

大学数学教学与改革丛书

数值分析

(第二版)

主 编 李 星

副主编 李志明

 科学出版社

大学数学教学与改革丛书

数值分析

(第二版)

主 编 李 星

副主编 李志明

科学出版社

北 京

版权所有,侵权必究

举报电话:010-64030229,010-64034315,13501151303

内 容 简 介

本书共分为9章,主要包括:误差、有效数字及内积、范数正交等概念,解线性方程组的直接法和迭代法,非线性方程(组)求根,插值与拟合,数值积分,常微分方程数值解法,矩阵特征值和特征向量数值求解等.每章后都附有主要算法程序和习题,习题参考答案附于书末.

本书可作为非数学专业研究生及各专业本科生的教材,也可供科技工作者阅读和参考.

图书在版编目(CIP)数据

数值分析/李星主编.—2版.—北京:科学出版社,2018.7

(大学数学教学与改革丛书)

ISBN 978-7-03-058147-1

I. ①数… II. ①李… 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(2018)第 134235 号

责任编辑:冯贵层 王 晶/责任校对:董艳辉

责任印制:彭 超/封面设计:彬 峰

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

武汉中科兴业印务有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

开本:787×1092 1/16

2018年7月第 一 版 印张:14

2018年7月第一次印刷 字数:328 000

定价:42.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

第二版前言

随着计算机科学技术的飞速发展,应用数值方法解决理论或应用中的各种问题,已成为数学学科的重要研究内容.

本书自 2014 年出版以来,经历了 4 年教学实践的检验.读者对书中内容给予认可,同时也提出很多宝贵意见.作者每年也以该书为教材,针对各专业本科生及非数学专业研究生讲授数值分析课程,对数值分析的原理方法也有新的认识.因此,我们在第一版的基础上对该书进行了修订.

(1) 为使数值分析的逻辑关系更加清晰合理,调整了各章节的先后次序.例如,在插值、拟合中需要用到求解线性方程组的知识,而且线性方程组也是学生在线性代数课程中较为熟悉的概念.故本次修订将求解线性方程组的直接法和迭代法,由原版的第 4 章、第 5 章调整到第 2 章、第 3 章,非线性方程(组)求根也相应地向前调整到第 4 章.

(2) 鉴于拟合的重要性,本次修订在原来数据拟合的基础上,增加了函数拟合,并由原来的一节扩充为一章,且在理论上作了更加深入的探讨.

(3) 在拟合、线性方程组求解、数值积分以及矩阵特征值和特征向量数值解法等章节,都要用到内积、范数、正交等概念.故本次修订将这些概念集中在第 1 章绪论中进行归纳总结,避免分散在各章节重复.

(4) 对各章习题作了全面调整和更新.新增习题更加注重对各类数值计算方法的基础训练,并扩大了对各知识点的覆盖面.每道习题都经过认真推演,给出参考答案或提示,力求准确无误.

(5) 为了更好地理解各章数值计算方法的原理,几乎在每章最后都增加了主要算法的 MATLAB 程序,如有必要,还附有相应例题.

(6) 对各章主要算法的收敛性、稳定性以及误差分析等,作了进一步探讨.主要涉及求解线性方程组直接法的性态分析、迭代法的收敛条件、插值余项、求积公式余项、常微分方程数值解的局部误差等.

(7) 本次修订还针对很多细节进行了完善.例如,给出列主元高斯消去法及列主元 LU 分解法的公式和算法、通过分析二次型的性质引入最速下降法的概念、给出牛顿插值的详细推导过程、利用正交函数以及正交多项式给出函数拟合的概念、通过调整代数精度的前后次序更自然地给出辛普森求积公式余项的证明、由浅入深地引入龙格-库塔法的概念、从几何意义出发引入豪斯霍尔德变换等.

总之,所有这些修订,都将更加有利于读者对数值分析课程的学习.

