

国家工科数学课程教学基地
研究生教学用书

数值分析

Numerical Analysis

电子科技大学应用数学学院 钟尔杰 黄廷祝 主编

高等教育出版社

国家工科数学课程教学基地
研究生教学用书

数 值 分 析

Numerical Analysis

电子科技大学应用数学学院

钟尔杰 黄廷祝 主编

高等_教育出版社

内容简介

本书是为高年级本科生、工科硕士研究生和数学类专业学生开设的“数值分析”(数值计算方法)课程编写的教材。其内容包括数值分析的基本概念、非线性方程求根方法、解线性方程组的直接法、线性方程组的迭代解法、数据插值方法、数据拟合与函数逼近、数值积分与数值微分、常微分方程的数值解法。内容覆盖了国家教委工科研究生数学课程教学指导小组所制定的工科硕士生数值分析课程教学基本要求。

教材注重理论与实践相结合,既注重数值方法理论,也注重数值试验课题介绍。特别对于数值计算中的常用方法(如迭代方法、对连续问题的离散化方法等)的应用给出了丰富的例子和数值试验。书中每章后附有习题和数值计算的应用实例。重视数值试验、应用实例是本书的特色之一。

本书也可供从事科学与工程计算的工作者参考。

图书在版编目(CIP)数据

数值分析 / 钟尔杰, 黄廷祝主编. —北京: 高等教育出版社, 2004.7

ISBN 7-04-014426-3

I. 数... II. ①钟... ②黄... III. 数值计算 - 研究生 - 教材 IV. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 031804 号

策划编辑 李艳霞 责任编辑 李蕊 封面设计 李卫青 责任绘图 尹文军

版式设计 张岚 责任校对 张颖 责任印制 杨明

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010-64054588
社址	北京市西城区德外大街 4 号	免费咨询	800-810-0598
邮政编码	100011	网 址	http://www.hep.edu.cn
总机	010-82028899		http://www.hep.com.cn

经 销	新华书店北京发行所
印 刷	国防工业出版社印刷厂

开 本	787×960 1/16	版 次	2004 年 7 月第 1 版
印 张	15	印 次	2004 年 7 月第 1 次印刷
字 数	250 000	定 价	21.20 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

前　　言

计算问题是现代社会各个领域普遍存在的共同问题,工业、农业、交通运输、医疗卫生、文化教育等,各部門都有许多数据需要计算,通过数据计算和分析,以便掌握事物发展的规律。现代科学技术需要强有力地计算能力,人类计算能力的提高包括两个方面,一是计算机性能的提高,二是计算方法效率的提高。近几十年来,人类使用计算机解决的应用问题在不断变化,应用范围不断扩张、应用问题的规模不断增加、应用问题本身也越来越复杂。有不少例子表明,计算的应用需求超过了计算机性能提高速度,现代人要解决的大多数是大规模、非线性、多因素的复杂计算问题,而且对解决问题的时间又有严格限制,面对这种情况,传统的数学方法几乎无能为力,这是对算法研究的挑战。

当1946年世界上第一台电子计算机(ENIAC)诞生时,很少有人能想到计算机科学技术的发展和应用会有今天这样波澜壮阔的情形。而人类研制ENIAC的最初目的是为了解决数值计算问题(火炮发射的弹道计算)。研究计算问题的解决方法和有关数学理论问题的学科就是数值分析。数值分析又称为数值计算方法,在计算机作为人类计算工具的时代,数值分析的主要任务是研究有关的数学和逻辑问题怎样由计算机加以有效解决。

计算机和数值计算方法两个方面的进步,极大提高了人类的计算能力,从而引起科学方法论的巨大变革。如果说伽利略和牛顿在科学发展史上奠定了实验和理论这两个科学方法支柱,那么从冯·诺依曼开始,科学计算逐步走上了人类科学活动的前沿,它已成为第三个方法支柱。科学计算与实验、理论共同成为科学方法论的基本环节。它们互相补充,互相依赖,而又相对独立,不可缺少。人们可以用数值计算来模拟现实世界的各种过程,部分地取代或作为实验的补充、检验理论模型、进行预测、模拟实际无法重复或无法进行实验的现象。由于有了这一手段,大大增强了人们科学研究的能力,促进了不同学科之间交叉渗透,缩短了基础研究到应用开发的过程。

