

 高等教育规划教材

数值计算方法

第 3 版

马东升 董宁 编著



提供电子教案

下载网址 <http://www.cmpedu.com>



机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

高等教育规划教材

数值计算方法

第3版

马东升 董宁 编著

机械工业出版社

本书介绍计算机上常用的数值计算方法, 阐明数值计算方法的基本理论和实现, 讨论一些数值计算方法的收敛性和稳定性, 以及数值计算方法在计算机上实现时的一些问题。内容包括数值计算引论, 非线性方程的数值解法, 线性代数方程组的数值解法, 插值法, 曲线拟合的最小二乘法, 数值积分和数值微分, 常微分方程初值问题的数值解法。各章内容有一定的独立性, 可根据需要进行学习。本书对各种数值计算方法都配有典型的例题, 每章后有较丰富的习题, 全书最后附有部分习题参考答案。

本书可作为高等院校工科各专业本科生学习数值分析或计算方法的教材或参考书, 也可供从事科学与工程计算的科技人员参考。

本书配套授课电子课件, 需要的教师可登录 www.cmpedu.com 免费注册, 审核通过后下载或联系编辑索取 (QQ: 2966938356, 电话: 010-88379739)。

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/马东升, 董宁编著. —3版. —北京: 机械工业出版社, 2015.7
高等教育规划教材
ISBN 978-7-111-51113-7

I. ①数… II. ①马… ②董… III. ①数值计算—计算方法—高等学校—教材 IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 184626 号

机械工业出版社(北京市百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

策划编辑: 王 斌 责任编辑: 王 斌

责任校对: 闫玥红 封面设计: 薛 为

责任印制: 乔 宇

北京铭成印刷有限公司印刷

2015 年 10 月第 3 版第 1 次印刷

184mm×260mm·18 印张·445 千字

0001—3000 册

标准书号: ISBN 978-7-111-51113-7

定价: 42.00 元

凡购本书, 如有缺页、倒页、脱页, 由本社发行部调换

电话服务

网络服务

服务咨询热线: 010-88379833

机工官网: www.cmpbook.com

读者购书热线: 010-88379649

机工官博: weibo.com/cmp1952

教育服务网: www.cmpedu.com

封面无防伪标均为盗版

金书网: www.golden-book.com

出版说明

当前,我国正处在加快转变经济发展方式、推动产业转型升级的关键时期。为经济转型升级提供高层次人才是高等院校最重要的历史使命和战略任务之一。高等教育要培养基础性、学术型人才,但更重要的是要加大力度培养多规格、多样化的应用型、复合型人才。

为顺应高等教育迅猛发展的趋势,配合高等院校的教学改革,满足高质量高校教材的迫切需求,机械工业出版社邀请了全国多所高等院校的专家、一线教师及教务部门,通过充分的调研和讨论,针对相关课程的特点,总结教学中的实践经验,组织出版了这套“高等教育规划教材”。

本套教材具有以下特点:

1) 符合高等院校各专业人才的培养目标及课程体系的设置,注重培养学生的应用能力,加大案例篇幅或实训内容,强调知识、能力与素质的综合训练。

2) 针对多数学生的学习特点,采用通俗易懂的方法讲解知识,逻辑性强、层次分明、叙述准确而精炼、图文并茂,使学生可以快速掌握,学以致用。

3) 凝结一线骨干教师的课程改革和教学研究成果,融合先进的教学理念,在教学内容和方法上进行创新。

4) 为了体现建设“立体化”精品教材的宗旨,本套教材为主干课程配备了电子教案、学习与上机指导、习题解答、源代码或源程序、教学大纲、课程设计和毕业设计指导等资源。

5) 注重教材的实用性、通用性,适合各类高等院校、高等职业学校及相关院校的教学,也可作为各类培训班教材和自学用书。

欢迎教育界的专家和老师提出宝贵的意见和建议。衷心感谢广大教育工作者和读者的支持与帮助!

机械工业出版社

第 3 版前言

本书自 2006 年第 2 版出版以来，先后重印了 10 次，根据这些年的使用情况，编者对部分内容进行了修订。这次修订是在保持原有框架基本不变的前提下，对前一版书第 4 章插值法的牛顿插值和等距节点插值进行了合并，将前一版书第 5 章前 4 节合并为一节，为叙述方便将前一版书第 6 章复化求积法单列为一节。此外还增加调整了一些习题，对部分章节进行了文字修饰加工。

