数值分析与方法

SHUZHI FENXI YU FANGFA

王 红 魏 新 赵建涛 编著

HEUP 哈爾濱工程大學出版社

数值分析与方法

王　红　魏　新　赵建涛　编著

HEUP 哈尔滨工程大学出版社

内容简介

本书系统地介绍了数值分析与方法的基本思想、基本理论和方法，以及相关算法的 MATLAB 实现。全书内容共分七章，主要包括绪论、插值法、函数逼近与曲线拟合、数值微分和数值积分、线性方程组的解法、非线性方程的解法、常微分方程数值解法。

本书可作为理工科相关专业的高年级本科生和研究生"数值分析"或"计算方法"等课程的教材，也可作为相关领域的教学、科研、生产人员的参考用书。

图书在版编目(CIP)数据

数值分析与方法/王红，魏新，赵建涛编著. —哈尔滨：哈尔滨工程大学出版社，2013.8
ISBN 978-7-5661-0676-6

Ⅰ.①数… Ⅱ.①王…②魏…③赵… Ⅲ.①数值分析-高等学校-教材 Ⅳ.①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 202081 号

出版发行	哈尔滨工程大学出版社
社　　址	哈尔滨市南岗区东大直街 124 号
邮政编码	150001
发行电话	0451-82519328
传　　真	0451-82519699
经　　销	新华书店
印　　刷	哈尔滨工业大学印刷厂
开　　本	787mm×1 092mm　1/16
印　　张	11.75
字　　数	300 千字
版　　次	2013 年 8 月第 1 版
印　　次	2013 年 8 月第 1 次印刷
定　　价	25.00 元

http://www.hrbeupress.com
E-mail:heupress@hrbeu.edu.cn

前　　言

现代科学技术的兴起是20世纪最重要的科学进步之一。进入21世纪,随着现代科学技术的快速发展和计算机的广泛使用,科学计算已与科学理论和科学实验并列为现代科学的三大组成部分。

数值分析是一门理论性很强、应用性很广的课程。我国绝大多数的理工科院校都开设了不同层次的数值分析课程或计算方法课程。目前数值分析的教材主要分为两种:一是将数值分析仅作为一门数学理论课,而对它的数值实验讲述不够,应用性不强;二是主要借助各种计算机语言,如C语言、Fortran语言等,或数学计算软件,如Matlab、Maple、Mathematica等进行编程求解,但对其求解问题的基本原理几乎不作介绍,这样,当解决实际问题遇到困难时,就不知如何处理了。

“数值分析与方法”将数学科学与计算机技术紧密结合在一起,系统地介绍了数值分析与计算方法的基本思想、基本原理和基本方法,并对主要的数值算法都给出了Matlab程序。本书力求处理好数学理论和应用方法之间的衔接,以理论为基础,以方法为中心,以例题为载体,围绕方法给出简单的、典型的数值例题,通过例题进一步理解计算对象、计算公式、计算的限定条件和计算步骤。本书可作为理工科院校相关专业的本科生、研究生“数值分析”课程或“计算方法”课程的基本教材,也可作为相关专业的教学、科研、生产人员的参考用书。

本书主要是在黑龙江省齐齐哈尔市科学技术研究项目“GYGG－09013－2”与“RKX2010－05－2”的研究基础上,利用了大量的数值计算方法进行计算所得到的相应的结果,并吸收了近几年理学院信息与计算科学系数值分析课程教学中使用的讲义主要内容的情况下完成的。在本书的写作过程中,得到了理学院院、系领导的支持和各位同仁、专家的帮助,在此一并表示感谢。

本书第2章、第5章与第6章由王红编写;第3章与第4章由魏新编写;第1章与第7章由赵建涛编写。全书由王红负责统稿。

由于作者水平有限,书中一定还存在缺点与不妥之处,恳请读者批评指正。

编著者

2013年1月

目　　录

第1章 绪　　论

1.1 数值分析研究的对象与特点

数值分析(Numerical Analysis)是计算数学的一个重要组成部分,计算数学是数学科学的一个重要分支,它研究用计算机求解各种数学问题的数值计算方法、理论分析与软件实现.科学技术和工程技术领域中的诸多问题的求解一般都需要经历图1.1所示的过程,即某个领域的专家首先提出实际问题,运用各种数学理论、方法建立起问题中不同量之间的联系,进而得到数学模型,通过合理的模型假设条件对其求解.但通常所建立的数学模型解析解是很难得到的,因此,就需要我们设计合理、高效、可靠的数值计算方法,利用计算机强大的计算功能编程,计算出结果,这一过程就是计算数学的任务,也是数值分析研究的对象.