这本教材是为研究生和应用数学专业及信息与计算科学专业本科生所编写的。力求全面、系统地介绍数值分析的理论,注重数值计算方法在工程技术中的应用,参考国内外近年来有代表性的文献并结合作者的研究

究经历,反映数值分析的前沿研究成果。在基本概念、基本理论和方法的论述上尽可能精练简洁,把数值分析方法与数值试验结合起来,把数学思想与计算机算法结合起来,把计算方法与计算机程序设计结合起来。全书共分八章,主要内容包括:数值分析的基本概念、非线性方程求根方法、解线性方程组的直接法、线性方程组的迭代解法、数据插值方法、数据拟合与函数逼近、数值积分与数值微分、常微分方程的数值解法。每章后附有数值实验的应用课题,供读者参考。本书的目标是使读者通过学习和实践掌握数值分析的主要内容和基本算法,能够分析、理解、改进、构造算法,并在计算机上用数学软件 MATLAB 实现。

本书由钟尔杰、黄廷祝主编,参加编写的人员有钟尔杰、黄廷祝、房秀芬、刘福体,由钟尔杰、黄廷祝统稿。

电子科技大学研究生院和应用数学学院领导在教材编写过程中给予我们大力支持,借此机会向他们表示衷心感谢。

限于水平和时间,书中有不少疏漏之处,恳请读者批评指正。

编　　者

2003 年 12 月

目 录

第一章 数值分析的基本概念	1
§ 1.1 误差和有效数字	1
§ 1.2 数值运算的误差估计	6
§ 1.3 数值计算中的一些基本原则	9
应用: Koch 分形曲线算法	15
习题一	17
第二章 非线性方程求根方法	19
§ 2.1 二分法	20
§ 2.2 迭代法的一般理论	23
§ 2.3 牛顿迭代法	30
应用: 计算圆周率算法	40
习题二	43
第三章 解线性方程组的直接法	45
§ 3.1 高斯消元法	46
§ 3.2 列主元消元法与三角分解	53
§ 3.3 直接三角分解法	56
§ 3.4 向量和矩阵范数	64
§ 3.5 方程组直接方法的误差估计	67
应用: 小行星轨道问题	70
习题三	73
第四章 线性方程组的迭代解法	76
§ 4.1 雅可比迭代和高斯 - 赛德尔迭代	76
§ 4.2 雅可比迭代和高斯 - 赛德尔迭代的收敛性	81
§ 4.3 超松弛迭代法	88
§ 4.4 分块迭代法	91
§ 4.5 共轭梯度算法	92
应用: 平面温度场计算问题	99
习题四	101
第五章 数据插值方法	103
§ 5.1 拉格朗日插值	103

§ 5.2 均差与牛顿插值	112
§ 5.3 分段线性插值与多元函数插值	116
§ 5.4 埃尔米特插值	121
§ 5.5 样条插值	125
应用:最速降线问题	133
习题五	137
第六章 数据拟合与函数逼近	138
§ 6.1 曲线拟合的最小二乘法	138
§ 6.2 正交多项式	147
§ 6.3 最佳平方逼近	152
应用:三角函数的有理逼近	157
习题六	159
第七章 数值积分与数值微分	160
§ 7.1 插值型求积公式与代数精确度	161
§ 7.2 复合求积公式及算法	168
§ 7.3 外推原理与龙贝格算法	176
§ 7.4 高斯型求积公式及其复合公式	179
§ 7.5 数值微分	185
应用:通信卫星覆盖地球面积算法,计算定积分的蒙特卡罗 方法	189
习题七	194
第八章 常微分方程的数值解法	196
§ 8.1 简单的数值方法	197
§ 8.2 龙格-库塔方法	203
§ 8.3 单步法的收敛性和稳定性	211
§ 8.4 线性多步法	216
§ 8.5 一阶常微分方程组和高阶方程	221
应用:追击曲线问题	224
习题八	228
参考文献	230

