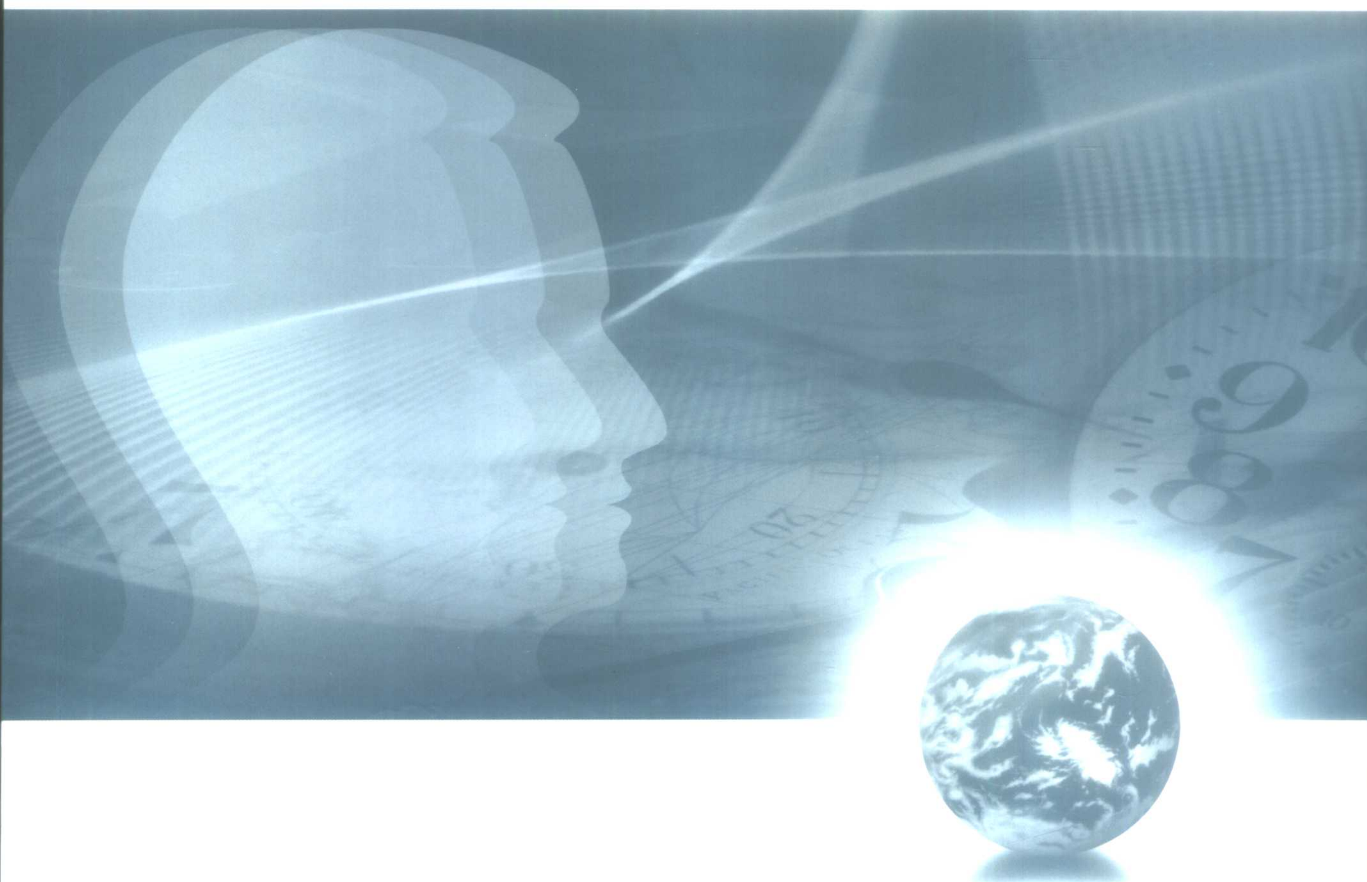
高等院校计算机科学与技术“十五”规划教材

数值分析与算法



徐士良 编著

机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

高等院校计算机科学与技术“十五”规划教材

数值分析与算法

徐士良 编著

机 械 工 业 出 版 社

本书以数值分析为基础，介绍算法设计与分析，并给出了工程上常用的、行之有效的具体算法。

全书共分9章。主要内容包括：算法概念与误差分析，矩阵运算与线性代数方程组的求解，矩阵特征值的计算，非线性方程与方程组的求解，代数插值法，函数逼近与拟合，数值积分与数值微分，常微分方程数值解，连分式及其新计算法。