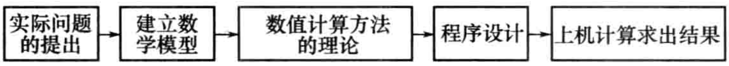

图1.1　问题求解的一般过程

所谓数值问题是指有限个输入数据(问题的自变量、原始数据)与有限个输出数据(待求解数据)之间函数关系的一个明确无歧义的描述.

值得注意的是数学模型不一定是数值问题,例如求解一阶常微分方程初值问题

$$\begin{cases} y' = f(x,y), \\ y(x_0) = y_0, \end{cases} a \leqslant x \leqslant b$$

要求得到定义于区间[0,1]的函数解析表达式 $y=y(x)$,这实际上是要求出无穷多个输出,因而它不是数值问题.但当我们要求得到在 n 个点 $x_1,x_2,\cdots,x_n \in [0,1]$ 处的函数值 $y(x_1),y(x_2),\cdots,y(x_n)$ 的近似值时,便成为一数值问题,该数值问题可以通过欧拉(Euler)方法求得其数值解.数值分析的任务之一就是提供求得数值问题近似解的方法.

数值分析的内容包括函数近似计算的插值法、函数逼近与曲线拟合、数值微分与数值积分、线性方程组的解法、非线性方程(组)数值解法和常微分方程数值解法.它是一门内容丰富、研究方法深刻、有自身理论体系的课程,既有纯数学的高度抽象性与严密科学性的特点,又有应用广泛性与实验的高度技术性的特点,是利用计算机编程计算解决现实生活中实际问题的一门实用性很强的数学计算课程.它与纯数学课程不同,概括起来有以下几个突出特点:

第一,面向计算机.要根据计算机特点提供切实可行的有效算法,即算法必须是计算机可直接处理的运算,如加、减、乘、除运算和逻辑运算等;

第二,有可靠的理论分析.所得到的解能任意逼近精确解并满足给定精度要求,对近似算法要保证其收敛性和数值稳定性,还要对误差进行分析,这些都建立在相应数学理论的基础上;

第三,要有好的计算复杂性.计算复杂性包括时间复杂性(节省时间)和空间复杂性(节

省存储量)；

第四,要有数值实验. 一个好的算法必须经过数值实验检验,证明其行之有效.

1.2 数值计算的误差

1.2.1 误差来源与分类

用计算机解决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,因而是近似的. 我们把数学模型与实际问题之间出现的这种误差称为模型误差(Model Error). 只有实际问题提法正确,建立数学模型时又抽象、简化得合理,才能得到好的结果. 由于这种误差难于用数量表示,通常都假定数学模型是合理的,这种误差可忽略不计,在“数值分析”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、长度、电压等,这些参量显然也包含误差. 这种由观测产生的误差称为观测误差(Measurement Error),在“数值分析”中也不讨论这种误差. 数值分析只研究用数值方法求解数学模型产生的误差.

当数学模型不能得到精确解时,通常要用数值方法求它的近似解,其近似解与精确解之间的误差称为截断误差(Truncation Error)或方法误差.

例如,函数 $f(x)$ 用泰勒(Taylor)多项式

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

近似代替,则数值方法的截断误差是

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

有了求解数学问题的计算公式以后,用计算机作数值计算时,由于计算机的字长有限,原始数据在计算机上表示会产生误差,计算过程又可能产生新的误差,这种误差称为舍入误差(Round off Error). 例如,用 3.141 59 近似代替 π,产生的误差

$$R = \pi - 3.141\,59 = 0.000\,002\,6\cdots$$

就是舍入误差.

此外,由原始数据或计算机中的十进制数转化为二进制数产生的初始误差对数值计算也将造成影响,分析初始数据的误差通常也归结为舍入误差.

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. 本书只讨论算法的截断误差与舍入误差,为此,先引入误差的概念.

1.2.2 误差

定义 1.1 设 x 为准确值,x^* 为 x 的一个近似值,称

$$e = x - x^*$$

为近似值 x^* 的绝对误差(Absolute Error),简称误差.