第一章 数值分析的基本概念

数值分析研究求解数学模型的算法及有关理论,它伴随计算机的发展而发展.在工程实际和科学的研究中,寻求数学问题(数学模型)的解是很重要的.对绝大多数问题来说,要得到解析解并非易事,例如描述洛伦兹吸引子的常微分方程组初值问题,只能用计算机求出数值解.从应用角度看,求得一个数学模型的数值解已经足够了.

用于求数学模型数值解的方法是数值型算法设计的数学基础,数值型算法是对某些给定的数据,按照一定的运算次序进行运算的序列.对一个待求解的问题,我们可以选择已有的算法,也可以创造新的算法.在数值计算中,常用迭代技术、离散化技术以及对离散数据的连续化技术来处理问题.例如,对一个微分方程(或积分方程)问题 $Lu = f$,经离散化后得到一个大型线性方程组 $L_h u_h = f_h$,如果用直接法(如格拉姆(Gram)法则或高斯(Gauss)消元法等)求解,将引出计算量大或误差积累严重等一系列问题,所以通常用迭代法求解大型方程组.迭代法的求解过程包括:初值的选取、按迭代格式进行迭代计算以及对迭代过程的收敛判定.在科学和工程计算中用迭代法求解的大型方程组有高达几百万甚至上千万阶的规模.由此可见,数值方法是求解数学模型的不可缺少的途径和手段,在信息技术迅猛发展的今天,计算机发展的速度往往使人预料不及,但实际应用需求的增长更快.对于大规模、非线性的复杂计算问题,目前使用的数值方法还有待于进一步的研究和发展.

评价算法的两个明显标准是速度和精度,速度涉及计算量,精度涉及误差.众所周知,实数系(全体实数集合)是无限、稠密、连续的集合,而机器数系(全体机器数集合)是有限、离散的集合.计算机在数值计算过程中,按固定的“字长”工作,实现对数据的处理.所以,在数值计算中必须考虑误差对算法的影响.

§ 1.1 误差和有效数字

一、误差的来源和分类

在科学计算的过程中,建立数学模型、观测并获取有关数据、建立近

似计算方法(数值方法)、进行数值计算是四个主要的环节.由此可知,在科学计算中误差的来源有:模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差四个方面.

从实际问题建立数学模型时要分析各种因素,但往往忽略一些次要因素,因此即使求得数学模型准确解,它与实际问题的解仍有误差,这类误差称为模型误差.模型误差是由实际问题抽象、简化为数学问题(数学模型)时所引起的误差.

一般的数学模型包含若干个参数,如温度、长度、电压等物理量,这些参数的值往往由观测得到,观测难免发生误差,这类误差称为观测误差.

当一个数学问题难以求出准确解时,往往退而求其近似解(用近似方法化简数学模型),由此引起的误差称为截断误差(又称方法误差).

例如用有限项级数

$$S = x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5$$

对正弦函数作近似计算,其截断误差为

$$R = \sin x - S.$$

由于计算机所表示的实数的位数有限,因而只能对有限位数字进行运算,通常用四舍五入的办法取近似值,由此引起的误差,称为舍入误差.

例如用 3.141 592 6 来代替圆周率 π ,其舍入误差为: $R = \pi - 3.141 592 6$.

在计算过程中,计算误差直接影响计算结果.数值分析所研究的计算误差是截断误差(即所谓误差估计)和舍入误差(它将引起数值方法准确解和计算解之间的误差).

