	86
习题3	90

第四章 函数插值 92

4.1 多项式插值问题	92
4.1.1 代数插值问题	92
4.1.2 代数插值多项式的存在性与唯一性	93
4.1.3 误差估计	94
4.2 拉格朗日插值法	95
4.2.1 拉格朗日插值基函数	95
4.2.2 拉格朗日插值多项式	96
4.2.3 拉格朗日插值法截断误差及其实用估计	98
4.2.4 拉格朗日反插值方法	100
4.3 牛顿插值法	101

4.3.1	差商的概念与性质	101
4.3.2	牛顿插值公式	102
4.4	等距节点插值公式	104
4.4.1	差分的定义及运算	104
4.4.2	差分与差商的关系	105
4.4.3	等距节点插值公式	106
4.5	埃尔米(Hermit)插值公式	108
4.5.1	一般情形的埃尔米插值问题	108
4.5.2	特殊情况的埃尔米插值问题	111
4.6	分段低次插值	112
4.7	三次样条插值方法	114
4.7.1	三次样条插值的基本概念	114
4.7.2	三弯矩插值法	116
4.7.3	样条插值函数的误差估计	119
	习题 4	119
第五章 函数逼近		122
5.1	内积与正交多项式	122
5.1.1	权函数	122
5.1.2	内积定义及性质	123
5.1.3	正交性	123
5.1.4	正交多项式系的性质	125
5.2	常见正交多项式	126
5.2.1	勒让德(Legendre)多项式系	126
5.2.2	第一类切比雪夫多项式系	127
5.2.3	第二类切比雪夫多项式系	128
5.2.4	拉盖尔(Laguerre)多项式系	129
5.2.5	埃尔米(Hermite)多项式系	130
5.3	最佳一致逼近	131
5.3.1	最佳一致逼近概念	131
5.3.2	最佳逼近多项式的存在性及唯一性	131
5.3.3	最佳逼近多项式的构造	133
5.4	最佳平方逼近	137
5.4.1	最佳平方逼近的概念	137
5.4.2	最佳平方逼近函数 $s^*(x)$ 的求法	137
5.4.3	正交多项式作基函数的最佳平方逼近	140
5.5	曲线拟合与最小二乘法	142
5.5.1	最小二乘曲线拟合问题的求解及误差分析	142

5.5.2	多项式拟合的求解过程	143
5.5.3	正交函数系的最小二乘曲线拟合	145
5.5.4	用最小二乘法求解超定方程组	147
	习题 5	149
第六章 矩阵特征值与特征向量的数值算法		151
6.1	预备知识	151
6.2	乘幂法	152
6.2.1	主特征值与主特征向量的计算	152
6.2.2	加速收敛技术	157
6.3	反幂法	159
6.4	雅可比方法	161
	习题 6	165
第七章 数值积分及数值微分		167
7.1	数值积分的基本概念	167
7.1.1	数值求积的基本思想	167
7.1.2	插值型求积公式	168
7.1.3	代数精度	169
7.1.4	收敛性与稳定性	173
7.2	牛顿—柯特斯求积公式	173
7.2.1	牛顿—柯特斯公式	173
7.2.2	几个低阶求积公式	175
7.3	复化求积方法	177
7.3.1	复化求积公式	177
7.3.2	变步长求积公式	179
7.4	龙贝格求积公式	181
7.4.1	龙贝格(Romberg)求积公式的推导	181
7.4.2	龙贝格求积算法的计算步骤	182
7.5	高斯型求积公式	183
7.5.1	高斯型求积公式的理论	184
7.5.2	几个常用高斯求积公式	185
7.6	二重积分的求积公式*	191
7.7	数值微分	195
7.7.1	计算数值微分的插值法	195
7.7.2	计算数值微分的泰勒展开法*	197
7.7.3	计算数值微分的待定系数法	197

习题 7	198
------------	-----

第八章 常微分方程初值问题的数值解法

199

8.1 引言	199
8.2 欧拉方法及其改进	200
8.2.1 欧拉公式	200
8.2.2 单步法的局部截断误差和阶	202
8.3 龙格—库塔方法	205
8.3.1 龙格—库塔方法的基本思想	205
8.3.2 龙格—库塔方法的推导	205
8.4 线性多步法	208
8.4.1 线性多步法的基本思想	208
8.4.2 线性多步法的构造	210
8.5 算法的稳定性及收敛性	215
8.5.1 算法的稳定性	215
8.5.2 算法的收敛性	217
8.6 一阶常微分方程组与高阶方程	218
8.6.1 一阶常微分方程组	218
8.6.2 高阶微分方程	220
8.7 解微分方程的波形松弛方法	222
8.7.1 微分方程初值问题的波形松弛方法	222
8.7.2 微分方程初值问题波形松弛方法的收敛问题	226
8.7.3 微分方程边值问题的波形松弛方法	227
8.8 微分方程边值问题的数值方法	231
8.8.1 打靶方法	231
8.8.2 有限差分方法	234
习题 8	236