误差是有量纲的,可正可负,误差是无法计算的,但可估计出它的一个上界 ε. 即

$$|e| = |x - x^*| \leqslant \varepsilon$$

称 ε 是近似值 x^* 的绝对误差限,简称误差限. 显然误差限是不唯一的,ε 越小,表示近似值

x^*的精度越高，显然有

$$x^* - \varepsilon \leqslant x \leqslant x^* + \varepsilon$$

即准确值 x 一定在区间$[x^* - \varepsilon, x^* + \varepsilon]$内，常记作 $x = x^* \pm \varepsilon$.

例如，用毫米刻度的米尺测量一长度 x，读出和该长度接近的刻度 $x^* = 125$ mm，x^* 为 x 的近似值，它的误差限是 0.5 mm，虽然，我们仍然不知道准确值是多少，但我们知道准确值 x 介于 124.5 与 125.5 之间，即$|125 - x| \leqslant 0.5$ mm，则有 $124.5 \leqslant x \leqslant 125.5$.

绝对误差限并不足以表示近似值的好坏. 例如设 $x_1 = 100 \pm 1$，$x_2 = 1\,000 \pm 1$，x_1 与 x_2 的绝对误差限相同，但显然 100 之内差 1 与 1 000 之内差 1 比较，后者比前者精确.

定义 1.2 设 x 为准确值，x^* 为准确值 x 的近似值，称绝对误差与准确值之比为近似值 x^* 的相对误差(Relative Error)，记为 e_r，即

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

由于计算过程中准确值 x 总是未知的，故一般取相对误差为

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

显然，上例中 x_2^* 的相对误差为 0.001，x_1^* 的相对误差为 0.01. 可以证明，当$|e_r|$很小时，$\frac{e}{x} - \frac{e}{x^*}$是 e_r 的高阶无穷小，可以忽略不计. 所以取绝对误差与近似值之比为相对误差是合理的.

类似于绝对误差的情况，如果存在正数 ε_r，使得

$$|e_r| = \left|\frac{e}{x^*}\right| \leqslant \varepsilon_r$$

则称 ε_r 为 x^* 的相对误差限. 可以看出，相对误差是个相对数，是无量纲的，并可正可负，而相对误差也是不唯一的.

例 1.1 设 $x^* = 1.25$ 是由准确值 x 经过四舍五入得到的近似值，求 x^* 的绝对误差限和相对误差限.

解 由已知可得：$1.245 \leqslant 1.25 < 1.255$，近似

$$-0.005 \leqslant x - x^* < 0.005$$

因此，绝对误差限为 $\varepsilon = 0.005$，相对误差限 $\varepsilon_r = 0.004$.

1.2.3 有效数字

在计算中，当准确值 x 有很多位数时，常常按"四舍五入"原则得到 x 的近似值 x^*，例如无理数 $\pi = 3.141\,592\,653\,589\,7\cdots$，若按四舍五入原则分别取两位和四位小数时，则得 $\pi \approx 3.14$，$\pi \approx 3.141\,6$. 不管取几位得到的近似值，其绝对误差不会超过末位数的半个单位，即

$$|\pi - 3.14| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2}, \quad |\pi - 3.141\,6| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-4}.$$

定义 1.3 如果近似值 x^* 的误差限是 0.5×10^{-n}，则称 x^* 准确到小数点后第 n 位，并从第一个非零数字到这一位的所有数字均称为有效数字(Significant Figure).

例 1.2 设 $x^* = \sqrt{3} = 1.732\,050\,8\cdots$，$x_1 = 1.73$，$x_2 = 1.732\,1$，$x_3 = 1.732\,0$ 是 x^* 的近似值，问它们分别有几位有效数字？

解 由 $|x^* - x_1| = |\sqrt{3} - 1.73| = 0.002\,050\,8\cdots = 0.205\,08\cdots \times 10^{-2} \leqslant 0.5 \times 10^{-2}$,故 x_1 有 3 位有效数字.

由 $|x^* - x_2| = |\sqrt{3} - 1.732\,1| = 0.000\,049\,1\cdots = 0.491\cdots \times 10^{-4} \leqslant 0.5 \times 10^{-4}$,故 x_2 有 5 位有效数字.