例如考虑通信卫星对地球表面积的覆盖问题,下面公式

$$\iint_D \frac{R}{\sqrt{R^2 - x^2 - y^2}} dx dy$$

只是对实际问题的一种逼近(D 为覆盖面在 $x-y$ 平面的投影, R 为地球半径).这里涉及几方面的误差.首先,将地球考虑成一个球体,用球体表面积代替地球表面积是过分理想化的模型,这是模型误差;其次,如果取地球半径的值为 $R = 6 370$ km,这只是一个综合测量的结果,这是观测误差;再次,数值积分的计算不可避免会产生计算误差.计算的准确性将依赖于上面所说的所有逼近.

二、绝对误差与相对误差

定义 1.1 设实数 x^* 为某一数据的准确值,它的近似值为 x ,称 $e(x) = x - x^*$ 为 x 的绝对误差,简称误差.当 $x^* \neq 0$ 时,称 $e_r(x) =$

$\frac{e(x)}{|x^*|}$ 为 x 的相对误差.

注意,这样定义的误差可正可负,当误差为正时近似值偏大,称为强近似值;当误差为负时近似值偏小,称为弱近似值.

绝对误差和相对误差是刻画近似值精确度的重要概念. 绝对误差仅考虑近似值与准确值的差异,而相对误差还考虑数据本身的大小,相对误差常用百分数表示. 一般情况下,准确值 x^* 未知,已知的是它的近似值 x ,从而绝对误差和相对误差也未知. 在实际测量或计算时,可根据具体情况估计出 $e(x)$ 或 $e_r(x)$ 的大小范围. 例如使用毫米刻度的米尺测量某物体长度,由四舍五入法则获得近似值 x ,其误差绝对值不会超过 0.5 mm,即

$$|e(x)| = |x - x^*| \leq 0.5 \text{ mm},$$

从而物体长度的准确值(以 mm 为单位)满足不等式

$$x - 0.5 \leq x^* \leq x + 0.5,$$

通常记为

$$x^* = x \pm 0.5 \text{ mm},$$

这里的小正数 0.5 mm 称为近似值 x 的绝对误差限.

定义 1.2 设 x 为准确值 x^* 的近似值,如果 $|e(x)| = |x^* - x| \leq \epsilon(x)$,则称 $\epsilon(x)$ 为 x 的绝对误差限. 当 $x^* \neq 0$ 时,称 $\epsilon_r(x) = \frac{\epsilon(x)}{|x^*|}$ 为 x 相对误差限.

当绝对误差限 $\epsilon(x)$ 已知时,通常相对误差限 $\epsilon_r(x)$ 仍然是未知的,所以在处理具体问题时,由于准确值未知可以用近似值代替,即

$$\epsilon_r(x) = \frac{\epsilon(x)}{|x|} \quad (x \neq 0).$$

例 1.1 某种零件的质量取决于零件某个参数 x ,设参数的标定值为 1 个单位. 在生产过程中允许零件参数有一定误差,由此将零件分成 A,B,C 三个等级,等级由相对误差限决定,A 等为 1%,B 等为 5%,C 等为 10%. 试确定三个等级的零件参数允许变化的范围.

解 由题设,标定值 $x^* = 1$,根据相对误差限定义

$$\frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \epsilon_r$$

有

$$x^*(1 - \epsilon_r) \leq x \leq x^*(1 + \epsilon_r).$$

将三个相对误差限分别代入,得三个等级的零件参数允许变化范围如下:

A 等: $x \in [0.99, 1.01]$, B 等: $x \in [0.95, 1.05]$, C 等: $x \in [0.9, 1.1]$.

例 1.2 测量一物体的长度是 954 cm, 问测量数据的相对误差限是多大?

解 因为实际问题所截取的近似数, 其绝对误差限一般不超过最小刻度的半个单位, 所以当 $x = 954$ cm 时, 有 $\epsilon(x) = 0.5$ cm, 而 x 的相对误差满足

$$\epsilon_r(x) \leq \frac{0.5}{954} = 0.000\ 524\ 1 \cdots < 0.000\ 53 = 0.053\%.$$

所以测量数据的相对误差限可确定为

$$\epsilon_r(x) = 0.053\%.$$

由上可知, 凡是由准确值经过四舍五入而得到的近似值, 其绝对误差限等于近似值末位数的半个单位.