本书可以作为高等理工科院校非数学专业的“数值分析”或“计算方法”等课程的教材，也可作为广大工程技术人员参考用书。

图书在版编目（CIP）数据

数值分析与算法/徐士良编著.—北京：机械工业出版社，2003.3
高等院校计算机科学与技术“十五”规划教材
ISBN 7-111-11782-4

Ⅰ.数… Ⅱ.徐… Ⅲ.电子计算机-计算方法-高等学校-教材 Ⅳ.TP301.6

中国版本图书馆CIP数据核字（2003）第017982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：胡毓坚
责任编辑：时　静
责任印制：付方敏

三河市宏达印刷有限公司印刷·新华书店北京发行所发行

2003年8月第1版·第2次印刷
787mm×1092mm 1/16·17.25印张·424千字
5 001—10 000册
定价：25.00元

出 版 说 明

信息技术高度普及的今天，具备一定层次的信息技术素养成为社会素质教育的一个重要目标，由此对高等院校的计算机专业教育提出了更高更新的要求。教育水平提高的关键是教学质量，那么对教学质量有直接影响的教材建设就成为了计算机专业教育的根本，为重中之重。

适逢高等院校计算机专业教育改革的关键时期，为配合相关的教材建设，机械工业出版社会同全国在该领域内享誉盛名、具备雄厚师资和技术力量的高等院校，包括清华大学、上海交通大学、南京大学、成都电子科技大学、东南大学、西安电子科技大学、解放军理工大学、北京科技大学等重点名校，组织了多位长期从事教学工作的骨干教师，集思广益，对当前高等院校的教学现状开展了广泛而深入的研讨，继而紧密结合当前技术发展需要并针对教学改革所提出的问题，精心编写了这套面向普通高等院校计算机专业的系列教材，并陆续出版。

本套教材内容覆盖了普通高等院校计算机专业学生的必修课程，另外还恰如其分地添加了一些选修课程，总体上分为基础、软件、硬件、网络和多媒体五大类。在编写过程中，对教学改革力度比较大、内容新颖以及各院校急需的并且适应社会经济发展的新教材，优先选择出版。

本套教材注重系统性、普及性和实用性，力求达到专业基础课教材概念清晰、深度合理的标准，并且注意与专业课教学的衔接；专业课教材覆盖面广、深浅适中，在体现相关领域最新发展的同时注重理论联系实际。全套教材体现了教育改革的最新思想，可作为高等院校计算机科学与技术专业的教学用书，同时也是培训班和自学使用的最佳教材。

机械工业出版社

前　　言

本书是作者总结20多年的教学实践经验编写而成的。其内容以数值分析为基础,以实际应用为目的,以计算机为计算工具,对工程中常见的数值计算问题建立行之有效的算法。本书一开始就强调了算法设计与分析的基本方法。通过例题说明方法的本质,从而避免了许多数学上的繁琐证明过程。

全书共分9章。各章的主要内容如下。

第1章是绪论。这一章是本书的基础,主要包括:误差与运算误差,算法的基本概念,数值型算法的基本特点,算法设计的基本方法,对算法的复杂度分析以及数值型算法的稳定性分析。

第2章是矩阵与线性代数方程组。主要包括:一般线性代数方程组的直接解法与迭代解法,带型方程组的解法,求解对称正定方程组的共轭梯度法,矩阵的三角分解与QR分解,矩阵求逆,最后还介绍了求解托伯利兹系统的方法。