由 $|x^* - x_3| = |\sqrt{3} - 1.732\,0| = 0.000\,050\,8\cdots = 0.508\cdots \times 10^{-4} \leqslant 0.5 \times 10^{-3}$,故 x_3 有 4 位有效数字.

例 1.3 按四舍五入原则写出下列各数

$$187.932\,5, 0.037\,855\,51, 8.000\,033, 2.718\,281\,8$$

具有 5 位有效数字的近似数.

解 按定义,上述各数具有 5 位有效数字的近似数分别是

$$187.93, 0.037\,856, 8.000\,0, 2.718\,3$$

一般地,任何一个实数 x 经过四舍五入后得到的近似值 x^* 都可写成如下的标准形式

$$x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m \tag{1.1}$$

所以,当其绝对误差限满足

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

时,则称近似值 x^* 具有 n 位有效数字,其中 m 为整数,a_1 是 1 到 9 中的某个数字,$a_2, a_3, \cdots, a_n$ 是 0 到 9 中的数字.

注 8.000 033 的 5 位有效数字近似数是 8.000 0,而不是 8,因为 8 只有 1 位有效数字.

例 1.4 问 $x_1 = 3.142$, $x_2 = 3.141$, $x_3 = \dfrac{22}{7}$分别作为 π 的近似值各具有几位有效数字?

解 已知 $\pi = 3.141\,592\,653\,589\,7\cdots$,则

因为 $|\pi - x_1| = 0.000\,40\cdots \leqslant \dfrac{1}{2} \times 10^{-3} = 0.000\,5$,所以 x_1 具有 4 位有效数字;

因为 $|\pi - x_2| = 0.000\,59\cdots \leqslant \dfrac{1}{2} \times 10^{-2} = 0.005$,所以 x_2 具有 3 位有效数字;

因为 $|\pi - x_3| = 0.001\,26\cdots \leqslant \dfrac{1}{2} \times 10^{-2} = 0.005$,所以 x_3 具有 3 位有效数字.

注 用四舍五入得到的数都是有效数字,有效数字的位数与小数点的位置无关. 有效数字越多,误差越小,计算结果越精确.

下面给出有效数字与绝对误差的关系:

定理 1.1 (1) 设 x 的近似值 $x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m$ 有 n 位有效数字,则此近似值 x^* 的绝对误差限为

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \tag{1.2}$$

(2) 若近似值 x^* 有 n 位有效数字,则其相对误差限满足

$$|\varepsilon_r| \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} \tag{1.3}$$

反之,若近似值 x^* 的相对误差限满足

$$|\varepsilon_r| \leqslant \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)} \tag{1.4}$$

则 x^* 至少有 n 位有效数字.

证 (1)结论显然. (2)由(1.1)式可知

$$a_1 \times 10^{m-1} \leqslant |x^*| \leqslant (a_1+1) \times 10^{m-1}$$

故

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

反之,由

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

知,x^* 至少有 n 位有效数字.

例 1.5 要使 $\sqrt{26}$ 的近似值的相对误差小于 0.1%,问至少应取几位有效数字?

解 $\sqrt{26}$ 的近似值的首位非零数字是 $a_1=5$,假设应取 n 位有效数字,则由式(1.3)

有
$$|\varepsilon_r| \leqslant \frac{1}{2 \times 5} \times 10^{-(n-1)} < 0.1\%$$

解得 $n>3$,故取 $n=4$ 即可满足要求. 也就是说,只要 $\sqrt{26}$ 的近似值具有 4 位有效数字,就能保证 $\sqrt{26} \approx 5.099$ 的相对误差小于 0.1%.

例 1.6 已知近似数 x^* 的相对误差限为 0.000 2,问 x^* 至少有几位有效数字?

解 由于 x^* 的首位数未知,但必有 $1 \leqslant a_1 \leqslant 9$,则由式(1.4)

有
$$|\varepsilon_r| \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)} = 0.000\,2$$

得

$$10^{n-1} = \frac{1}{4 \times (a_1+1)} \times 10^4, n = 5 - \lg 4 - \lg(a_1+1),$$

解 $4-\lg 4 \leqslant n \leqslant 5-\lg 8$,得 $3.397\,9 \leqslant n \leqslant 4.096\,9$,故取 $n=3$.