三、有效数字

当某一数据有无穷多位数时, 人们通常按“四舍五入”原则取它的前有限位数字作为近似值. 例如考虑 π 的不同近似值. 取三位数 $x_3 = 3.14$ 有

$$|\pi - x_3| \leq 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2},$$

取五位数 $x_5 = 3.141\ 6$ 有

$$|\pi - x_5| \leq 0.000\ 05 = \frac{1}{2} \times 10^{-4}.$$

不同的近似值所取的位数(字长)各不相同, 但它们的绝对误差限都不超过末位数的半个单位. 通常, 若近似值 x 的绝对误差限是某一位上的半个单位, 该位到 x 的第一位非零数字一共有 n 位, 则称近似值 x 有 n 位有效数字.

在科学计算中, 常用规格化浮点数的形式表示实数, 如

$$0.003\ 120\ 7, 293.704\ 8$$

两个数可表示为

$$0.312\ 07 \times 10^{-2}, 0.293\ 704\ 8 \times 10^3,$$

这样一个数的数量级就一目了然. 这种允许小数点位置浮动的方法称为数的浮点表示.

数的浮点表示由两部分组成, 第一部分是尾数部, 如前面两数中的 0.312 07 和 0.293 704 8; 第二部分是定位部, 用来确定小数点的位置, 如

前面的 10^{-2} 和 10^3 . 对非零数而言, 规格化浮点数规定尾数的第一位数(这里规定小数点后第一位)非零, 定位部主要由阶码 -2 或 3 确定, 因此, 一个浮点数可用尾数和阶码表示. 例如在计算机程序中常用如下形式

$$0.312\ 07e-2, 0.293\ 704\ 8e+3$$

表示规格化浮点数 $0.312\ 07 \times 10^{-2}, 0.293\ 704\ 8 \times 10^3$. 尾数部与字长或有效数位数有关, 下面给出有效数字的定义.

定义 1.3 设 x 可表示为规格化浮点数形式

$$x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m, \quad (1.1)$$

其中 a_1, a_2, \dots, a_n 都是 $0 \sim 9$ 中的任一整数, 且 $a_1 \neq 0$. 若 x 的绝对误差满足:

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}, \quad (1.2)$$

则称近似数 x 具有 n 位有效数字.

定理 1.1 设 x 是有效数位数为 n 的近似数, 其表达式为式(1.1), 则它的相对误差满足

$$|e_r(x)| \leq \frac{5}{a_1} \times 10^{-n}; \quad (1.3)$$

反之若近似数 x 的相对误差满足

$$|e_r(x)| \leq \frac{5}{a_1 + 1} \times 10^{-n}, \quad (1.4)$$

则 x 至少有 n 位有效数字.

证 由(1.1)知,

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

结合(1.2)有

$$|e_r(x)| = \left| \frac{x - x^*}{x} \right| \leq \frac{0.5 \times 10^{m-n}}{a_1 \times 10^{m-1}} = \frac{5}{a_1} \times 10^{-n},$$

所以式(1.3)成立. 反之若 x 的相对误差满足式(1.4), 则有

$$|e(x)| = |e_r(x)| \cdot |x| \leq \frac{5 \times 10^{-n}}{a_1 + 1} \times (a_1 + 1) \times 10^{m-1} = 0.5 \times 10^{-n},$$

所以 x 具有 n 位有效数字.