第九章 自治微分方程稳定区域的计算

238

9.1 自治微分方程的概念	238
9.2 稳定边界上的平衡点	240
9.3 稳定域边界的特征	244
9.4 确定稳定域的一个算法	247
9.5 几个系统稳定域的计算	248

习题参考答案

252

参考文献

261

第一章 引 论

1.1 计算方法的研究内容

在自然科学、工程技术、经济和医学各领域中产生的许多实际问题都可以通过数学语言描述为数学问题,也就是说,由实际问题建立数学模型,然后应用各种数学方法和技巧来求解,最后把结果反馈到实际应用中去。不过,大家应该注意到,有许多数学问题是得不到精确解的,此时就需要寻求解决这些问题的近似解的计算方法,我们把这样的计算方法称为数值计算方法或数值分析。

计算方法是计算数学的一个主要部分,而计算数学则是数学学科的一大分支,它研究如何借助于计算机求解各类数值问题。应用计算机求解各类数值问题需要经历以下几个主要过程:

(1) 实际问题 在各个领域都有许多实际问题,需要这些不同领域的专家提出具有明确意义的问题,并给出该问题符合本领域所固有的规则或自然法则。

(2) 数学模型 对不同领域专家提出的实际问题,用辩证唯物主义的思想进行分析,在抓住事物主要因素及在合理假设下,运用该领域中的规律,结合数学理论、方法和工具,建立问题中各种量之间的联系,从而得到完备的数学模型。

(3) 计算方法 对数学模型先从数学理论上进行分析,研究解的存在性、唯一性。只有在满足解的存在性和唯一性条件下,才能进行数据计算,有些问题可以给出解析解,但在大多数情况下,要对数学模型进行数值计算。如何把连续模型离散化,用什么样的方法进行计算,算法的相容性、收敛性、稳定性等都是计算方法的研究内容。

(4) 算法设计 算法设计在应用计算机进行科学计算过程中起着非常重要的作用,一个收敛快、精度好的算法,有时比飞速发展的计算机硬件更有使用价值。

(5) 计算求解 在计算机上求出所要的结果。目前已有的数学软件可以帮助我们实现上机计算,如 Maple、Matlab、Mathematica 等,基本上已经将数值分析的主要内容设计成简单的函数,只要调用这些函数进行运算便可得到数值结果。在实际工作中,由于面临的问题具有明确的特征,其复杂性有时已经超过书本所述例证范围,因而有必要深入掌握计算方法的基本思想和具体内容。

数值分析的内容包括线性代数方程组求解、非线性方程(组)求解、矩阵的特征值与特征向量的计算、函数插值、函数逼近、数值积分与数值微分以及微分方程数值解法。

1.2 误差基础知识

对数学问题进行数值求解,求得的结果一般情况下都含有误差,即所得结果多数情况下都是近似解。对这些结果的误差进行分析和估计是计算方法的主要内容。通过对它们的研究可以确切地知道误差的性态和误差的范围。

1.2.1 误差来源与分类

计算方法中的数可以分为两类:一类是精确数,即它精确地反映了实际情况,例如某班有学生 48 人,数字 48 就是精确数;另一类是近似值,它只能近似地反映实际情况,例如今天早晨温度是 -5°C ,数字 -5 就仅仅是一个测量所得的近似值。数的精确值与其近似值之差称为误差。在数值计算中,误差是不可避免的,大多数情况下不存在严格的精确数,因此,分析误差产生的原因,把误差限制在允许的范围内是非常有必要的。

一般来说,我们可以把误差分为两大类:固有误差和计算误差。固有误差包括模型误差和观测误差;计算误差包括截断误差和舍入误差。

(1) 模型误差 对实际问题建立数学模型时存在不可避免的误差。在定量分析客观事物时,总是要抓住主要矛盾,忽略次要矛盾,因此建立起来的数学模型与实际客观事物之间存在一定差距,这种差距在数学上称为模型误差。