1.2.4 数值运算的误差估计

两个近似值 x_1^* 与 x_2^*,其误差限分别为 $\varepsilon(x_1^*)$ 及 $\varepsilon(x_2^*)$,它们进行加、减、乘、除运算得到的误差限分别为

$$\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) = \varepsilon(x_1^*) + \varepsilon(x_2^*);$$
$$\varepsilon(x_1^* x_2^*) \approx |x_1^*|\varepsilon(x_2^*) + |x_2^*|\varepsilon(x_1^*);$$
$$\varepsilon(x_1^*/x_2^*) \approx \frac{|x_1^*|\varepsilon(x_2^*) + |x_2^*|\varepsilon(x_1^*)}{|x_2^*|^2}(x_2^* \neq 0).$$

更一般的情况,当自变量有误差时,计算函数值必然会引起误差,这种数据误差可用微分学的相关知识解决.

当 $y=f(x)$ 是一元函数时,设 x 的近似值为 x^*,$y=f(x)$ 在点 x^* 可微,则

$$e(y^*) = y - y^* = f(x) - f(x^*) = \Delta y \approx \mathrm{d}y = f'(x^*)(x-x^*)$$

于是,绝对误差限可取为

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)|\varepsilon(x^*)$$

而相对误差则为

$$e_r(y^*) = \frac{e(y^*)}{y^*} \approx \frac{\mathrm{d}y^*}{y^*} = \mathrm{d}(\ln y^*) = \mathrm{d}(\ln f(x^*))$$

当f是多元函数时,例如计算$y=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$,设$x_1,x_2,\cdots,x_n$的近似值为$x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*$,$y=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$在点$(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$可微,则当数据误差较小时,$y$的绝对误差为

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

于是绝对误差限为

$$\varepsilon(y^*) \approx \sum_{k=1}^{n}\left|\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}{\partial x_k}\right|\varepsilon(x_k^*)$$

相对误差为

$$e_r(y^*) = \frac{e(y^*)}{y^*} \approx \frac{\mathrm{d}y^*}{y^*} = \mathrm{d}(\ln y^*) = \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}{\partial x_k}\right)\frac{e(x_k^*)}{f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}$$

而y^*的相对误差限为

$$\varepsilon_r(y^*) = \frac{\varepsilon(y^*)}{|y^*|} \approx \sum_{k=1}^{n}\left|\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}{\partial x_k}\right|\frac{\varepsilon(x_k^*)}{f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}$$

例 1.7 已知$x_1=1.03\pm0.01$,$x_2=0.45\pm0.01$,试求用公式$y=x_1^2+\frac{1}{2}\mathrm{e}^{x_2}$计算$y$时产生的绝对误差和相对误差.

解 $e(x_1)=0.01$,$e(x_2)=0.01$,$\frac{\partial y}{\partial x_1}=2x_1$,$\frac{\partial y}{\partial x_2}=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{x_2}$,故绝对误差为

$$e(y) \approx \mathrm{d}(y) = \frac{\partial y}{\partial x_1}e(x_1) + \frac{\partial y}{\partial x_2}e(x_2) = 2.06\times0.01 + 0.5\times\mathrm{e}^{0.45}\times0.01 = 0.028\,441\,6$$

相对误差为

$$e_r(y) = \frac{e(y)}{y} \approx \frac{\mathrm{d}y}{y} = \frac{0.028\,441\,6}{1.03^2 + 0.5\times\mathrm{e}^{0.45}} = 0.015\,415$$

1.3 误差定性分析与避免误差危害

1.3.1 病态问题与条件数

对一个数值问题本身如果输入数据有微小扰动(即误差),引起输出数据(即问题解)相对误差很大,这就是病态问题. 它是数学问题本身性质决定的,与算法无关,也就是说对病态问题,用任何算法直接计算都将产生不稳定性.

例 1.8 解线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = \frac{11}{6} \\ \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{3}x_2 + \frac{1}{4}x_3 = \frac{13}{12} \\ \frac{1}{3}x_1 + \frac{1}{4}x_2 + \frac{1}{5}x_3 = \frac{47}{60} \end{cases}$$

此方程组的精确解为 $x_1=x_2=x_3=1$. 在计算机上运算,其所有输入数据都是有限位小数,若取三位有效数字,用消元法求解得 $x_1=1.089, x_2=0.488, x_3=0.491$,误差很大,这表明输入数据有微小扰动,输出数据误差很大,故此问题是病态问题.