感谢这些年来使用本书的老师 and 读者，正是他们的支持和关注，才有本书的第 3 版。编者学识有限，谬误之处，敬祈批评指正。

编 者

第 2 版前言

本书自 2001 年出版以来，先后重印了 5 次，根据这几年的使用情况，我们对部分内容进行了修订。这次修订在保持原有框架基本不变的前提下，增加了反插法、样条插值，删去了非线性方程组的数值方法，充实了迭代原理、矩阵三角分解的紧凑格式、埃米特插值和分段插值，精简了高斯消去法的计算机实现，对部分章节作了文字修饰加工。

本书附有电子教案，可登陆 <http://www.cmpbook.com> 免费下载。

作者学识有限，谬误之处，敬祈批评指正。

作者

第 1 版前言

随着计算机技术与计算数学的发展，在计算机上用数值计算方法进行科学与工程计算已成为与理论分析、科学实验同样重要的科学研究方法。利用计算机去计算各种数学模型的数值计算方法已成为科学技术人员的必备知识。

本书介绍了与现代科学计算有关的数值计算方法，阐明了数值算法的基本理论和方法，讨论了有关数值算法的收敛性和稳定性，以及这些数值算法在计算机上实现时的一些问题。内容包括数值计算的误差分析，非线性方程的数值解法，线性代数方程组的数值解法，插值和拟合，数值积分和数值微分，常微分方程初值问题的数值解法等六章。各章内容具有一定的相对独立性，可根据需要进行取舍。同时对各种算法都配有适当的例题和习题，并附有部分习题答案。本书叙述力求清晰准确，条理分明，概念和方法的引进深入浅出，通俗易懂。阅读本书需具备高等数学和线性代数的基本知识。

北京理工大学在 20 世纪 80 年代初将计算方法课定为某些工科专业必修课，本书是在多年教学实践及科学研究成果的基础上，参考当前数值分析和计算方法教材编写而成的。书末列出了部分参考书目，作者谨向参考过的列出和未列出书目的编著者致以衷心的感谢。

感谢胡佑德教授对本书编写给予的热情关心和鼓励。

限于作者水平，书中缺点和错误之处，敬请批评指正。

编 者

目 录

| | |
|------------------------------|-----|
| 出版说明 | |
| 第3版前言 | |
| 第2版前言 | |
| 第1版前言 | |
| 第1章 数值计算引论 | 1 |
| 1.1 数值计算方法 | 1 |
| 1.2 误差的来源 | 2 |
| 1.3 近似数的误差表示 | 3 |
| 1.3.1 绝对误差 | 3 |
| 1.3.2 相对误差 | 5 |
| 1.3.3 有效数字 | 6 |
| 1.3.4 有效数字与相对误差 | 9 |
| 1.4 数值运算误差分析 | 11 |
| 1.4.1 函数运算误差 | 12 |
| 1.4.2 算术运算误差 | 13 |
| 1.5 数值稳定性和减小运算误差 | 14 |
| 1.5.1 数值稳定性 | 14 |
| 1.5.2 减小运算误差 | 15 |
| 1.6 习题 | 20 |
| 第2章 非线性方程的数值解法 | 22 |
| 2.1 初始近似值的搜索 | 22 |
| 2.1.1 方程的根 | 22 |
| 2.1.2 逐步搜索法 | 23 |
| 2.1.3 区间二分法 | 24 |
| 2.2 迭代法 | 26 |
| 2.2.1 迭代原理 | 26 |
| 2.2.2 迭代的收敛性 | 28 |
| 2.2.3 迭代过程的收敛速度 | 34 |
| 2.2.4 迭代的加速 | 36 |
| 2.3 牛顿迭代法 | 39 |
| 2.3.1 迭代公式的建立 | 39 |
| 2.3.2 牛顿迭代法的收敛情况 | 41 |
| 2.3.3 牛顿迭代法的修正 | 42 |
| 2.4 弦截法 | 46 |
| 2.4.1 单点弦法 | 46 |
| 2.4.2 双点弦法 | 47 |
| 2.5 多项式方程求根 | 49 |
| 2.5.1 牛顿法求根 | 49 |
| 2.5.2 劈因子法 | 51 |
| 2.6 习题 | 55 |
| 第3章 线性代数方程组的数值解法 | 58 |
| 3.1 高斯消去法 | 59 |
| 3.1.1 顺序高斯消去法 | 59 |
| 3.1.2 列主元高斯消去法 | 65 |
| 3.1.3 高斯-若尔当消去法 | 69 |
| 3.2 矩阵三角分解法 | 72 |
| 3.2.1 高斯消去法的矩阵描述 | 72 |
| 3.2.2 矩阵的直接三角分解 | 75 |
| 3.2.3 用矩阵三角分解法解线性方程组 | 77 |
| 3.2.4 追赶法 | 82 |
| 3.3 平方根法 | 85 |
| 3.3.1 对称正定矩阵 | 85 |
| 3.3.2 对称正定矩阵的乔累斯基分解 | 86 |
| 3.3.3 改进平方根法 | 89 |
| 3.4 向量和矩阵的范数 | 92 |
| 3.4.1 向量范数 | 92 |
| 3.4.2 矩阵范数 | 95 |
| 3.5 方程组的性态和误差分析 | 98 |
| 3.5.1 方程组的性态和矩阵的条件数 | 98 |
| 3.5.2 误差分析 | 101 |
| 3.6 迭代法 | 102 |
| 3.6.1 迭代原理 | 102 |
| 3.6.2 雅可比迭代 | 103 |
| 3.6.3 高斯-赛德尔(Gauss-Seidel)迭代 | 105 |
| 3.6.4 松弛法 | 105 |
| 3.6.5 迭代公式的矩阵表示 | 107 |
| 3.7 迭代的收敛性 | 109 |
| 3.7.1 收敛的基本定理 | 109 |
| 3.7.2 迭代矩阵法 | 112 |
| 3.7.3 系数矩阵法 | 116 |
| 3.7.4 松弛法的收敛性 | 119 |