第3章是矩阵特征值。主要包括:计算绝对值最大的特征值的乘幂法,求对称矩阵特征值的雅可比方法,求一般实矩阵全部特征值的QR方法。

第4章是非线性方程与方程组。主要包括:求方程实根的各种迭代法,求多项式方程全部根的QR方法,求解非线性方程组的牛顿法、拟牛顿法等。

第5章是代数插值法。主要包括:拉格朗日插值法,埃特金逐步插值法,牛顿插值法,埃尔米特插值法,样条插值法。

第6章是函数逼近与拟合。主要包括:正交多项式的基本概念,最佳一致逼近多项式,最佳均方逼近多项式,最小二乘曲线拟合。

第7章是数值积分与数值微分。主要包括:插值求积公式,变步长梯形与辛卜生求积法,龙贝格求积法,高斯求积法等,最后简单介绍数值微分的概念。

第8章是常微分方程数值解。主要包括:介绍求解常微分方程初值问题的欧拉方法、龙格-库塔法,高阶微分方程与微分方程组的求解,最后简单介绍线性多步法。

第9章是连分式及其新计算法。主要包括:连分式的基本概念,连分式插值法,求解各种数值问题的连分式解法。

在本书的配套书《数值分析算法描述与习题解答》中给出了各章主要算法的C语言描述和习题答案。

本书的各章之间基本上互相独立,学习时可以根据课时和实际需要选取其中的一些章节。阅读本书只需要具备微积分与线性代数方面的基础知识即可。如果要使用《数值分析算法描述与习题解答》中各算法的C函数,则还需要熟悉C语言方面的知识。

本书通俗易懂,例题和习题丰富。可以作为高等理工科院校非数学专业的《数值分析》或《计算方法》等课程的教材,也可作为广大工程技术人员的自学教材与参考书。在本书编写过程中,白小玲、葛兵、徐娟、徐艳、马尔妮等同志做了大量的工作,在此表示感谢。

限于水平,书中难免会有错误和不当之处,恳请读者批评指正。

徐士良

2002年12月于清华

目　录

出版说明

前言

第 1 章　绪论 …… 1

1.1　误差与运算误差分析 …… 1

1.1.1　数值计算中误差的不可避免性 …… 1

1.1.2　绝对误差与相对误差 …… 2

1.1.3　有效数字 …… 4

1.1.4　运算误差分析 …… 8

1.2　关于算法 …… 13

1.2.1　算法的基本概念 …… 13

1.2.2　数值型算法的特点 …… 14

1.2.3　算法设计基本方法 …… 16

1.2.4　算法的复杂度 …… 26

1.2.5　数值型算法的稳定性 …… 30

习题 1 …… 34

第 2 章　矩阵与线性代数方程组 …… 36

2.1　一般线性代数方程组的直接解法 …… 36

2.1.1　高斯消去法 …… 37

2.1.2　选主元 …… 40

2.1.3　高斯-约当消去法 …… 41

2.2　带型方程组 …… 42

2.2.1　三对角方程组 …… 42

2.2.2　一般带型方程组 …… 45

2.3　线性代数方程组的迭代解法 …… 48

2.3.1　简单迭代法 …… 48

2.3.2　高斯-赛德尔迭代法 …… 52

2.3.3　松弛法 …… 53

2.4　共轭梯度法 …… 54

2.4.1　几个基本概念 …… 54

2.4.2　共轭梯度法 …… 56

2.5　矩阵分解 …… 61

2.5.1　矩阵的三角分解 …… 61

2.5.2　矩阵的 *QR* 分解 …… 66

2.6　矩阵求逆 …… 71

2.6.1　原地工作的矩阵求逆 …… 71

2.6.2　全选主元矩阵求逆 …… 75

2.7 托伯利兹系统 …… 76
2.7.1 托伯利兹矩阵求逆的快速算法 …… 77
2.7.2 求解托伯利兹型线性代数方程组的递推算法 …… 82
习题 2 …… 85
第 3 章 矩阵特征值 …… 88
3.1 计算绝对值最大的特征值的乘幂法 …… 88
3.2 求对称矩阵特征值的雅可比方法 …… 91
3.3 *QR* 方法求一般实矩阵的全部特征值 …… 97
3.3.1 *QR* 方法的基本思想 …… 97
3.3.2 化一般实矩阵为上 H 矩阵 …… 99
3.3.3 双重步 *QR* 方法求矩阵特征值 …… 100
习题 3 …… 104
第 4 章 非线性方程与方程组 …… 106
4.1 方程求根的基本思想 …… 106
4.1.1 方程求根的基本过程 …… 106
4.1.2 对分法求方程的实根 …… 108
4.1.3 简单迭代法 …… 109
4.2 埃特金迭代法 …… 113
4.3 牛顿迭代法与插值法 …… 115
4.3.1 牛顿迭代法 …… 115
4.3.2 插值法 …… 118
4.4 控制迭代过程结束的条件 …… 122
4.5 *QR* 方法求多项式方程的全部根 …… 124
4.6 非线性方程组的求解 …… 125
4.6.1 牛顿法 …… 125
4.6.2 拟牛顿法 …… 127
习题 4 …… 129
第 5 章 代数插值法 …… 131
5.1 插值的基本概念 …… 131
5.2 拉格朗日插值法 …… 133
5.2.1 拉格朗日插值多项式的构造 …… 133
5.2.2 插值多项式的余项 …… 135
5.2.3 插值的逼近性质 …… 138
5.3 埃特金逐步插值法 …… 139
5.4 牛顿插值法 …… 143
5.4.1 差商及其牛顿插值公式 …… 143
5.4.2 差分与等距结点插值公式 …… 146
5.5 埃尔米特插值法 …… 150