本次修订工作由李星主编完成,李志明任副主编参与部分修订工作.周哲、肖明双在第一版的基础上筛选、核对了每章后的习题,并进行了详细演算及推导;高涛为每章主要

算法配备了 MATLAB 程序. 他们还对本书内容进行了认真核对, 在此表示感谢. 本次修订工作的顺利完成, 得益于中国地质大学(武汉)研究生院的资助以及数学与物理学院、科学出版社等领导、老师们的支持. 刘安平教授、黄刚教授、王筱越老师对本书的修订给予了热情鼓励, 在此也向他们表示感谢.

限于水平, 书中难免有不妥之处, 敬请读者批评指正.

编 者

2018 年 4 月

第一版前言

现代科学的发展,依赖于理论研究、科学实验和科学计算等三种手段.作为三种科学研究手段之一的科学计算是一门工具性、方法性和边沿性的学科,其物质基础是计算机,理论基础是计算数学.计算数学的主要任务是基于某些数学模型,寻求或设计相应的数值求解方法,并对其数值性质进行研究.这种研究称为数值分析,它是计算数学的基础课程.

数值分析课程以微积分、线性代数等知识为基础,不仅涉及很多理论推导,还涉及大量计算问题.对于初学者来说,理解和掌握本课程的基本理论、基本方法和基本计算具有一定难度,所以拥有一本合适的教材是十分重要的.

本教材是为适应非数学专业研究生和不同专业本科生对数值分析的教学要求,满足工程技术人员对数值分析的迫切需要而编写的.在编写过程中,我们结合多年教学经验,认真阅读多种国内外数值分析教材,吸收众家之长,使教材具有以下特点:

(1) 避免深奥的理论证明,极少涉及“数学分析”和“高等代数”的理论,使读者只要具备“高等数学”和“线性代数”的知识就可完成本课程的学习.在理论证明和公式推导过程中,尽量与“高等数学”“线性代数”的相关内容作分析对比,温故而知新.

(2) 证明和推导,力求简洁准确、结构完美.使用的数学符号,以全国硕士研究生入学统一考试中的格式为标准.杜绝随心所欲的数学符号,减轻读者的学习负担.增加图形和图表,帮助读者对抽象概念的理解.

(3) 根据每章内容,对习题作了精心挑选,使其全面覆盖所学内容,并对每道习题进行认真演算,最后在书末给出答案或提示.

(4) 每章都尽量将相对简单而重要的内容排在前面,而相对次要或难懂的内容排在后面.在教学过程中,可以根据需要进行取舍.全书内容和习题适合 40~60 学时的教学.

本书由李星主编,何水明、向东进、王军霞、王元媛任副主编.在本书的编写过程中,我们得到中国地质大学研究生精品教材建设项目的资助,得到中国地质大学数学与物理学院及科学出版社的大力支持.刘安平教授详细审阅了全稿,并提出许多宝贵的意见和建议.王爱爱、韩欢、曹凯、马恩君、林英志、彭慧玲、张帆、宋广宇等为本书的内容取舍、习题演算,花费了大量时间和精力.谨在此向他们表示衷心的感谢.

由于编者水平所限,书中难免有不妥之处,敬请读者批评指正.

编者
2013 年 7 月

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 数值分析的任务和内容	1
1.2 误差及有效数字	2
1.3 其他预备知识	8
习题 1	12
第 2 章 解线性方程组的直接法	15
2.1 高斯消去法	15
2.2 LU 分解法	24
2.3 平方根法	30
2.4 追赶法	35
2.5 方程的性态与误差分析	38
2.6 部分算法程序	42
习题 2	45
第 3 章 解线性方程组的迭代法	48
3.1 几种迭代法介绍	48
3.2 迭代法的收敛性	53
3.3 最速下降法	57
3.4 部分算法程序	60
习题 3	62
第 4 章 非线性方程求根	65
4.1 基本概念	65
4.2 牛顿法	72
4.3 割线法	75
4.4 非线性方程组求根	76
4.5 部分算法程序	79
习题 4	81
第 5 章 插值	82
5.1 插值及多项式插值	82
5.2 拉格朗日插值	83
5.3 牛顿插值	88
5.4 多项式插值余项	94
5.5 埃尔米特插值	96