| | |
|----------------------------------|-----|
| 3.8 习题 | 120 |
| 第4章 插值法 | 126 |
| 4.1 代数插值 | 126 |
| 4.2 拉格朗日插值 | 128 |
| 4.2.1 线性插值和抛物线插值 | 128 |
| 4.2.2 拉格朗日插值多项式 | 130 |
| 4.2.3 插值余项和误差估计 | 132 |
| 4.3 逐次线性插值 | 136 |
| 4.3.1 三个节点时的情形 | 136 |
| 4.3.2 埃特金插值 | 137 |
| 4.3.3 内维尔插值 | 138 |
| 4.4 牛顿插值 | 138 |
| 4.4.1 差商及其性质 | 139 |
| 4.4.2 牛顿插值公式 | 141 |
| 4.4.3 差商和导数 | 144 |
| 4.4.4 差分 | 146 |
| 4.4.5 等距节点牛顿插值公式 | 149 |
| 4.5 反插值 | 150 |
| 4.6 埃尔米特插值 | 151 |
| 4.6.1 拉格朗日型埃尔米特插值多项式 | 152 |
| 4.6.2 牛顿型埃尔米特插值多项式 | 154 |
| 4.6.3 带不完全导数的埃尔米特插值 多项式 | 155 |
| 4.7 分段插值法 | 159 |
| 4.7.1 高次插值的龙格现象 | 159 |
| 4.7.2 分段插值和分段线性插值 | 159 |
| 4.7.3 分段三次埃尔米特插值 | 161 |
| 4.8 三次样条插值 | 162 |
| 4.9 习题 | 167 |
| 第5章 曲线拟合的最小二乘法 | 171 |
| 5.1 最小二乘法 | 171 |
| 5.1.1 最小二乘原理 | 171 |
| 5.1.2 直线拟合 | 174 |
| 5.1.3 超定方程组的最小二乘解 | 175 |
| 5.1.4 可线性化模型的最小二乘拟合 | 176 |
| 5.1.5 多变量的数据拟合 | 179 |
| 5.1.6 多项式拟合 | 181 |
| 5.2 正交多项式及其最小二乘拟合 | 184 |
| 5.2.1 正交多项式 | 185 |
| 5.2.2 用正交多项式进行最小二乘拟合 | 190 |
| 5.3 习题 | 191 |

| | |
|--|-----|
| 第6章 数值积分和数值微分 | 193 |
| 6.1 数值积分概述 | 193 |
| 6.1.1 数值积分的基本思想 | 193 |
| 6.1.2 代数精度 | 194 |
| 6.1.3 插值求积公式 | 197 |
| 6.1.4 构造插值求积公式的步骤 | 199 |
| 6.2 牛顿-柯特斯公式 | 202 |
| 6.2.1 公式的导出 | 202 |
| 6.2.2 牛顿-柯特斯公式的代数精度 | 206 |
| 6.2.3 梯形公式和辛普森公式的余项 | 207 |
| 6.2.4 牛顿-柯特斯公式的稳定性 | 210 |
| 6.3 复化求积法 | 212 |
| 6.3.1 复化梯形公式 | 212 |
| 6.3.2 复化辛普森公式 | 213 |
| 6.3.3 复化柯特斯公式 | 214 |
| 6.4 变步长求积和龙贝格算法 | 215 |
| 6.4.1 变步长梯形求积法 | 215 |
| 6.4.2 龙贝格算法 | 217 |
| 6.5 高斯型求积公式 | 219 |
| 6.5.1 概述 | 219 |
| 6.5.2 高斯-勒让德求积公式 | 222 |
| 6.5.3 带权的高斯型求积公式 | 226 |
| 6.5.4 高斯-切比雪夫求积公式 | 227 |
| 6.5.5 高斯型求积公式的数值稳定性 | 228 |
| 6.6 数值微分 | 229 |
| 6.6.1 机械求导法 | 229 |
| 6.6.2 插值求导公式 | 231 |
| 6.7 习题 | 234 |
| 第7章 常微分方程初值问题的数值 解法 | 237 |
| 7.1 欧拉法 | 238 |
| 7.1.1 欧拉公式 | 238 |
| 7.1.2 两步欧拉公式 | 241 |
| 7.1.3 梯形法 | 242 |
| 7.1.4 改进欧拉法 | 243 |
| 7.2 龙格-库塔法 | 244 |
| 7.2.1 泰勒级数展开法 | 245 |
| 7.2.2 龙格-库塔法的基本思路 | 245 |
| 7.2.3 二阶龙格-库塔法和三阶龙格- 库塔法 | 247 |
| 7.2.4 经典龙格-库塔法 | 250 |