5.6 样条插值法 …… 151
5.6.1 样条函数 …… 151
5.6.2 三次样条插值函数的构造 …… 152
习题 5 …… 161
第 6 章 函数逼近与拟合 …… 163
6.1 正交多项式 …… 163
6.1.1 正交多项式的构造 …… 164
6.1.2 切比雪夫多项式 …… 166
6.1.3 勒让德多项式 …… 173
6.1.4 其他常用的多项式 …… 174
6.2 一致逼近 …… 175
6.2.1 一致逼近的基本概念 …… 175
6.2.2 最佳一致逼近多项式 …… 177
6.2.3 里米兹算法 …… 180
6.3 均方逼近 …… 182
6.3.1 均方逼近的基本概念 …… 182
6.3.2 最佳均方逼近多项式 …… 182
6.4 最小二乘曲线拟合 …… 184
6.4.1 最小二乘曲线拟合的基本概念 …… 184
6.4.2 用正交多项式作最小二乘曲线拟合 …… 189
习题 6 …… 192
第 7 章 数值积分与数值微分 …… 194
7.1 插值求积公式 …… 194
7.2 变步长求积法 …… 198
7.2.1 变步长梯形求积法 …… 199
7.2.2 变步长辛卜生求积法 …… 200
7.3 龙贝格求积法 …… 201
7.4 高斯求积法 …… 203
7.4.1 代数精度的概念 …… 203
7.4.2 高斯求积法 …… 205
7.4.3 几种常用的高斯求积公式 …… 208
7.5 高振荡函数求积法 …… 211
7.6 数值微分 …… 217
习题 7 …… 218
第 8 章 常微分方程数值解 …… 220
8.1 常微分方程数值解的基本思想 …… 220
8.2 欧拉方法 …… 223
8.2.1 基本公式 …… 223

8.2.2 误差分析 …… 225
8.2.3 步长的自动选择 …… 226
8.2.4 改进的欧拉公式 …… 228
8.3 龙格-库塔法 …… 229
8.4 一阶微分方程组与高阶微分方程 …… 232
8.4.1 一阶微分方程组 …… 232
8.4.2 高阶微分方程 …… 234
8.5 线性多步法 …… 235
8.5.1 阿当姆斯方法 …… 235
8.5.2 哈明方法 …… 237
8.6 常微分方程数值解法的相容性、收敛性与稳定性 …… 240
习题 8 …… 243
第 9 章 连分式及其新计算法 …… 244
9.1 连分式 …… 244
9.1.1 连分式的基本概念 …… 244
9.1.2 连分式的主要性质 …… 246
9.2 函数连分式 …… 249
9.2.1 函数连分式的基本概念 …… 249
9.2.2 函数连分式的主要性质 …… 250
9.2.3 函数连分式的计算 …… 252
9.3 变换级数为连分式 …… 252
9.4 连分式插值法 …… 254
9.4.1 连分式插值的基本概念 …… 254
9.4.2 连分式插值函数的构造 …… 254
9.4.3 连分式逐步插值 …… 256
9.5 方程求根的连分式解法 …… 257
9.6 一维积分的连分式解法 …… 260
9.7 常微分方程初值问题的连分式解法 …… 262
习题 9 …… 265
参考文献 …… 266

第1章　绪　　论

1.1　误差与运算误差分析

1.1.1　数值计算中误差的不可避免性

误差在数值计算中是不可避免的。也就是说，在数值方法中，绝大多数情况下不存在绝对的严格和精确。

有人会说，计算机科学的发展，为科学计算以及数据处理提供了高速和高精度的计算工具，但这只是问题的一个方面。不可否认，由于计算机技术的发展，许多复杂的数值计算问题都得到了很好解决（这些问题用手算是不可想象的），但计算机与任何计算工具一样，它所处理的数值型数据只能是近似的，如果处理不当，这些近似的数据经过大量的运算后，其结果可能会出现较大的偏差。实际上，在用计算机进行数值计算时，各个环节上都有可能产生误差。