定理 1.1 揭示了数据的有效数位数与该数据近似值的相对误差之间的关系. 根据式(1.3), 由于 $a_1 \geq 1$ 可知, 一个具有 n 位有效数字的近似数 x 其相对误差满足

$$|e_r(x)| \leq 5 \times 10^{-n}.$$

这说明有效数位数与相对误差的阶码相对应, 例如, 2 位有效数字相对误

差大约为 5%，而 3 位有效数字的相对误差大约 5‰。 x 的有效数字位数越多，相对误差越小。

例 1.3 要使 $\sqrt{30}$ 的近似值 x 的相对误差限不超过 0.1%， x 应取几位有效数字？

解 因 $\sqrt{30}$ 的第一位数字为 5，所以近似数 x 的第一位数字 $a_1 = 5$ ，根据定理 1.1，当 x 取 n 位有效数字时有

$$|e_r(x)| \leq \frac{5}{a_1} \times 10^{-n} = 10^{-n},$$

因此要使相对误差限不超过 0.1%，只需不等式 $10^{-n} \leq 0.001$ 成立即可。此时取 $n = 3$ ，有 $e_r(x) \leq 0.1\%$ 。所以当 x 取 3 位有效数字时，其相对误差限小于 0.1%。

例 1.4 已知 $\sqrt{20}$ 的近似数 x 相对误差限为 0.5%，试问 x 至少有几位有效数字？

解 因 $\sqrt{20}$ 的第一位数字为 4，所以 x 的第一位数字 $a_1 = 4$ ，根据定理 1.1，当

$$|e_r(x)| \leq \frac{5}{a_1 + 1} \times 10^{-n}$$

成立时， x 有 n 位有效数字。而 $n = 2$ 时

$$\epsilon_r(x) = 0.5\% = \frac{5}{1000} = \frac{5}{9+1} \times 10^{-2} < \frac{5}{4+1} \times 10^{-2},$$

所以近似数 x 至少有 2 位有效数字。

§ 1.2 数值运算的误差估计

数值运算中误差的产生与传播的情况非常复杂，对误差估计也比较困难。这里主要介绍用函数的泰勒(Taylor)公式来估计误差的方法，这也是一种常用的方法。

一、函数计算的误差估计

设一元函数 $y = f(x)$ ，自变量准确值为 x^* ，对应的函数准确值为 $y^* = f(x^*)$ ，自变量近似值 x 的误差为 $e(x)$ ，误差限为 $\epsilon(x)$ ，函数近似值的误差为 $e(y)$ ，误差限为 $\epsilon(y)$ 。利用泰勒公式

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

其中 ξ 介于 x 和 x^* 之间。取绝对值得

$$|\epsilon(y)| = |y^* - y| \leq |x^* - x| |f'(x)| + \frac{(x^* - x)^2}{2} |f''(\xi)|.$$

忽略高阶项,得函数的误差限

$$\epsilon(y) \approx |f'(x)| \epsilon(x). \quad (1.5)$$

当 $y \neq 0, x \neq 0$ 时,有相对误差估计

$$\epsilon_r(y) \approx \frac{|xf'(x)|}{|f(x)|} \epsilon_r(x). \quad (1.6)$$

对多元函数 $z = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, 设函数准确值为 $z^* = f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$, 利用多元函数泰勒公式,仍然有误差估计

$$\epsilon(z) \approx \sum_{k=1}^n \left| \frac{\partial f}{\partial x_k} \right| \epsilon(x_k), \quad (1.7)$$

相对误差限为

$$\epsilon_r(z) \approx \sum_{k=1}^n \left| x_k \frac{\partial f}{\partial x_k} \right| \frac{\epsilon_r(x_k)}{|z|}. \quad (1.8)$$

二、算术运算的误差估计

设两个近似数 x_1 与 x_2 的误差限分别为 $\epsilon(x_1)$ 和 $\epsilon(x_2)$, 则对这两个数的加、减、乘、除运算,可以利用多元函数的误差估计,得

$$\begin{cases} \epsilon(x_1 \pm x_2) = \epsilon(x_1) + \epsilon(x_2), \\ \epsilon(x_1 \cdot x_2) \approx |x_1| \epsilon(x_2) + |x_2| \epsilon(x_1), \\ \epsilon\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \frac{|x_1| \epsilon(x_2) + |x_2| \epsilon(x_1)}{|x_2|^2}. \end{cases} \quad (1.9)$$

例 1.5 设 $a = 2.31, b = 1.93, c = 2.24$ 都是有三位有效数字的近似数,令 $p = a + bc$,求 $\epsilon(p)$ 和 $\epsilon_r(p)$,并判断 p 有几位有效数字.