| | | | |
|-------------------------|-----|--------------------------|-----|
| 7.2.5 隐式龙格-库塔法 | 253 | 7.4.1 误差分析 | 261 |
| 7.3 线性多步法 | 254 | 7.4.2 收敛性 | 261 |
| 7.3.1 一般形式 | 254 | 7.4.3 稳定性 | 263 |
| 7.3.2 亚当斯法和其他常用方法 | 256 | 7.5 方程组与高阶微分方程 | 264 |
| 7.3.3 亚当斯预报-校正公式 | 259 | 7.6 习题 | 267 |
| 7.3.4 误差修正法 | 260 | 附录 部分习题参考答案 | 272 |
| 7.4 收敛性与稳定性 | 261 | 参考文献 | 278 |

第 1 章 数值计算引论

本章介绍数值计算方法的研究对象及其主要特点和数值计算中的误差分析。误差分析包括误差的来源、近似数的误差表示、运算误差分析、数值稳定性和减小运算误差。

1.1 数值计算方法

随着计算机的发展与普及,继理论分析和科学实验之后,在计算机上用数值方法进行科学计算已成为科学研究的另一种重要手段。求解各种数学问题的数值计算方法不仅在自然科学得到广泛的应用,而且还渗透到包括生命科学、经济科学和社会科学的许多领域。数值计算方法是应用数学的一个分支,又称数值分析或计算方法,它是研究用数字计算机求解各种数学问题的数值方法及其理论的一门学科,是程序设计和对数值结果进行分析的依据和基础。本书介绍的是在微积分、线性代数和常微分方程等基础数学中最常用的、行之有效的数值方法,内容包括非线性方程的数值解法、数值代数、代数插值、曲线拟合的最小二乘法、数值积分和微分、常微分方程初值问题的数值解法等。

应用计算机解决科学计算问题需要经过以下几个主要过程:提出实际问题,建立数学模型,选用或构造数值计算方法,程序设计和上机计算得出数值结果。因此,选用或构造数值计算方法是应用计算机进行科学计算全过程的一个重要环节。

数值计算方法是以前述数学问题为研究对象,但它不是研究数学本身的理论,而是着重研究数学问题求解的数值方法及其相关理论,包括误差分析、收敛性和稳定性等内容。它应具有以下特点:

1) 把每个求解的数学问题用计算机所能直接处理的四则运算的有限形式的公式表达出来即构成数值方法。

2) 每个数值方法要保证收敛性,数值方法的解即数值解能逼近精确解到要求的程度,还要保证数值稳定性。

3) 数值方法有良好的计算复杂度,即运算次数要少,同时所需存储量要小。

将数学模型问题变成数值问题,进而研究求解数值问题的数值方法,并设计行之有效的数值算法,这些内容属于计算方法的范围。

数学问题可以通过离散化、逼近(包括插值、数值微积分等)转化成数值问题。数值问题是指输入数据(即问题中的自变量和原始数据)与输出数据之间函数关系的一个确定无歧义的描述。

在计算机上可执行的求解数值问题的系列计算公式称为数值方法。“计算机上可执行的系列计算公式”是指这一系列计算公式中的运算只有四则运算和逻辑运算等计算机上能够执行的运算。