为了说明数值计算过程中误差的来源，下面简单介绍在用计算机解决实际问题的各个主要步骤中所引进的各种误差。

(1) 构造数学模型

为了便于进行数值计算，一般首先需要将实际问题归纳为数学问题，这就是常说的需要建立一个合适的数学模型。

在将实际问题归纳为数学问题时，通常总要附加许多限制，并且要忽略一些次要的因素，以便建立起一个“理想化”的数学模型。因此，这样得到的数学模型实际上只是客观现象的一种近似描述。而这种经过归纳后的数学描述上的近似，必然也就引进了误差。这种数学描述上的近似所引进的误差称为模型误差。

在将实际问题归纳为数学问题的过程中，除了模型误差外，还有一种很重要的误差。在构造数学模型时，为了对问题本身作抽象近似，除了忽略一些次要因素外，还需要对主要因素通过实验观测取得各种有效数据，根据实验观测到的数据进行分析总结，从而确定数学模型中的各种参数。由于条件的限制，通过实验观测到的数据与真值之间往往是有一定差异的，这也就给计算引进了一定的误差。这种误差称为观测误差。

(2) 制定解题方案，确定计算的近似公式

数学模型建立后，计算机还不能直接解决。这是因为，对于计算机来说，只能作一些它所规定的并且是有限次的运算或判断，以及在一些规定的设备上进行输入与输出。因此，还必须为数学模型建立一个便于用计算机进行计算的近似公式。

大家知道，许多数学运算（如微分、积分与无穷级数求和等）是通过极限过程来定义的，而实际上计算机只能完成有限次的算术运算与逻辑运算。因此，在实际应用时，还需要将数学模型变成实际可行的解题方案，即将数学模型加工成算术运算与逻辑运算的有限序列。而这种加工又往往表现为对某种无穷过程的“截断”或计算方法的近似。例如，对于收敛的无穷级数，

通常用它前面的有限项之和来近似代替无穷级数的和，实际上抛弃了无穷级数后面的无穷多项，因此便产生了误差。又例如，用梯形公式计算积分的近似数，这方法本身就有一定的误差。这类误差统称为方法误差或截断误差。

(3) 上机计算

解题方案确定之后，就可以通过某种工具来具体描述解题步骤，然后编制计算机程序，调试通过后就可以在计算机上正式运行，最后得到所需要的结果。

虽然，计算机科学的发展，为科学计算以及数据处理提供了高速和高精度的计算工具，但计算机与任何计算工具一样，总是受有效数字位数的限制、在进行数值计算时，其处理的数据总是近似的。在计算机中，任何数据都要转换成二进制形式才能进行处理，而绝大部分的数值型数据是无法精确地用二进制形式表示的，也就是说，即使是一个准确的数，为了用计算机进行处理，在转换成二进制数时也就变成近似的了。这就说明，在计算机中，参加运算的数据只能具有有限位的有效数字，其超过部分将被系统处理掉，即产生了误差。这种误差称为舍入误差。

由上所述，在数值计算过程中，误差的产生是不可避免的，其误差的类型也是各种各样的，它们会直接影响到计算结果的准确性。

虽然数值计算中的误差是不可避免的，但是，在解决实际问题时，应该尽量减少产生误差的机会，尽量减小某些误差或将它们限制在许可的范围之内。这是因为误差在计算过程中会产生不好的效应。例如，某个参数由于观测引进的误差可能是微不足道的，或者少量的舍入误差对中间的计算结果影响不大，但是，这些误差经过计算机的千百万(甚至更多)次的运算以后，误差的积累就可能大得惊人。初始数据的微小误差也可能会引起严重错误，甚至会导致完全错误的结果。

1.1.2 绝对误差与相对误差

1. 绝对误差

定义 1-1 设 x 为准确数，x^* 为其近似数，则

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

称为近似数 x^* 关于准确数 x 的绝对误差。

一般来说，由于准确数 x 是未知的，因此，无法根据定义 1-1 准确地计算出某个近似数的绝对误差，而只能根据测量或计算的具体情况估计出误差绝对值的一个范围，也就是估计出 $|E(x)|$ 的上界。