5.6	分段低次插值	99
5.7	三次样条插值	108
5.8	部分算法程序	115
习题 5		118
第 6 章	拟合	121
6.1	数据拟合	121
6.2	函数拟合	131
6.3	部分算法程序	136
习题 6		138
第 7 章	数值积分	140
7.1	牛顿-科茨求积公式	140
7.2	复化求积公式	149
7.3	龙贝格求积公式	151
7.4	高斯型求积公式	155
7.5	部分算法程序	162
习题 7		164
第 8 章	常微分方程数值解法	166
8.1	欧拉法	166
8.2	龙格-库塔法	172
8.3	线性多步法	177
8.4	一阶微分方程组与高阶微分方程的数值解法	182
8.5	部分算法程序	184
习题 8		186
第 9 章	矩阵特征值与特征向量数值解法	188
9.1	幂法与反幂法	188
9.2	QR 方法	196
9.3	部分算法程序	201
习题 9		203
参考文献		205
习题参考答案		206

第 1 章 绪 论

现代科学的发展,依赖于理论研究、科学实验和科学计算等三种手段.作为三种科学研究手段之一的科学计算是一门工具性、方法性和边沿性的学科,其物质基础是计算机、理论基础是计算数学.计算数学的主要任务是基于某些数学模型,寻求或设计相应的数值求解方法,并对其数值性质进行研究.这种研究称为数值分析,它是计算数学的基础课程.

1.1 数值分析的任务和内容

1. 提供数学模型的近似求解算法

在算法中,只能包括计算机能直接处理的加、减、乘、除运算和逻辑运算.

例如,为了计算无理数 e 的值,我们可以采用下列方法:

$$e \approx \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n \quad (1.1)$$

$$e \approx \frac{1}{0!} + \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} + \cdots + \frac{1}{n!} \quad (1.2)$$

用这些方法计算无理数 e 时,只用到了加、减、乘、除等运算.其中 n 次方也可以看成若干个乘法.一般来说,采取不同的计算方法,其误差也会有所不同.

2. 研究算法的可靠性

对于给出的算法,需要分析算法的收敛性以及近似解与精确解之间的误差.由于运算过程中存在舍入误差,因此还需要讨论舍入误差对计算结果的影响,即对算法作稳定性分析.

例如,当 $n = 5$ 时,并在计算过程中取 4 位小数,用(1.1)式计算出 e 的近似值为

$$e \approx \left(1 + \frac{1}{5}\right)^5 \approx 2.4883$$

而用(1.2)式计算出 e 的近似值则为

$$e \approx \frac{1}{0!} + \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \frac{1}{4!} + \frac{1}{5!} \approx 2.7167$$

显然,用以上两种算法求得的近似值的精度不同,所以需要对其作误差分析.

3. 研究算法的计算复杂度

算法的计算复杂度包括时间复杂度、空间复杂度以及逻辑复杂度等.一个可靠的算法应具备适用范围广、运算量少、存储单元省、逻辑结构简单等特点.

用(1.2)式计算 e 的近似值时,如果 n 取得比较大,那么 $n!$ 就可能非常大,以至计算机无法计算.这就需要寻求一种简单的算法来完成这项工作.例如,我们可以在 $\frac{1}{(n-1)!}$ 的基础上乘以 $\frac{1}{n}$,然后再累加到相应的结果上.

4. 在计算机上进行数值实验

任何一个算法,除了在理论上论证其收敛性和稳定性外,还应通过计算机的具体数值实验,来证明算法的可行性和有效性.

例如,根据(1.2)式,取 $n = 10\,000$,并且利用 $\frac{1}{n!} = \frac{1}{(n-1)!} \cdot \frac{1}{n}$,在计算机上计算出 $e \approx 2.718\,28$.这就用实验证明了算法的可行性和有效性.