解 由于 a, b, c 都有三位有效数字,故

$$\epsilon(a) = \epsilon(b) = \epsilon(c) = 0.005,$$

所以

$$\begin{aligned} \epsilon(p) &= \epsilon(a) + \epsilon(bc) \approx \epsilon(a) + |b| \epsilon(c) + |c| \epsilon(b) \\ &= 0.005 + 1.93 \times 0.005 + 2.24 \times 0.005 = 0.02585. \end{aligned}$$

而

$$p = 2.31 + 1.93 \times 2.24 = 6.6332,$$

故

$$\epsilon_r(p) = \frac{\epsilon(p)}{|p|} \approx \frac{0.02585}{6.6332} \approx 0.0039 = 0.39\%.$$

因为 $\epsilon(p) \approx 0.02585 < 0.05$, 所以 $p = 6.6332$ 中只有两位有效数字.

例 1.6 已测得某场地长和宽分别为 $x = 110$ m, $y = 80$ m, 已知 $\epsilon(x) = 0.2$ m, $\epsilon(y) = 0.1$ m. 试求该场地面积的绝对误差限和相对误差限.

解 因面积 $S = xy$, $\frac{\partial S}{\partial x} = y$, $\frac{\partial S}{\partial y} = x$, 所以绝对误差限

$$\epsilon(S) \approx \left| \frac{\partial S}{\partial x} \right| \epsilon(x) + \left| \frac{\partial S}{\partial y} \right| \epsilon(y) = 80 \times 0.2 + 110 \times 0.1 = 27 \text{ m}^2,$$

相对误差限

$$\epsilon_r(S) = \frac{\epsilon(S)}{|S|} = \frac{\epsilon(S)}{|xy|} \approx \frac{27}{80 \times 110} = 0.0031 = 0.31\%.$$

例 1.7 如果开方只取四位有效数字, 求二次方程 $x^2 - 16x + 1 = 0$ 的较小正根, 要求有四位有效数字.

解 方程 $x^2 - 16x + 1 = 0$ 的较小正根为 $x_1 = 8 - \sqrt{63}$, 取四位有效数字 $\sqrt{63} \approx 7.937$, 则

$$x_1 = 8 - \sqrt{63} \approx 8 - 7.937 = 0.063,$$

此时

$$\epsilon(x_1) = \epsilon(8) + \epsilon(7.937) = 0 + 0.0005,$$

故 $x_1 \approx 0.063$ 只有两位有效数字. 若改用算法

$$x_1 = 8 - \sqrt{63} = \frac{1}{8 + \sqrt{63}} \approx \frac{1}{15.937} \approx 0.06274706657464,$$

由于

$$\epsilon(x_1) \approx \frac{\epsilon(15.937) + 15.937\epsilon(1)}{(15.937)^2} < \frac{0.0005}{225} < 0.000005,$$

所以后一种算法所得的最小正根 $x_1 \approx 0.06274706657464$ 具有四位有效数字.

例 1.8 设 $P(x) = (x-1)(x-2)(x-3)(x-4)(x-5)$, 五次方程 $P(x) = 0$ 的五个根分别为 $x_1 = 1, x_2 = 2, x_3 = 3, x_4 = 4, x_5 = 5$. 现将方程中 x^4 的系数做微小改变(扰动), 变方程为 $P(x) - 0.01x^4 = 0$, 计算可得新的五个根

$$z_1 = 0.9996, \quad z_2 = 2.0290, \quad z_3 = 2.8332,$$

$$z_4 = 4.5641 - 0.2296i, \quad z_5 = 4.5641 + 0.2296i.$$

这说明系数有很小扰动, 将会引起方程的根很大变化. 试分析微小扰动对各个根的影响.