病态和良态是相对的,没有严格界线,通常判断问题是否病态,可用条件数大小来衡量,条件数越大问题病态越严重. 例如计算函数值 $f(x)$ 的条件数 $\mathrm{cond}(f(x))$ 可定义为

$$c_p=\mathrm{cond}(f(x))=\frac{|xf'(x)|}{|f(x)|}$$

这里输入数据为 x,输出数据为 $f(x)$,当 x 有扰动 $\Delta x=x-x^*$ 时,条件数 $\mathrm{cond}(f(x))$ 为 $f(x)$ 的相对误差 $\dfrac{\Delta f(x)}{f(x)}$ 与 x 的相对误差 $\dfrac{\Delta x}{x}$ 之比,当 $\Delta x\to 0$ 时,得

$$\mathrm{cond}(f(x))=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{\left|\dfrac{\Delta f(x)}{f(x)}\right|}{\left|\dfrac{\Delta x}{x}\right|}=\frac{|xf'(x)|}{|f(x)|}$$

根据定义,条件数越大,$f(x)$ 的相对误差越大,当 $\mathrm{cond}(f(x))\gg 1$ 时就认为问题是病态的.

1.3.2 算法的数值稳定性

一个算法,如果在一定的条件下,其舍入误差在整个运算过程中能够得到控制或者舍入误差的增长不影响产生的结果,则称该算法是数值稳定的,否则称为数值不稳定.

例 1.9 建立积分 $I_n=\int_0^1\dfrac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x, n=0,1,\cdots,20$ 的递推关系式,并研究它的误差传递.

解 由

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

和

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

可建立下列递推公式

$$I_0=\ln 6-\ln 5\approx 0.1823$$

$$I_n=\frac{1}{n}-5I_{n-1},(n=1,2,\cdots,20) \tag{1.5}$$

计算出 I_0 后,由递推关系式可逐次求出 $I_1,I_2,\cdots,I_{20}$ 的值. 但在计算 I_0 时有舍入误差,因此在使用递推关系式时,实际算出的都是近似值 I_n^* $(n=1,2,\cdots,20)$. 即

$$\begin{cases}I_0^*=I_0-e_0\\ I_n^*=\dfrac{1}{n}-5I_{n-1}^*,(n=1,2,\cdots,20)\end{cases}$$

现在来研究误差是如何传递的.

设 I_0^* 有误差 e_0,假设计算过程中不产生新的舍入误差,则由式(1.5)可得

$$e_n=I_n-I_n^*=-5I_{n-1}+5I_{n-1}^*=-5e_{n-1}(n=1,2,\cdots)$$

从而有

$$e_n = (-5)^n e_0$$

即原始数据 I_0^* 的误差 e_0 对第 n 步的影响是使该误差扩大了 5^n 倍. 当 n 较大时,误差将淹没真值,因此递推公式(1.5)是数值不稳定的.

现在从另一方向使用这一公式:

$$I_{n-1} = \frac{1}{5}\left(\frac{1}{n} - I_n\right),(n = 20,19,\cdots,1) \tag{1.6}$$

只要给出 I_{20}的一个近似值 I_{20}^*,即可递推得到 $I_{19}^*,I_{18}^*,\cdots,I_0^*$.

类似于上面的推导可得

$$e_{n-1} = -\frac{1}{5}e_n, e_0 = \left(-\frac{1}{5}\right)^n e_n$$

每递推一步误差将缩小到原值的$\frac{1}{5}$,所以递推公式(1.6)是数值稳定的.

由于 $x \in [0,1]$时

$$\frac{x^n}{6} < \frac{x^n}{5+x} < \frac{x^n}{5}$$

所以有估计式

$$\frac{1}{6(n+1)} < I_n < \frac{1}{5(n+1)}$$

于是

$$\frac{1}{6 \times 21} < I_{20} < \frac{1}{5 \times 21}$$

取

$$I_{20} \approx \frac{\frac{1}{126} + \frac{1}{105}}{2} \approx 0.008\,730\,158\,7$$

可得另一算法

$$\begin{cases} I_{20} \approx 0.008\,730\,158\,7 \\ I_{n-1} = \frac{1}{5}\left(\frac{1}{n} - I_n\right),(n = 20,19,\cdots,1) \end{cases}$$

定义 1.4 一种数值方法,若原始数据有误差,而在计算的过程中,由于舍入误差的传播,使得近似计算结果与准确值相差很大,则称这种数值方法是不稳定的. 否则,在计算过程中,若舍入误差得到控制,近似计算结果能逼近准确值,则称这种数值方法是稳定的.