(2) 观测误差 在解决实际问题时,有时需要从实验或观测中得到各种数据,而由于观测手段和工具的限制,得到的数据必然存在一定误差,这种数据误差称为观测误差。观测误差又称为测量误差或参数误差。观测值的精确程度取决于测量仪器的精密程度和操作人员测量方法等因素。

(3) 截断误差 数学模型的精确值与用数值方法求得的近似值的差距称为截断误差。截断误差又称为方法误差。这种误差常常是在用有限过程来逼近无限过程时产生的。

例如,用 e^x 的幂级数表达式:

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}x^n \quad (1.1)$$

计算 e^x 的值时,常常取级数前 n 项的部分和作为近似公式,如取:

$$e^x \approx 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 = \sum_{n=0}^3 \frac{1}{n!}x^n \quad (1.2)$$

这样,用(1.2)式代替(1.1)式计算 e^x 的近似值与精确值之间的误差是由于截去(1.1)式后的无穷多项产生的,故称为截断误差,其截断误差为 $\sum_{n=4}^{\infty} \frac{1}{n!}x^n$ 。

(4) 舍入误差 计算机中参加运算的数据与原始数据之间的差距称为舍入误差。由于计算机的字长有限,参加运算的数据只能具有有限位,因此原始数据在计算机中表示时可能会产生误差,当然每次运算后又会产生新的误差,这些误差都是舍入误差。

例如, $e=2.718\ 281\ 828\ 459\ 0\cdots$, $\pi=3.141\ 592\ 653\ 589\ 793\ 2\cdots$ 等都不可能用全部小数位参加计算机运算。在参加计算机计算过程中,均是取这些数的近似值进行运算,那么

由此得到的近似值与精确值之间的误差就是舍入误差。

我们还要注意以下两点：

(1) 在计算方法中，通常至少有上述一种误差出现，而事实上在大多数数值方法中，会有上述多种误差同时出现。

(2) 在计算方法中，我们要研究的是计算误差而不是固有误差。

1.2.2 绝对误差和相对误差

有两种衡量误差大小的方法：一是绝对误差；二是相对误差。

设某一个量的精确值是 x ，其近似值为 x^* ，则 x 与 x^* 的差：

$$e(x^*) = x - x^* \quad (1.3)$$

称为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。(1.3)式也可以写成

$$x = e(x^*) + x^* \quad (1.4)$$

注意，绝对误差 $e(x^*)$ 可正也可负。当 $e(x^*) > 0$ 时， x^* 称为 x 的弱(不足)近似值；当 $e(x^*) < 0$ 时， x^* 称为 x 的强(过剩)近似值。 $|e(x^*)|$ 的大小标志着 x^* 的精确度，一般地，对同一个量的不同近似值， $|e(x^*)|$ 越小， x^* 的精确度就越高。

实际上，我们只能知道近似值 x^* ，而一般不知道精确值 x ，但可以根据测量与计算的情况，对绝对误差的大小范围做出估计。也就是说，可以指出一个正数 ϵ ，使

$$|e(x^*)| = |x - x^*| \leq \epsilon \quad (1.5)$$

我们称 ϵ 为近似值 x^* 的一个绝对误差界，简称误差界。

(1.5)式还可以写成

$$x^* - \epsilon \leq x \leq x^* + \epsilon \quad (1.6)$$

这表明精确值 x 在区间 $[x^* - \epsilon, x^* + \epsilon]$ 内。

例如，对于 $\pi = 3.141\ 592\ 653\ 589\ 793\ 2\dots$ ，取 $\pi^* = 3.14$ ，则

$$|e(\pi^*)| = |\pi - \pi^*| < 0.002$$

那么 0.002 就是近似值 π^* 的一个绝对误差界。

在许多情况下，绝对误差的大小不能完全刻画近似值的精确程度。

例如，若 $x = 100(\text{cm})$ ， $x^* = 99(\text{cm})$ ，则 $e(x^*) = 1(\text{cm})$ ；而若 $y = 100\ 000\ 0(\text{cm})$ ， $y^* = 995\ 000(\text{cm})$ ，则 $e(y^*) = 5000(\text{cm})$ 。从表面上看，后者的绝对误差是前者的 5000 倍。但是，前者每 1 cm 长度产生了 0.01 cm 的误差，而后者每 1 cm 长度仅产生 0.005 cm 的误差，所以，后者要比前者精确度高一些。由此可见，要确定一个量的近似值的精确程度，除了要看误差的大小外，往往还应该考虑该量本身的大小。