解 原方程的五个根分别为 $x_k = k$ ($k = 1, 2, 3, 4, 5$). 令

$$p(x, \delta) = P(x) - \delta x^4.$$

显然方程 $p(x, \delta) = 0$ 的根都是 δ 的函数, 设为 $z_k(\delta)$ ($k = 1, 2, 3, 4, 5$). 且

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} z_k(\delta) = x_k = k \quad (k = 1, 2, 3, 4, 5),$$

所以

$$z_k(\delta) - x_k = z_k(\delta) - z_k(0) \approx \delta \times \frac{dz_k}{d\delta} \Big|_{\delta=0}.$$

利用 $p(z_k(\delta), \delta) = 0$ 求导数

$$P'(z_k) \frac{dz_k}{d\delta} - z_k^4 = 0,$$

求解得

$$\frac{dz_k}{d\delta} = \frac{z_k^4}{P'(z_k)},$$

当 $\delta \rightarrow 0$ 时有

$$C_k = \frac{dz_k}{d\delta} \Big|_{\delta=0} = \frac{k^4}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^5 (k-j)}.$$

计算列表如下:

表 1-1

k	1	2	3	4	5
C_k	0.04	-2.67	20.25	-42.67	26.04

其中 C_k 是误差放大系数, 即

$$z_k(\delta) - x_k \approx C_k \delta.$$

由此可见, 除了第一个根以外, 微小扰动对其余四个根的影响都是不可忽视的.

§ 1.3 数值计算中的一些基本原则

在数值计算中借助误差估计对误差传播情况作适当分析, 为使误差不增长, 可以得出一些基本原则.

一、避免绝对值小的数作除数

这一原则主要指尽量避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除

法. 误差分析如下:

设 $z = \frac{y}{x}$ ($x \neq 0$), 如果 x 的绝对值远小于 y 的绝对值, 由于

$$\epsilon\left(\frac{y}{x}\right) \approx \frac{|x|\epsilon(y) + |y|\epsilon(x)}{|x|^2} = \frac{\epsilon(y)}{|x|} + \frac{|y|}{|x|^2}\epsilon(x),$$

这表明当 x 的绝对值很小时, 用 y 除以 x 所得结果的绝对误差可能很大.

二、避免两个相近的数据相减

如果 $y \approx x$, 现分析两个数的近似数作减法所得结果的误差. 设 $z = y - x$, 利用误差估计

$$\epsilon(z) = \epsilon(y) + \epsilon(x)$$

得相对误差估计

$$\epsilon_r(z) \leq \frac{|y|}{|z|}\epsilon_r(y) + \frac{|x|}{|z|}\epsilon_r(x).$$

当 $y \approx x$ 时, 有 $z \approx 0$, 计算结果的相对误差限可能很大, 导致数值计算结果的有效数位数减少.

例 1.9 利用四位函数表计算 $1 - \cos 2^\circ$, 试用不同方法计算并比较计算结果.

解 记 $x = 1$, $y = \cos 2^\circ$, $z = x - y$. 用四位函数表直接计算

$$1 - \cos 2^\circ \approx 1 - 0.9994 = 0.0006,$$

有误差估计 $\epsilon(z) = \epsilon(x) + \epsilon(y) = 0 + 0.00005$, 所以计算结果只有 1 位有效数字. 考虑另一种方法

$$1 - \cos 2^\circ = \frac{\sin^2 2^\circ}{1 + \cos 2^\circ} \approx \frac{(0.03490)^2}{1 + 0.9994} \approx 6.09187756326898 \times 10^{-4}.$$

考虑用第三种方法

$$1 - \cos 2^\circ = 2\sin^2 1^\circ \approx 2 \times 0.01745 = 6.09005 \times 10^{-4}.$$

后两种方法计算结果与用 MATLAB 直接计算数据 $6.091729809042379e-004$ 比较接近.

为了避免两相近的数据直接作减法运算, 具体处理方法随数学表达式不同而不同. 常用一些恒等式将其变形, 如当 x 为充分大正数时

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

当 x 的绝对值很小时用

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