用计算机上可执行的系列计算公式求解数值问题,具有完整而准确步骤的方法称为数值算法。因此,数值方法是数值算法的核心。

对一个数学问题能有许多不同的数值算法，而用计算机求各种数学问题的数值算法即是数值计算方法研究的内容。

在数值计算方法中，对许多问题常采用的处理方法有构造性方法、离散化方法、递推化方法、迭代方法、近似替代方法、化整为零方法和外推法等。本书将详细讨论这些方法。

由于数值计算方法研究的对象以及解决问题方法的广泛适用性，现在流行的数学工具软件，如 Maple, Matlab, Mathematica 等，已将其绝大多数内容设计成简单函数，经简单调用，便可得到运行结果。但由于实际问题具体特性的复杂性以及算法自身的适用范围决定了应用中必须选择、设计适合于自己所要解决的特定问题的算法，因而掌握数值计算方法和内容是必不可少的。

手算是熟悉数值计算公式，掌握数值计算方法和计算过程的重要一环。尽管手算的例题都很简单，但是其计算过程和步骤与计算机按程序计算的过程和步骤相一致，因此，应该充分重视这一环节。数值计算方法的目的是用计算机解决科学研究和工程实际中的数值计算问题，因此，在计算机上熟练地实现这些数值方法是必备的基本技能。同时，通过上机实际计算，可以对各种数值方法进一步深入地理解。因此，对手算和上机计算都应给予充分重视。

1.2 误差的来源

在数值计算中，要大量地用数进行运算。这些数可以分成两类，一类是精确地反映实际情况的数，这类数称为精确数、准确数或真值，如教室里有 42 名学生，42 就是准确数。另一类数则不是这样，它们只能近似地反映实际情况，这类数称为近似数或某准确数的近似值。例如，通过测量得到桌子的长度为 956 mm，一般说来，这个测量值 956 是不能精确反映桌子实际长度的近似值。将一个数的准确值与其近似值之差称为误差。近似数是有误差的数。误差在数值计算中是不可避免的，也就是说，在数值算法中，绝大多数情况下是不存在绝对的严格和精确的，在考虑数值算法时应该能够分析误差产生的原因，并能将误差限制在许可的范围之内。

误差的来源，即产生误差的原因是多方面的，可以根据误差产生的原因对误差进行分类，下面介绍工程上最常遇到的四类误差。

定量分析客观事物时，要抓住其主要的本质的方面，忽略其次要因素，建立已知量和未知量之间的数学关系式，即数学模型。因此，这样得到的数学模型只是客观现象的一种近似描述，而这种数学描述上的近似必然会产生误差。建立的数学模型和实际事物的差距称为模型误差或描述误差。

例如物体在重力作用下自由下落，其下落距离 s 与时间 t 满足自由落体方程

$$s = \frac{1}{2}gt^2$$

其中 g 为重力加速度。该方程就是自由落体的数学模型，它忽略了空气阻力这个因素，因而由此求出的在某一时刻 t 的下落距离 s ，必然是近似的、有误差的。

在建立的各种计算公式中，通常会包括一些参数，而这些参数又往往是通过观测或实验得到的，它们与真值之间有一定的差异，这就给计算带来了一定的误差。这种误差称为观测误差或测量误差。

自由落体方程中的重力加速度 g 和时间 t 就是观测来的。观测值的精度依赖于测量仪器的精密程度和操作仪器的人的素质等。

在数值计算方法中不研究模型误差和观测误差，总是认为数学模型正确、合理地反映了客观实际，只是对求解数学模型时产生的误差进行分析研究，求解数学模型时常遇到的误差是截断误差和舍入误差。

许多数学运算是通过极限过程来定义的，而计算机只能完成有限次的算术运算与逻辑运算。因此，实际应用时，需将解题方案加工成算术运算与逻辑运算的有限序列，即表现为无穷过程的截断，这种无穷过程用有限过程近似引起的误差，即模型的准确解与用数值算法求得的准确解之差称为截断误差或方法误差。例如，数学模型是无穷级数

$$\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0)$$

在实际计算时，只能取前面的有限项（如 n 项）

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0)$$

来代替，这样就舍弃了无穷级数的后半段，因而出现了误差，这种误差就是一种截断误差。这个数学模型的截断误差是

$$\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0) = \sum_{k=n}^{+\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0)$$

当计算机执行算法时，由于受计算机字长的限制，参加运算的数据总是只能具有有限位的数据，原始数据在机器中的表示可能会产生误差，每一次运算又可能产生新的误差，这种误差称为舍入误差或计算误差。

例如，圆周率 $\pi = 3.141\ 592\ 6\dots$ ， $\sqrt{2} = 1.414\ 213\ 56\dots$ ， $\frac{1}{3} = 0.333\ 3\dots$ ，等等，在计算机上表示这些数时只能用有限位小数，如对小数点后四位进行四舍五入，则 $3.141\ 6 - \pi = 0.000\ 007\ 3\dots$ ， $1.414\ 2 - \sqrt{2} = -0.000\ 013\dots$ ， $0.333\ 3 - \frac{1}{3} = -0.000\ 033\dots$ 就是舍入误差。又比如计算机进行 4 位数乘 4 位数乘法运算，若乘积也只许保留 4 位，通常把第 5 位数字进行四舍五入，这时产生的误差就是舍入误差。