由此可见,对于同一数学问题,使用的算法不同,效果也大不相同,只有选用数值稳定性好的算法,才能求得较准确的结果.

1.3.3 避免误差危害的若干原则

1. 防止相近两个数相减

由两数差 $u = x - y$ 的相对误差关系式

$$e_r(u) = e_r(x-y) = \frac{e(x) - e(y)}{x - y}$$

可以看出,当 x 与 y 很接近时,u 的相对误差会很大,有效数字位数将严重丢失. 例如,$x = 532.65$,$y = 532.52$ 都具有五位有效数字,但 $x - y = 0.13$ 只有两位有效数字. 这说明应当

尽量避免出现这类运算，最好是改变算法，防止这种现象产生. 通常是根据不同情况分别采用因式分解、分子分母有理化、三角函数恒等式及其他恒等式等方法.

例如，当 x 充分大时，应作变换

$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}},\frac{1}{x}-\frac{1}{1+x}=\frac{1}{x(x+1)}$$

当 x 接近零时，应作变换

$$1-\cos x=2\sin^2\frac{x}{2},\frac{1-\cos x}{\sin x}=\frac{\sin x}{1+\cos x}$$

当 x_1,x_2 很接近时，应作变换

$$\ln x_1-\ln x_2=\ln\frac{x_1}{x_2}$$

例 1.10 利用四位数学用表求 $x=1-\cos 2°$的近似值.

解 查表得 $\cos 2°\approx 0.999\,4$，$x=1-\cos 2°\approx 1-0.999\,4=0.000\,6=x^*$，而

$$|x-x^*|=|\cos 2°-0.999\,4|\leqslant 0.5\times 10^{-4}.$$

故 $x^*=0.000\,6$ 有 1 位有效数字，此做法损失了部分有效数字.

如果改用公式

$$\begin{aligned}x&=1-\cos 2°=2\sin^2 1°\approx 2\times(0.017\,5)^2\\&=6.125\times 10^{-4}=x^*\end{aligned}$$

由定理 1.1 可知，$x^*=6.125\times 10^{-4}\leqslant 0.5\times 10^{-2}$，至少有两位有效数字.

2. 避免大数“吃掉”小数现象

大数“吃掉”小数，是指计算机在计算过程中，由于要把参加运算的数对阶，即把两数都写成绝对值小于 1 但阶码相同的数，而导致较小的数加不到较大的数中. 这种现象有时会影响计算结果的可靠性. 如 $a=10^9+1$，必须改写成

$$a=0.1\times 10^{10}+0.000\,000\,000\,1\times 10^{10}$$

如果计算机只能表示 8 位小数，则算出 $a=0.1\times 10^{10}$，大数“吃掉”了小数.

3. 避免绝对值太小的数作除数

由式

$$e\left(\frac{x}{y}\right)=\frac{ye(x)-xe(y)}{y^2}$$

可知，当 $|y|\ll|x|$或 y 接近零时，$e\left(\frac{x}{y}\right)$可能很大. 这说明在实际计算中，应尽可能避免除数的绝对值远小于被除数的绝对值的除法或用接近于 0 的数作除数，否则会严重影响计算结果的精度，减少有效位数.

4. 简化计算步骤，减少运算次数

求一个问题的数值解往往有多种算法，不同的算法需要不同的计算量，而计算量的大小会影响误差的积累.

计算多项式

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

的值. 若直接计算 a_ix^i 再逐项相加，一共需作

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

次乘法和 n 次加法. 若采用秦九韶算法

$$\begin{cases} s_n = a_n \\ s_k = xs_{k+1} + a_k, (k = n-1, n-2, \cdots, 1, 0) \\ p_n(x) = s_0 \end{cases}$$

只需作 n 次乘法和 n 次加法就可算出 $p_n(x)$ 的值. 此法工作量少,使用的是递推公式,更易于编程.

习　题　1

1. 下列各数都是经过四舍五入得到的近似数,试分别指出它们具有几位有效数字?

$$a = 3.4021, b = 0.041, c = 798.6, d = 12.340, e = 9 \times 1.0$$

2. 已知近似数 x^* 有 2 位有效数字,试求其相对误差限.