规定

$$e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x} = \frac{x - x^*}{x} \quad (1.7)$$

称为近似值 x^* 的相对误差。

相对误差说明了近似值 x^* 的绝对误差 $e(x^*)$ 与精确值 x 本身比较时所占的比例，它反映了一个近似值的精确程度，相对误差越小，精确度就越高。相对误差是用百分数表示的。事实上，由于一个量的精确值往往是不知道的，因此还常常将 x^* 的相对误差 $e_r(x^*)$ 定义为

$$e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*} \quad (1.8)$$

当 $e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x^*}$ 较小, 比如 $|e_r(x^*)| = \left| \frac{e(x^*)}{x^*} \right| < \frac{1}{2}$ 时, 有

$$\begin{aligned} \left| \frac{e(x^*)}{x^*} - \frac{e(x^*)}{x} \right| &= \left| \frac{e(x^*)(x - x^*)}{xx^*} \right| = \left| \frac{e^2(x^*)}{x^*(x^* + e(x^*))} \right| \\ &= \left| \frac{\left(\frac{e(x^*)}{x^*} \right)^2}{1 + \frac{e(x^*)}{x^*}} \right| < 2 \left(\frac{e(x^*)}{x^*} \right)^2 \end{aligned}$$

它是 $e_r(x^*)$ 的平方项级, 可忽略不计。

一般来说, 计算出相对误差是比较困难的, 然而, 可以像绝对误差那样估计它的大小范围, 即可以指出一个正数 ϵ_r , 使得

$$|e_r(x^*)| \leq \epsilon_r \quad (1.9)$$

称 ϵ_r 为近似值 x^* 的一个相对误差界。

根据以上定义, 上例中 $e_r(x^*) = 1\%$ 与 $e_r(y^*) = 0.5\%$ 分别是 x^* 与 y^* 的相对误差。

1.2.3 有效数字

我们在表示一个近似值时, 为了能反映它的精确度, 经常用到“有效数字”的概念。

若 x 的某一近似值 x^* 的绝对误差界是某一位的半个单位, 则从这一位直到左边第一个非零数字为止的所有数字都称为 x^* 的有效数字。

具体地说, 对于数 x , 经四舍五入后得到它的近似值 x^* 为

$$x^* = \pm 0.x_1x_2 \cdots x_n \times 10^m$$

其中, $x_i (i=1, 2, \dots, n)$ 是 $0 \sim 9$ 之间的任一个数, 但 $x_1 \neq 0$; n 为正整数; m 为整数。若 $|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$, 则 x^* 是 x 具有 n 位有效数字的近似值, 或称 x^* 精确到第 n 位, x_1, x_2, \dots, x_n 都是 x 的有效数字。

例如, $\pi = 3.141\ 592\ 65 \cdots$, 取 $\pi_1^* = 3.142$ 作为 π 的近似值时,

$$|e(\pi_1^*)| = |\pi - 3.142| = 0.000\ 407\ 35 \cdots < 0.0005 = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

即 $m-n=-3$, $m=1$, $n=4$, 所以 3.142 作为 π 的近似值有 4 位有效数字。

当取 $\pi_2^* = 3.141$ 作为 π 的近似值时,

$$|e(\pi_2^*)| = |\pi - 3.141| = 0.000\ 592\ 65 \cdots < 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

即 $m-n=-2$, $m=1$, $n=3$, 所以 3.141 作为 π 的近似值有 3 位有效数字。

综上所述, 若近似值 x^* 的绝对误差的绝对值小于某一位的半个单位, 那么从该位到 x^* 的第一位非零数字一共有几位, 则 x^* 就有几位有效数字。

关于有效数字, 我们还要注意以下几点:

(1) 若用四舍五入法取精确值 x 的前 n 位作为近似值 x^* , 则 x^* 必有 n 位有效数字。但是, 若 x^* 仅准确到某位数字, 而将这位数字以后的数字进行四舍五入, 则得到的不一定是有效数字。

例如,若 $x=5.0145$, $x_1^*=5.01$, $x_2^*=5.015$, 则 x_1^* 、 x_2^* 分别是 x 的不同近似值,由上可知, x_1^* 有三位有效数字,而 x_2^* 也仅有三位有效数字,其中由四舍五入得到 x_2^* 的千分位上的 5 不是有效数字。