1.3 近似数的误差表示

近似数的误差常用绝对误差、相对误差和有效数字表示。下面介绍这三种表示方法及其相互之间的关系。

1.3.1 绝对误差

定义 1-1 设 x^* 是准确值 x 的一个近似值，则

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

称为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。在不易混淆时， $e(x^*)$ 简记为 e^* 。

从定义 1-1 可以看出， e^* 可正可负，当 $e^* > 0$ 时， x^* 称为 x 的弱（不足）近似值；当 $e^* < 0$

时, x^* 称为 x 的强(过剩)近似值。 $|e^*|$ 的大小标志着 x^* 的精度。一般地, 在同一量的不同近似值中, $|e^*|$ 越小, x^* 的精度越高。 e^* 是有量纲的。

一般情况下, 无法准确知道绝对误差 e^* 的大小, 但根据具体测量或计算情况, 可以事先估计出误差的绝对值不超过某个正数 ε^* , 这个正数 ε^* 叫作误差绝对值的上界或误差限。

定义 1-2 如果

$$|e^*| = |x - x^*| \leq \varepsilon(x^*) \quad (1-2)$$

则称 $\varepsilon(x^*)$ 为 x^* 近似 x 的绝对误差限, 简称误差限(界), 用它反映近似数的精度。在不易混淆时 $\varepsilon(x^*)$ 简记为 ε^* 。

从定义 1-2 可以看出, ε^* 是一个正数。又因为在任何情况下都有

$$|x - x^*| \leq \varepsilon^*$$

即

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

这就表明准确值 x 在区间 $[x^* - \varepsilon^*, x^* + \varepsilon^*]$ 内, 用 $x = x^* \pm \varepsilon^*$ 来表示近似数 x^* 的精确度, 或准确值所在的范围。同样有 $-\varepsilon^* \leq e^* \leq \varepsilon^*$, 即 $|e^*|$ 是在 ε^* 的范围内, 所以 ε^* 应取得尽可能小。例如, $x = 4.376\ 281\ 6\dots$, 取近似数 $x^* = 4.376$, 则 $x - x^* = 0.000\ 281\ 6\dots$, 这时

$$|e^*| = 0.000\ 281\ 6\dots < 0.000\ 3 = 0.3 \times 10^{-3}$$

同样

$$|e^*| = 0.000\ 281\ 6\dots < 0.000\ 29 = 0.29 \times 10^{-3}$$

显然, 0.3×10^{-3} 和 0.29×10^{-3} 都是 $|e^*|$ 的上界, 都可以作为近似值 x^* 的绝对误差限, 即

$$\varepsilon^* = 0.3 \times 10^{-3} \text{ 或 } \varepsilon^* = 0.29 \times 10^{-3}$$

由此可见, 绝对误差限 ε^* 不是唯一的, 这是因为一个数的上界不唯一。但是 ε^* 越小, x^* 近似真值 x 的程度越好, 即 x^* 的精度越高。在实际应用中, 往往根据需要对准确值取近似值, 按四舍五入原则取近似值是使用最广泛的取近似值的方法。

例 1-1 用一把有毫米刻度的尺子, 测量桌子的长度, 读出来的值 $x^* = 1\ 235\ \text{mm}$, 这是桌子实际长度 x 的一个近似值, 由尺子的精度可以知道, 这个近似值的误差不会超过 $1/2\ \text{mm}$ 。

$$|x - x^*| = |x - 1\ 235\ \text{mm}| \leq \frac{1}{2}\ \text{mm}$$

$$1\ 234.5\ \text{mm} \leq x \leq 1\ 235.5\ \text{mm}$$

这表明真值 x 在区间 $[1\ 234.5, 1\ 235.5]$ 内, 写成

$$x = (1\ 235 \pm 0.5)\ \text{mm}$$

这里绝对误差限 $\varepsilon^* = 0.5\ \text{mm}$, 即绝对误差限是末位的半个单位。

下面讨论“四舍五入”的绝对误差限。

设 x 为一实数, 其十进制表示的标准形式(十进制规格化浮点数形式)

$$x = \pm 0. x_1 x_2 \dots \times 10^m$$

其中, m 是整数; x_1, x_2, \dots 是 $0, 1, \dots, 9$ 中的任一数, 但 $x_1 \neq 0$ 。若经过四舍五入保留 n 位数字, 得到近似值

$$x^* = \begin{cases} \pm 0. x_1 x_2 \dots x_n \times 10^m, & \text{当 } x_{n+1} \leq 4 \text{ (四舍)} \\ \pm 0. x_1 x_2 \dots x_{n-1} (x_n + 1) \times 10^m, & \text{当 } x_{n+1} \geq 5 \text{ (五入)} \end{cases}$$