设

$$|E(x)|=|x-x^*|\leqslant\eta$$

则称 η 为近似数 x^* 关于准确数 x 的绝对误差限。

前面说过，一般无法计算出由定义 1-1 所定义的绝对误差，因此，工程上就将绝对误差限称为绝对误差。在本书中，如果没有特殊说明，绝对误差即指绝对误差限，有时简称为误差。

当估计出近似数 x^* 关于准确数 x 的绝对误差限 η 后，工程上可以用以下两种方法表示准确数 x 所在的范围：

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

或

$$x = x^* \pm \eta$$

在计算函数值 $f(x)$时，当自变量 x 有一个误差时，其计算得到的函数值也有一个误差。如果给出了自变量 x 的绝对误差为$E(x)$，则函数值的绝对误差可以用下式来估计：

$$E[f(x)] = f'(x)E(x)$$

2. 相对误差

绝对误差的大小反映了近似数偏离准确数的程度，还不能完全反映近似数的准确程度。例如，设有两个量 x 和y，其中 $x = 10 \pm 1$，$y = 1000 \pm 5$。显然，近似数 $y* = 1000$ 的绝对误差比近似数 $x^* = 10$ 的绝对误差大了 4 倍，但并不能说 y^* 的准确程度要比 x^* 差，实际上正好相反，y^* 的准确程度要优于 x^*。

为了能够确切地表示一个近似数的准确程度，需要引进一个相对误差的概念。

定义 1-2 设 x 为准确数，x^* 为其近似数。则

$$E_r(x) = \frac{E(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x}$$

称为近似数 x^* 关于准确数 x 的相对误差。

实际上，由于准确数 x 一般是不知道的，因此，相对误差通常又定义为

$$E_r(x) = \frac{E(x)}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*}$$

由上述定义可以看出，相对误差说明了近似数 x^* 关于准确数 x 的绝对误差$E(x)$与近似数本身比较起来所占的比例，因而更客观地反映了该近似数的准确程度。

和绝对误差一样，由于准确数 x 一般不知道，其绝对误差 $E(x) = x - x^*$ 无法准确地算出，因此也就无法确定出相对误差 $E_r(x)$的准确数，而只能估计出它的一个范围。

如果

$$|E_r(x)| = \left|\frac{x - x^*}{x^*}\right| \leqslant \delta$$

则称 δ 为近似数x^* 关于准确数 x 的相对误差限。

在实际应用中，就将相对误差限称为相对误差。在本书中，如果没有特殊说明，相对误差即指相对误差限。

根据相对误差的定义，相对误差限 δ 与绝对误差限 η 之间有如下关系：

$$\delta = \left|\frac{\eta}{x^*}\right|$$

【例 1-1】 设 x 的绝对误差为 η，试估计 $f(x) = e^x$ 的相对误差。

解：$|E_r[f(x)]| = \left|\frac{E[f(x)]}{f(x)}\right| = \left|\frac{f'(x)E(x)}{f(x)}\right| = \left|\frac{e^x E(x)}{e^x}\right| = |E(x)| = \eta$

【例 1-2】 计算球体积要使相对误差限为 1%，问度量半径 R 时允许的相对误差限是多

少?

解:球体积的计算公式为

$$V(R)=\frac{4}{3}\pi R^3$$

当半径 R 有一误差 $E(R)$ 时,球体积的相对误差为

$$|E_r[V(R)]|=\left|\frac{E[V(R)]}{V(R)}\right|=\left|\frac{V'(R)E(R)}{V(R)}\right|=\left|\frac{4\pi R^2E(R)}{\frac{4}{3}\pi R^3}\right|$$

$$=3\left|\frac{E(R)}{R}\right|=3|E_r(R)|$$

现要求 $|E_r[V(R)]|=3|E_r(R)|\leqslant 1\%$,即 $|E_r(R)|\leqslant 0.3333\%$。

1.1.3 有效数字

在实际应用中,除了用相对误差来反映一个近似数的准确程度外,还经常用有效数字的位数来反映近似数的准确程度。

定义 1-3 设 x 为准确数,x^* 为其近似数。若

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

则称用 x^* 近似表示 x 时准确到小数点后第 k 位;并称从小数点之后的第 k 位数字起直到最左边的非零数字之间的所有数字为有效数字;称有效数字的位数为有效数位。