(2) 有效数字位数相同的两个近似数,绝对误差界不一定相同。

例如,已知 $x_1^*=107\ 06$, $x_2^*=11.104$, 二者都有 5 位有效数字,但 x_1^* 的绝对误差界为 $\frac{1}{2} \times 1$, x_2^* 的绝对误差界为 $\frac{1}{2} \times 10^{-3}$, 显然不同。

(3) 把任何数字乘 10^p ($p=0, \pm 1, \pm 2, \dots$) 等于移动该数的小数点,它并不影响其有效数字的位数。

例如, $g=9.80\text{ m/s}^2$ 具有 3 位有效数字,而 $g=0.009\ 80 \times 10^3\text{ m/s}^2$ 也同样具有 3 位有效数字。但是, $9.8 \times 10^3\text{ m/s}^2$ 与 $9.80 \times 10^3\text{ m/s}^2$ 的有效数字是不同的, $9.8 \times 10^3\text{ m/s}^2$ 有 2 位有效数字, $9.80 \times 10^3\text{ m/s}^2$ 有 3 位有效数字。同理, 0.1、0.10、0.100 等数的有效数字也是不同的。

如果整数并非全是有效数字,则可以用浮点数表示。如 8 000 000 的绝对误差限不超过 500,即 $\frac{1}{2} \times 10^3$, 则应把 8 000 000 表示为 $x^*=8000 \times 10^3$ 或 0.8000×10^7 。若记为 $x^*=8\ 000\ 000$, 则表示其绝对误差限不超过 $\frac{1}{2} \times 10^0$ 。

例 1.1 某地粮食产量为 888 万吨,表示方式不同,绝对误差也不同。

解 888 万吨 $=888 \times 10^4$ 吨 $=0.888 \times 10^7$ 吨,此时绝对误差为 $\frac{1}{2} \times 10^4$ 吨,即 $\frac{1}{2}$ 万吨。

888 万吨 $=8\ 880\ 000$ 吨,此时绝对误差为 $\frac{1}{2}$ 吨。

(4) 有效数字越多,绝对误差就越小,相对误差也就越小。

设近似值 $x^*=\pm 0.x_1x_2\dots x_n \times 10^m$, $x_1 \neq 0$, 并且可以确定 x^* 具有 n 位有效数字,其绝对误差限为 $\epsilon=\frac{1}{2} \times 10^{m-n}$, 则在 m 相同的情况下, n 越大 ϵ 就越小,所以,有效数字位数越多误差就越小。

同样,可以对具有 n 位有效数字的近似值 x^* 的相对误差做出如下估计:

$$x_1 \cdot 10^{m-1} \leq |x^*| \leq (x_1 + 1) \cdot 10^{m-1}$$

所以

$$|e_r(x^*)| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{x_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2x_1} \cdot 10^{-(n-1)} \quad (1.10)$$

可见,有效数字越多,相对误差也就越小。

例 1.2 要使 $\sqrt{20}$ 的近似值的相对误差限小于 0.1%, 要取几位有效数字?

解 设取 n 位有效数字,由(1.10)式可得 $|e_r(x^*)| \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)}$, 由于 $\sqrt{20}=4.4\dots$, 因此 $x_1=4$, 由于要求

$$|e_r(x^*)| \leq 0.125 \times 10^{-(n-1)} < 10^{-3} = 0.1\%$$

即只要 n 取 4 就行,因此对 $\sqrt{20}$ 的近似值取 4 位有效数字,其相对误差限就小于 0.1%。此

时由开方表得 $\sqrt{20} \approx 4.472$ 。

1.2.4 数据误差在运算中的传播

设 x^* 、 y^* 分别是初始数据 x 、 y 的近似值, 即

$$x = x^* + e(x^*), \quad y = y^* + e(y^*)$$

其中, $e(x^*)$ 、 $e(y^*)$ 分别为 x^* 、 y^* 的绝对误差。

下面考察用 x^* 、 y^* 代替 x 、 y 时, 函数值 $z=f(x, y)$ 会产生怎样的误差。

假设 $e(x^*)$ 、 $e(y^*)$ 的绝对值都很小, 而且函数 $z=f(x, y)$ 可微, 记此时 z 的近似值为 $z^*=f(x^*, y^*)$, 则有

$$e(z^*) = z - z^* = f(x, y) - f(x^*, y^*)$$

上式可近似地表示为

$$e(z^*) \approx \left. \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \right|_{(x^*, y^*)} e(x^*) + \left. \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \right|_{(x^*, y^*)} e(y^*) \quad (1.11)$$