四舍时的绝对误差

$$\begin{aligned}
 |x - x^*| &= (0. x_1 x_2 \cdots x_n x_{n+1} \cdots - 0. x_1 x_2 \cdots x_n) \times 10^m \\
 &\leq (0. x_1 x_2 \cdots x_n 499 \cdots - 0. x_1 x_2 \cdots x_n) \times 10^m \\
 &= 10^m \times 0. \underbrace{0 \cdots 0}_{n \uparrow 0} 499 \cdots \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}
 \end{aligned}$$

五入时的绝对误差

$$\begin{aligned}
 |x - x^*| &= (0. x_1 x_2 \cdots x_{n-1} (x_n + 1) - 0. x_1 x_2 \cdots x_n \cdots) \times 10^m \\
 &= (0. \underbrace{0 \cdots 0}_{n-1 \uparrow 0} 1 - 0. \underbrace{0 \cdots 0}_{n \uparrow 0} x_{n+1} \cdots) \times 10^m \\
 &\leq 10^{m-n} (1 - 0. x_{n+1})
 \end{aligned}$$

由于此时 $x_{n+1} \geq 5$, 所以 $1 - 0. x_{n+1} \leq \frac{1}{2}$, 有

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \quad (1-3)$$

所以, 四舍五入得到的近似数的绝对误差限是其末位的半个单位, 即

$$\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

例 1-2 圆周率 $\pi = 3.14159 \cdots$, 用四舍五入取小数点后 4 位时, 近似值为 3.1416, 此时 $m=1, n=5, m-n=1-5=-4$, 故绝对误差限 $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$ 。同样, 取小数点后 2 位时, 近似值为 3.14, 其绝对误差限 $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$ 。

对于用四舍五入取得的近似值, 专门定义有效数字来描述它。

1.3.2 相对误差

在同一量的近似值中, 绝对误差小的, 精度高, 但是, 绝对误差不能比较不同条件下的精度。例如测量 10 mm 误差是 1 mm, 测量 1 m 误差是 2 mm, 后者比前者绝对误差大, 但可以看出在精度上后者比前者情况好, 这是因为一个量的近似值的精度不仅与绝对误差有关, 还与该量本身的大小有关, 为此引入相对误差的概念。

定义 1-3 相对误差是近似数 x^* 的绝对误差 e^* 与准确值 x 的比值, 即

$$\frac{e^*}{x} = \frac{x - x^*}{x}, \text{ 其中 } x \neq 0 \quad (1-4)$$

相对误差说明了近似数 x^* 的绝对误差 e^* 与 x 本身比较所占的比例, 它反映了一个近似数的准确程度, 相对误差越小, 精度就越高。但由于真值 x 总是不知道的, 因此在实际问题中, 常取相对误差

$$e_r(x^*) = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*} \quad (1-5)$$

在不易混淆时, 将 $e_r(x^*)$ 简记为 e_r^* 。

当 $|e_r^*| = \left| \frac{e^*}{x^*} \right|$ 较小时

$$\frac{e^*}{x^*} - \frac{e^*}{x} = \frac{e^*(x - x^*)}{x^*x} = \frac{(e^*)^2}{x^*(x^* + e^*)} = \frac{\left(\frac{e^*}{x^*}\right)^2}{1 + \frac{e^*}{x^*}}$$

是 e_r^* 的平方级, 故可忽略不计, 实际问题中按式(1-5)取相对误差是合理的。

上例中 10 mm 时误差为 1 mm, 1 m 时误差为 2 mm, 其相对误差分别为 0.1, 0.002, 前者绝对误差小, 后者相对误差小, 并且精度比前者高。

在实际计算中, 由于 e^* 和 x 都不能准确地求得, 因此相对误差 e_r^* 也不可能准确地得到, 于是也像绝对误差那样, 只能估计相对误差的范围。

相对误差可正可负, 其绝对值的上界取为相对误差限, 因为 ε^* 是 x^* 的绝对误差限, 则 $\frac{\varepsilon^*}{|x^*|}$ 是 x^* 的相对误差限, 即有如下定义。

定义 1-4

$$|e_r^*| = \left| \frac{e^*}{x^*} \right| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \frac{\varepsilon^*}{|x^*|} = \varepsilon_r(x^*) \quad (1-6)$$