数值分析是一门内容丰富、研究方法深刻、有自身理论体系的课程,其主要内容有:线性方程组的数值解法(包括直接法和迭代法)、非线性方程和非线性方程组求根、插值和拟合、数值积分、常微分方程数值解法、矩阵特征值和特征向量的计算方法等.

1.2 误差及有效数字

本节讨论误差和有效数字等概念,具体包括:误差的来源、误差的定义、误差的计算以及误差与有效数字之间的关系等.

1.2.1 误差的来源

(1) 在进行科学与工程计算时,我们往往要对所研究的问题进行抽象和简化,然后建立数学模型,在这个过程中就会产生误差.我们把数学模型与实际问题之间出现的误差称为模型误差.

例如,我们用数学模型

$$s^*(t) = \frac{1}{2}gt^2$$

来描述自由落体下降的距离 $s(t)$ 与下降时间 t 之间的关系.那么从初始时刻到时刻 t ,物体下降的计算距离 $s^*(t)$ 与下降的实际距离 $s(t)$ 之间的差 $s^*(t) - s(t)$,就是应用数学模型

$s^*(t) = \frac{1}{2}gt^2$ 解决物体下降距离问题时所产生的模型误差.

在本课程中,我们一般都假定数学模型是合理的,即认为模型误差可以忽略不计.

(2) 在数学模型中,通常会包含一些量.这些量在观测过程中,受工具、方法以及观察者主观因素的影响,使得观测结果不能达到绝对准确.这种由于观测所产生的误差称为观测误差.

在数学模型中,可能会有时间、温度和长度等物理量.这些物理量中所包含的观测误差,在数值分析中也不作深入探讨.

(3) 当数学模型比较复杂时,不易获得精确解,通常要用数值方法求其近似解.近似解与精确解之差称为截断误差.由于这是计算方法本身所带来的误差,所以也称为方法误差.

例如,用

$$\left(1 + \frac{x}{n}\right)^n \quad \text{或} \quad 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!}$$

计算 e^x 时,就会产生截断误差(或方法误差).

(4) 选定某种方法后,总要用“四舍五入”的办法取有限位小数进行计算,因而也会产生误差.这种对数据进行舍入而产生的误差称为舍入误差.

例如,在用

$$\left(1 + \frac{1}{5}\right)^5 \quad \text{和} \quad \frac{1}{0!} + \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \frac{1}{4!} + \frac{1}{5!}$$

计算 e 的近似值时,需要进行四舍五入.当取4位小数时,分别得 $e \approx 2.4883$ 和 $e \approx 2.7167$.这其中不仅包括截断误差(或方法误差),也包括舍入误差.

总之,误差包括:模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差.在数值分析课程中,我们主要研究截断误差和舍入误差.其中截断误差是误差研究的主要内容,截断误差公式一般可通过数学方法推导出;而舍入误差的产生具有很大随机性,当算法稳定性不好时,舍入误差也可能成为误差研究的主要内容.详尽的误差分析一般比较困难,有时甚至是不可能的.当计算结果与实际不符时,应当采取适当措施对算法加以改进,甚至对模型进行修改.

1.2.2 误差的定义

虽然前面已经提到误差的概念,但还没有给出误差的准确定义,下面我们给出绝对误差、绝对误差限以及相对误差、相对误差限的定义.

定义 1.1 设 x 为某个量的准确值, x^* 为 x 的一个近似值,则近似值 x^* 与准确值 x 的差称为近似值 x^* 的绝对误差,简称误差,记为 $e(x^*)$,即

$$e(x^*) = x^* - x$$

由于我们不能具体得到准确值 x ,因此近似值 x^* 的绝对误差 $e(x^*)$ 也不可能求出.但在实际测量和计算中,往往可以估计出误差的绝对值不超过某个正数,这就是所谓的绝对误差限.