3. 已知近似数的相对误差限为 0.3%,则 x^* 至少有几位有效数字?

4. 设 $x > 0$,若 x 的相对误差为 δ,求(1)$f(x) = \ln x$ 的绝对误差;(2)$f(x) = \sqrt[n]{x}$ 的相对误差.

5. 设 $x = \sqrt{70}$,试问它的近似数 x^* 至少取几位有效数字方能保证其相对误差小于 0.1%?

6. 设 x_1^*, x_2^* 分别是 x_1, x_2 的近似值,试证乘积 $x_1^* x_2^*$ 的绝对误差与相对误差为

$$e(x_1^* x_2^*) \approx x_2^* e(x_1^*) + x_1^* e(x_2^*)$$

$$e_r(x_1^* x_2^*) \approx e_r(x_1^*) + e_r(x_2^*).$$

第2章 插 值 法

2.1 引 言

在生产和科学研究中，常用函数 $y=f(x)$ 来表示某种内在规律的变化关系. 但在实际问题中，经常会遇到这样的情况，虽然理论上知道函数在 $y=f(x)$ 某个区间 $[a,b]$ 上是连续的，但是有时很难找到它的解析表达式，其中相当一部分函数是通过实验或观测得到的. 如函数 $y=f(x)$ 在某个区间 $[a,b]$ 上可得到有限个不同的点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 上的值 $y_0,y_1,\cdots,y_n$，想通过这些有限个点来分析 $y=f(x)$ 的形态，研究其变化的规律，通常是比较困难的. 因此，我们希望对给定的或得到的函数值来找出 $f(x)$；若不行，则构造一个函数 $y=p(x)$ 来近似代替 $y=f(x)$，使 $p(x)$ 既能反映 $f(x)$ 的特性，又便于计算，且利用 $p(x)$ 代替 $f(x)$ 的误差能尽量小. 在构造函数 $p(x)$ 时，通常选一类较简单的函数（如代数多项式或分段代数多项式）作为 $p(x)$，并使 $p(x)$ 在点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 上满足 $p(x_i)=y_i(i=0,1,\cdots,n)$. 寻求满足上述条件的 $p(x)$ 的问题称为插值问题.

下面给出插值法的定义.

定义 2.1 设函数 $y=f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上有定义，且已知在点 $a\leqslant x_0<x_1<\cdots<x_n\leqslant b$ 上的值 $y_0,y_1,\cdots,y_n$，若存在一简单函数 $p(x)$，使

$$p(x_i)=y_i,\ i=0,1,\cdots,n \tag{2.1}$$

成立，则称 $p(x)$ 为 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的插值函数，点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 称为插值节点，$[a,b]$ 称为插值区间. 求插值函数 $p(x)$ 的方法称为插值法. 若 $p(x)$ 是次数不超过 n 的代数多项式，即

$$p(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$$

其中 $a_i(i=0,1,\cdots,n)$ 为实数，则称 $p(x)$ 为插值多项式，相应的插值法称为多项式插值；若 $p(x)$ 为分段的多项式，则称其为分段插值；若 $p(x)$ 为三角多项式，则称其为三角插值.

从几何上看，插值法就是讨论求曲线 $y=p(x)$，使其通过给定的 $n+1$ 个点 (x_i,y_i)，$i=0,1,\cdots,n$，并用它近似已知曲线 $y=f(x)$，如图 2.1 所示.

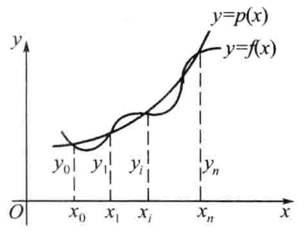

图 2.1 插值

插值法是一种古老的数学方法，早在一千多年前的隋唐时期制定历法时就应用了二次插值，隋朝刘焯（公元 6 世纪）已将等距节点、二次插值应用于天文计算. 但插值理论是 17 世纪微积分产生以后才逐步发展起来的，牛顿的等距节点插值公式及差商插值公式都是当时的重要成果，随着近现代计算机的广泛使用和航空、航海、机械等实际问题的需要，使插值法在理论上和实践上都得到了进一步发展，成为目前常用的方法. 其不仅直接应用于生产实际和科学研究，而且也是学习其他数值计算方法的基础.