$\varepsilon_r(x^*)$ 称为相对误差限, 在实际计算中用作相对误差, 所以相对误差一般是指 $\varepsilon_r(x^*)$, 在不易混淆时, $\varepsilon_r(x^*)$ 可简记为 ε_r^* 。显然相对误差是无量纲的, 通常用百分数表示。

由定义 1-4 可知, 相对误差限可由绝对误差限求出, 反之, 绝对误差限也可由相对误差限求出, 即

$$\varepsilon^* = |x^*| \varepsilon_r^*$$

例 1-3 光速 $c^* = (2.997\,925 \pm 0.000\,001) \times 10^{10}$ cm/s, 其相对误差限 $\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon^*}{|c^*|} = \frac{0.000\,001}{2.997\,925} = 3.34 \times 10^{-7}$, 其中 $c^* = 2.997\,925 \times 10^{10}$ cm/s 是目前光速公认值(测量值)。

例 1-4 取 3.14 作为圆周率 π 的四舍五入近似值时, 试求其相对误差限。

解 四舍五入的近似值 $x^* = 3.14$ 的绝对误差限为 $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$, 则其相对误差限

$$\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon^*}{|x^*|} = \frac{\frac{1}{2} \times 10^{-2}}{3.14} = 0.159\%$$

1.3.3 有效数字

有效数字是近似数的一种表示方法, 它不但能表示近似数的大小, 而且不用计算近似数的绝对误差和相对误差, 直接由组成近似数数字个数就能表示其精度。

定义 1-5 设数 x 的近似值 $x^* = 0.x_1x_2 \cdots x_n \cdots \times 10^m$, 其中 x_i 为 0~9 之间的任意数, 但 $x_1 \neq 0, i=1, 2, 3, \cdots, m$ 为整数, 若

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \quad (1-7)$$

则称 x^* 为 x 的具有 n 位有效数字的近似值, x^* 准确到第 n 位, $x_1x_2 \cdots x_n$ 是 x^* 的有效数字。

这里 x^* 的位数可以是无限多位，也可以是有限位，如有 n 位，数值计算中得到的近似数常常是有限位的。

例 1-5 以 $\frac{22}{7}$ 作为圆周率 π 的近似值，有几位有效数字？

$$\begin{aligned} \text{解 由 } \left| \pi - \frac{22}{7} \right| &= |3.141\ 592\dots - 3.142\ 857\dots| \\ &= 0.001\ 264\dots < \frac{1}{2} \times 10^{-2} \end{aligned}$$

因为 $m-n=2$ ，题中已知 $m=1$ ，所以有 $n=3$ ，即 $\frac{22}{7}$ 作为 π 的近似值有 3 位有效数字。

例 1-6 取 3.142 和 3.141 作为圆周率 π 的近似值各有几位有效数字？

解 $\pi=3.141\ 592\dots$ ，当取 3.142 作为其近似值时

$$|\pi - 3.142| = 0.000\ 407\dots < 0.000\ 5 = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

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 3.141 作为 π 的近似值时

$$|\pi - 3.141| = 0.000\ 59\dots < 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

即 $m-n=-2$ ， $m=1$ ， $n=3$ ，所以 3.141 作为 π 的近似值时有 3 位有效数字，不具有 4 位有效数字，3.14 是有效数字，千分位的 1 不是有效数字。

由定义 1-5 可以看出，如果近似数 x^* 的误差限是某一位的半个单位，由该位到 x^* 的第一位非零数字一共有 n 位， x^* 就有 n 位有效数字，也就是说准确到该位。

四舍五入得到的近似数的绝对误差限 ε^* 是其末位的半个单位，即

$$\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

那么用四舍五入得到的近似数就全是有效数字，即有 n 位有效数字。例如四舍五入得到的近似数

$$0.23, 23, 23.00$$

分别有 2 位、2 位和 4 位有效数字。

同样若用四舍五入法取准确值的前 n 位作为近似值 x^* ，则 x^* 有 n 位有效数字，其中每一位数字都叫 x^* 的有效数字。例如取

$$3.14, 3.1416$$

作为圆周率 π 的近似值，分别有 3 位和 5 位有效数字。3.142 是 π 四舍五入得到的近似值，有 4 位有效数字，3.141 不是 π 四舍五入得到的近似值，不具有 4 位有效数字，这和例 1-6 的结论是一致的。

如果 x^* 准确到某位数字，将这位以后的数字进行四舍五入则不一定能得到有效数字。例如 3.145 作为 π 的近似值准确到百分位，将其四舍五入得到 3.15，其最后一位则不是有效数字，3.15 作为 π 的近似值只有两位有效数字。

在数值计算中约定，原始数据都用有效数字表示。凡是不标明绝对误差限的近似数都认