定义 1.2 若绝对误差 $e(x^*)$ 的绝对值不超过某个正数 ϵ ,则称该正数 ϵ 为近似值 x^* 的一个绝对误差限,或称误差限,记为 $\epsilon(x^*)$,即

$$\epsilon(x^*) = \epsilon$$

显然,近似值 x^* 的绝对误差限 $\epsilon(x^*)$ 并不唯一,且 $\epsilon(x^*)$ 与 $e(x^*)$ 具有下列关系:

$$|e(x^*)| \leq \epsilon(x^*)$$

下面讨论用尺测量长度时的绝对误差问题.如果某把尺的最小刻度是 cm ,那么在用该尺测量物体长度时,测量出的近似值 x^* 与准确值 x 之差的绝对值一般不会超过 0.5 cm ,即 $|e(x^*)| \leq 0.5 \text{ cm}$,或 $\epsilon(x^*) = 0.5 \text{ cm}$.如果某把尺的最小刻度是 mm ,可得 $\epsilon(x^*) = 0.5 \text{ mm}$.

在绝对误差和绝对误差限的基础上,我们给出相对误差和相对误差限的概念.

假设在测量一个 10 m 长的物体时,误差为 0.01 m;而在测量一个 1 m 长的物体时,误差也为 0.01 m. 虽然两者的误差都是 0.01 m,但我们一般会认为前者测量得更精确. 所以一个量 x^* 的精确程度,不仅与绝对误差 $e(x^*)$ 有关,还与这个量 x (或 x^*) 本身的大小有关.

定义 1.3 设 x 为某个量的准确值, x^* 为 x 的一个近似值,则称 $\frac{e(x^*)}{x}$ 为 x^* 的相对误差,记为 $e_r(x^*)$,即

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

下面讨论 $\frac{e(x^*)}{x}$ 与 $\frac{e(x^*)}{x^*}$ 之间的关系. 由于

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

当 $e_r(x^*)$ 趋于零时, $\frac{e_r(x^*)^2}{1 + e_r(x^*)}$ 是比 $e_r(x^*)$ 更高阶的无穷小,于是当 $e_r(x^*)$ 充分接近于零时,有

$$\frac{e(x^*)}{x} - \frac{e(x^*)}{x^*} \approx 0$$

即

$$\frac{e(x^*)}{x^*} \approx \frac{e(x^*)}{x}$$

因此,也可用 $\frac{e(x^*)}{x^*}$ 作为 x^* 的相对误差,即

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

类似地,相对误差限的定义如下.

定义 1.4 若相对误差 $e_r(x^*)$ 的绝对值不超过某个正数 ϵ_r ,则称该正数 ϵ_r 为近似值 x^* 的一个相对误差限,记为 $\epsilon_r(x^*)$,即

$$\epsilon_r(x^*) = \epsilon_r$$

显然,近似值 x^* 的相对误差限 $\epsilon_r(x^*)$ 也不唯一,且 $\epsilon_r(x^*)$ 与 $e_r(x^*)$ 具有下列关系:

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

又因为

$$|e_r(x^*)| = \left| \frac{e(x^*)}{x^*} \right| \leq \frac{\epsilon(x^*)}{|x^*|}$$

所以,还有

$$\epsilon_r(x^*) = \frac{\epsilon(x^*)}{|x^*|}$$

1.2.3 误差的运算

— 设矩形的长和宽分别为 x 和 y ,则面积 $z = xy$. 如果长和宽的近似值分别为 x^* 和 y^* ,

那么面积的近似值 $z^* = x^* y^*$. 根据误差的定义, 有 $e(x^*) = x^* - x, e(y^*) = y^* - y$, 现在问 $e(z^*)$ 是多少?

下面我们分别对 $x^* \pm y^*, x^* y^*, \frac{x^*}{y^*}$ 的误差进行讨论.