而且

$$\begin{aligned} e_r(z^*) &= \frac{e(z^*)}{z^*} \approx \frac{x^*}{z^*} \left. \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \right|_{(x^*, y^*)} \frac{e(x^*)}{x^*} + \frac{y^*}{z^*} \left. \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \right|_{(x^*, y^*)} \frac{e(y^*)}{y^*} \\ &= \frac{x^*}{z^*} \left. \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \right|_{(x^*, y^*)} e_r(x^*) + \frac{y^*}{z^*} \left. \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \right|_{(x^*, y^*)} e_r(y^*) \end{aligned} \quad (1.12)$$

从(1.11)式容易得到, 在进行数值运算时, 初始数据误差与计算结果产生的误差之间有以下关系:

(1) 若 $f(x, y) = x \pm y$, 则

$$e(x^* \pm y^*) = e(x^*) \pm e(y^*) \quad (1.13)$$

(2) 若 $f(x, y) = xy$, 则

$$e(x^* y^*) \approx y^* e(x^*) + x^* e(y^*) \quad (1.14)$$

(3) 若 $f(x, y) = \frac{x}{y}$, 则

$$e\left(\frac{x^*}{y^*}\right) \approx \frac{y^* e(x^*) - x^* e(y^*)}{(y^*)^2} \quad (1.15)$$

从(1.12)式容易得到以下关系:

(1) 若 $f(x, y) = x \pm y$, 则

$$e_r(x^* \pm y^*) = \frac{x^*}{x^* \pm y^*} e_r(x^*) + \frac{y^*}{x^* \pm y^*} e_r(y^*) \quad (1.16)$$

(2) 若 $f(x, y) = xy$, 则

$$e_r(x^* y^*) \approx e_r(x^*) + e_r(y^*) \quad (1.17)$$

(3) 若 $f(x, y) = \frac{x}{y}$, 则

$$e_r\left(\frac{x^*}{y^*}\right) \approx e_r(x^*) - e_r(y^*) \quad (1.18)$$

1.3 数值计算中应注意的问题

数值计算中的误差分析是一个既复杂而又不可避免的问题。为了保证数值计算结果的正确性,就必须把误差控制在比较小的范围内,也就是要求掌握误差产生、传播的规律。可是实际上,目前尚无有效的方法对误差做出定量的估计,所以,在解决具体数值问题时,往往首先需要对该问题做出定性的分析。

1.3.1 算法的数值稳定性

如果在用某种算法进行数值计算过程中,舍入误差在一定条件下能够控制在一定范围内(即舍入误差的增长不会影响结果的可靠性),则称该算法是数值稳定的,否则称该算法为数值不稳定的。

例 1.3 对 $n=0, 1, 2, \dots$, 计算积分 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx$ 。

解 由于

$$I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n}$$

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln 6 - \ln 5 = \ln 1.2$$

取 $I_0 = \ln 1.2 \approx 0.182$, 用如下递推公式计算:

$$\textcircled{1} \begin{cases} I_0^* = 0.182 \\ I_n^* = \frac{1}{n} - 5I_{n-1}^* \end{cases} \quad (n = 1, 2, \dots, 8) \quad (1.19)$$

得到(精确到小数点后第 3 位)

$$I_1^* \approx 0.090, I_2^* \approx 0.050, I_3^* \approx 0.083, I_4^* \approx -0.165$$

$$I_5^* \approx 1.025, I_6^* \approx -4.958, I_7^* \approx 24.933, I_8^* \approx -124.540$$

令 $\epsilon_n = I_n - I_n^*$, 则有 $\epsilon_n = -5\epsilon_{n-1}$ 。可见,若从 I_{n-1}^* 计算 I_n^* , 其误差将以每步 5 倍的速度增长,从而有

$$\epsilon_n = (-5)^n \epsilon_0$$

这表明计算公式①是数值不稳定的。

现在换一种方案,将(1.19)式倒过来算。

取 $I_9^* = 0.018$, 得到递推公式:

$$\textcircled{2} \begin{cases} I_9^* = 0.018 \\ I_{n-1}^* = \frac{1}{5n} - \frac{1}{5} I_n^* \end{cases} \quad (n = 8, 7, \dots, 1)$$

计算可得

$$I_8^* \approx 0.019, I_7^* \approx 0.021, I_6^* \approx 0.024, I_5^* \approx 0.029$$

$$I_4^* \approx 0.034, I_3^* \approx 0.043, I_2^* \approx 0.058, I_1^* \approx 0.088$$

且此时