(1) 设 $z^* = x^* + y^*$, 则 z^* 的绝对误差为

$$e(z^*) = z^* - z = (x^* + y^*) - (x + y) = (x^* - x) + (y^* - y) = e(x^*) + e(y^*)$$

z^* 的相对误差则为

$$e_r(z^*) = \frac{e(z^*)}{z^*} = \frac{e(x^*) + e(y^*)}{x^* + y^*}$$

同理, 当 $z^* = x^* - y^*$ 时, z^* 的绝对误差为

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

z^* 的相对误差为

$$e_r(z^*) = \frac{e(z^*)}{z^*} = \frac{e(x^*) - e(y^*)}{x^* - y^*}$$

(2) 设 $z^* = x^* y^*$, 则 z^* 的绝对误差为

$$\begin{aligned} e(z^*) &= z^* - z = x^* y^* - xy = x^* y^* - xy^* + xy^* - xy \\ &= (x^* - x)y^* + x(y^* - y) = e(x^*)y^* + xe(y^*) \end{aligned}$$

由于精确值 x 通常未知, 所以一般用近似值 x^* 代替, 从而有

$$e(z^*) = e(x^*)y^* + x^*e(y^*)$$

z^* 的相对误差为

$$e_r(z^*) = \frac{e(z^*)}{z^*} = \frac{e(x^*)y^* + x^*e(y^*)}{x^*y^*} = \frac{e(x^*)}{x^*} + \frac{e(y^*)}{y^*} = e_r(x^*) + e_r(y^*)$$

(3) 设 $z^* = \frac{x^*}{y^*}$, 则 z^* 的绝对误差为

$$\begin{aligned} e(z^*) &= z^* - z = \frac{x^*}{y^*} - \frac{x}{y} = \frac{x^*y - xy^*}{y^*y} = \frac{(x^*y - xy) - (xy^* - xy)}{y^*y} \\ &= \frac{(x^* - x)y - x(y^* - y)}{y^*y} = \frac{e(x^*)y - xe(y^*)}{y^*y} \end{aligned}$$

同样, 分别用 x^*, y^* 近似代替 x, y , 有

$$e(z^*) = \frac{e(x^*)y^* - x^*e(y^*)}{(y^*)^2}$$

z^* 的相对误差为

$$e_r(z^*) = \frac{e(z^*)}{z^*} = \frac{e(x^*)y^* - x^*e(y^*)}{x^*y^*} = e_r(x^*) - e_r(y^*)$$

综上所述, 对近似值 x^*, y^* 做四则运算后, 其绝对误差和相对误差分别为

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

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

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

从绝对误差 $e(x^* \pm y^*), e(x^* y^*), e\left(\frac{x^*}{y^*}\right)$ 的公式中可以看出, 其形式与微分运算形式类似. 那么该形式是否可以进一步推广呢?

设 $y = f(x)$, 若 x 的近似值为 x^* , 则 y 的近似值为 $y^* = f(x^*)$. 如果 $f(x)$ 具有二阶连续导数, 根据泰勒(Taylor)公式, 可得

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

所以

$$\begin{aligned} e(y^*) &= y^* - y = f(x^*) - f(x) = f'(x)(x^* - x) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x^* - x)^2 \\ &= f'(x)e(x^*) + \frac{f''(\xi)}{2!}e(x^*)^2 \end{aligned}$$

当 $e(x^*)$ 充分小时, 可以舍去上式右端第二项 ($e(x^*)$ 的高阶无穷小), 而取 $f'(x)e(x^*)$ 作为 y^* 的绝对误差, 即

$$e(y^*) = f'(x)e(x^*)$$

将 $y^* = f(x^*)$ 代入, 有

$$e(f(x^*)) = f'(x)e(x^*) \quad (1.3)$$

从上式可以看出, 其绝对误差运算形式也与微分运算形式类似.

同样, $y^* = f(x^*)$ 的相对误差为

$$e_r(f(x^*)) = \frac{e(f(x^*))}{f(x)} = \frac{f'(x)}{f(x)}e(x^*) \quad (1.4)$$

对于多元函数 $z = f(x, y)$, 也有类似结论, 即

$$e(z^*) = e(f(x^*, y^*)) = \frac{\partial f(x, y)}{\partial x}e(x^*) + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y}e(y^*)$$

由此, 还可以得到绝对误差限和相对误差限的相应结论, 这里不再叙述.

1.2.4 有效数字

在计算或测量过程中, 一般要按“四舍五入”的原则, 取数字的前有限位作为该数字的近似值. 例如, 圆周率 $\pi = 3.1415926\cdots$, 有无限位小数. 在具体问题中, 必须取其前有限位参与计算.

若取 π 的前 3 位数字, 可得近似值 $\pi^* = 3.14$, 其绝对误差为

$$e(\pi^*) = \pi^* - \pi \approx -0.0016$$

因为

$$|e(\pi^*)| \leq 0.005 = \frac{1}{2} \times 0.01$$

所以 π^* 的绝对误差限为

$$\epsilon(\pi^*) = \frac{1}{2} \times 0.01$$

若取 π 的前 5 位数字, 可得近似值 $\pi^* = 3.1416$, 其绝对误差为

$$e(\pi^*) = \pi^* - \pi \approx 0.000007$$

因为

$$|e(\pi^*)| \leq 0.00005 = \frac{1}{2} \times 0.0001$$

所以 π^* 的绝对误差限为

$$\varepsilon(\pi^*) = \frac{1}{2} \times 0.0001$$

若取 π 的前 6 位数字, 可得近似值 $\pi^* = 3.14159$, 其绝对误差为

$$e(\pi^*) = \pi^* - \pi \approx -0.0000026$$

因为

$$|e(\pi^*)| \leq 0.000005 = \frac{1}{2} \times 0.00001$$

所以 π^* 的绝对误差限为

$$\varepsilon(\pi^*) = \frac{1}{2} \times 0.00001$$

分析近似值 π^* 的误差限可以看出, 将 π 进行四舍五入之后所得到的近似值, 其绝对误差限都是它末位的半个单位. 为了更好地描述近似值的这种性质, 下面给出有效数字的定义.

定义 1.5 若近似数 x^* 的绝对误差限是 x^* 某一位的半个单位, 且从该位起, 直到左边第一个非零数字为止, 共有 n 位, 则称 x^* 有 n 位有效数字.

例如, 设 $x^* = 3.1415926 = 0.31415926 \times 10^1$, 若

$$e(x^*) = \frac{1}{2} \times 0.01 = \frac{1}{2} \times 10^{-3} \times 10^1$$

则 x^* 有 3 位有效数字.

设 $x^* = 0.0031415926 = 0.31415926 \times 10^{-2}$, 若

$$e(x^*) = \frac{1}{2} \times 0.0000001 = \frac{1}{2} \times 10^{-5} \times 10^{-2}$$

则 x^* 有 5 位有效数字.

设 $x^* = 31415926 = 0.31415926 \times 10^8$, 若

$$e(x^*) = \frac{1}{2} \times 10^2 = \frac{1}{2} \times 10^{-6} \times 10^8$$

则 x^* 有 6 位有效数字.

一般地, 若 x 的近似值 x^* 可表示成如下形式

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

其中, m 为整数, $a_i \in \{0, 1, 2, \cdots, 9\}$, $a_1 \neq 0$. 且 x^* 的绝对误差满足

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

则称 x^* 有 n 位有效数字.

从上述讨论可以看出,有效数字的位数与绝对误差、绝对误差限之间存在一定关系.事实上,有效数字位数与相对误差、相对误差限之间也存在某种关系.

定理 1.1 如果 x 的近似值 x^* 可表示成

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

其中, m 为整数, $a_i \in \{0, 1, 2, \cdots, 9\}$, $a_1 \neq 0$. 那么

(1) 若 x^* 具有 n 位有效数字, 则其相对误差限 $\epsilon_r(x^*) = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$.

(2) 若 x^* 的相对误差限 $\epsilon_r(x^*) = \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1}$, 则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证 仅证当 $m = 0$ 时的情形, 当 $m \neq 0$ 时, 同理可得.

(1) 因为 $x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n$ 有 n 位有效数字, 所以

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

又由于 $|x^*| = 0.a_1a_2\cdots a_n \geq 0.a_1$, 因此

$$|e_r(x^*)| = \left| \frac{e(x^*)}{x^*} \right| \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{-n}}{0.a_1} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$$

即

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

(2) 因为 $x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n$ 的相对误差限为

$$\epsilon_r(x^*) = \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} = \frac{1}{2} \frac{1}{0.(a_1+1)} \times 10^{-n}$$

而且

$$|x^*| = 0.a_1a_2\cdots a_n \leq 0.(a_1+1)$$

所以

$$|e(x^*)| \leq \epsilon(x^*) = \epsilon_r(x^*) |x^*| \leq \frac{1}{2} \frac{1}{0.(a_1+1)} \times 10^{-n} \times 0.(a_1+1) = \frac{1}{2} \times 10^{-n}$$

根据有效数字的定义可知, x^* 至少具有 n 位有效数字.

1.3 其他预备知识

在本书后面各章节中, 需要用到内积、正交、范数等知识. 在微积分学和代数学中我们对这些概念已经有所了解, 这里仅作简单的回顾与归纳.

1.3.1 内积

(1) **向量内积** 设有两个 n 维向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^T$, 则

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = x_1y_1 + x_2y_2 + \cdots + x_ny_n$$

称为向量 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 的内积.

向量内积具有以下性质(其中 x, y, z 为 n 维向量, λ 为实数):

① $(x, x) \geq 0$, 当且仅当 $x = 0$ 时 $(x, x) = 0$;

② $(x, y) = (y, x)$;

③ $(x + y, z) = (x, z) + (y, z)$;

④ $(\lambda x, y) = \lambda(x, y)$.

(2) 函数内积 将向量换成函数, 也可得到两个函数 $f(x)$ 与 $g(x)$ 的内积.

设函数 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上连续, 则

$$(f(x), g(x)) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx \quad (\rho(x) \text{ 为已知非负权函数})$$

为函数 $f(x)$ 与 $g(x)$ 的内积.

例如, 若在区间 $[-\pi, \pi]$ 上取权函数 $\rho(x) = \frac{1}{\pi}$, 则有

$$(\sin nx, \sin nx) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin nx \sin nx dx = 1 \quad (n = 1, 2, \dots)$$

$$(\cos nx, \cos nx) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \cos nx dx = 1 \quad (n = 1, 2, \dots)$$

函数的内积具有以下性质(其中 $f(x), g(x), h(x)$ 为区间 $[a, b]$ 上的连续函数, λ 为实数):

① $(f(x), f(x)) \geq 0$, 当且仅当 $f(x) \equiv 0$ 时 $(f(x), f(x)) = 0$;

② $(f(x), g(x)) = (g(x), f(x))$;

③ $(f(x) + g(x), h(x)) = (f(x), h(x)) + (g(x), h(x))$;

④ $(\lambda f(x), g(x)) = \lambda(f(x), g(x))$.

我们还可以得到其他线性空间中任意两个元素的内积, 这里不再叙述.

1.3.2 范数

(1) 向量范数 设向量 $x = (1, 2, 3)^T$, 则 x 与 x 内积的平方根

$$\sqrt{(x, x)} = \sqrt{1^2 + 2^2 + 3^2} = \sqrt{14}$$

恰为向量 x 的长度(模), 这里我们称之为向量的范数.

针对 n 维向量 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, 最常见的向量范数有

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{称为向量 } x \text{ 的 2-范数})$$

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i| \quad (\text{称为向量 } x \text{ 的 1-范数})$$

$$\|x\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \quad (\text{称为向量 } x \text{ 的 } \infty\text{-范数})$$

向量 x 的三种范数可记为 $\|x\|_p$ ($p = 1, 2, \infty$), 或统一记为 $\|x\|$. 向量范数具有如下性质(其中 x, y 为 n 维向量, λ 为实数):

① $\|x\| \geq 0$, 当且仅当 $x = 0$ 时, $\|x\| = 0$;

② $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$;

③ $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.

可以证明, 关于向量范数有如下的等价性定理.