定义 1-4 设 x 为准确数,x^* 为其近似数,且表示成如下形式:

$$x^*=\pm 10^m(x_1\times 10^{-1}+x_2\times 10^{-2}+\cdots+x_n\times 10^{-n})$$

其中 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 都是 0~9 十个数字之一,且 $x_1\neq 0$,n 是正整数,m 是整数。若

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

则称近似数 x^* 具有 n 位有效数字。

【例 1-3】 设 $\sqrt{20}=4.472136$ 具有 7 位有效数字,试确定下列各近似数的有效数字位数:

(1) $\sqrt{20}\approx 4.42$ (2) $\sqrt{20}\approx 4.47164$ (3) $\sqrt{20}\approx 4.469576$

解:设 $x=\sqrt{20}=4.472136$,x^* 为各近似数。

(1) 设 $\sqrt{20}\approx x^*=4.42=10^1\times 0.442$。其中 $m=1$。

$|x-x^*|=|4.472136-4.42|=0.052136\leqslant 0.5\times 10^0=0.5\times 10^{m-1}$

因此,根据定义 1-3 有 $k=0$,即该近似数准确到个位数,共有 1 位有效数字。根据定义 1-4 有 $n=1$,同样是具有 1 位有效数字。

(2) 设 $\sqrt{20}\approx x^*=4.47164=10^1\times 0.447164$。其中 $m=1$。。

$|x-x^*|=|4.472136-4.47164|=0.000396\leqslant 0.5\times 10^{-3}=0.5\times 10^{m-4}$

因此,根据定义 1-3 有 $k=3$,即该近似数准确到小数点后第 3 位,共有 4 位有效数字。根据定义 1-4 有 $n=4$,同样是具有 4 位有效数字。

(3) 设 $\sqrt{20}\approx x^*=4.469576=10^1\times 0.4469576$。其中 $m=1$。。

$|x-x^*|=|4.472136-4.469576|=0.00256\leqslant 0.5\times 10^{-2}=0.5\times 10^{m-3}$

因此，根据定义 1-3 有 $k=2$，即该近似数准确到小数点后第 2 位，共有 3 位有效数字。根据定义 1-4 有 $n=3$，同样是具有 3 位有效数字。

由这个例子可以看出，关于有效数字的定义 1-3 与定义 1-4 是等价的。

【例 1-4】 设近似数 $x^*=0.937$ 具有三位有效数字，估计用 x^* 代替 x 时的相对误差。并估计计算函数 $f(x)=\sqrt{1-x}$ 值时的绝对误差与相对误差。

解：因为 $x^*=0.937$ 具有三位有效数字，所以

$$|E(x)|=|x-x^*|\leqslant 0.0005$$

由此可得用 x^* 代替 x 时的相对误差为

$$|E_r(x)|=\left|\frac{x-x^*}{x^*}\right|\leqslant\frac{0.0005}{0.937}\approx 0.000534=0.0534\%$$

计算函数 $f(x)=\sqrt{1-x}$ 值时的绝对误差为

$$|E[f(x)]|=|f(x)-f(x^*)|=|f'(x^*)E(x)|=\left|\frac{-1}{2\sqrt{1-x^*}}E(x)\right|$$

$$=\frac{0.0005}{2\sqrt{1-0.937}}\approx 0.001$$

计算函数 $f(x)=\sqrt{1-x}$ 值时的相对误差为

$$|E_r[f(x)]|=\frac{|E[f(x)]|}{|f(x^*)|}=\frac{0.001}{\sqrt{1-0.937}}\approx 0.004=0.4\%$$

一个近似数有效数字位数反映了该近似数的准确程度，而相对误差也反映了近似数的准确程度。因此，一个近似数的有效数字位数与该近似数的相对误差具有一定的联系，在实际应用中，可以从一个近似数的有效数字位数来确定该近似数的相对误差，同样，也可以由近似数的相对误差来确定该近似数的有效数字的位数。

下面给出反映近似数的有效数字位数与相对误差之间关系的两个基本结论。

定理 1-1 若近似数 x^* 具有 n 位有效数字，则其相对误差满足

$$|E_r(x)|\leqslant\frac{1}{2x_1}\times 10^{-(n-1)}$$

证明过程中的 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 都是 0～9 十个数字之一，且 x_1 为最左边的一位有效数字，即 $x_1\neq 0$。

证明 设近似数 x^* 的表示形式为

$$x^*=\pm 10^m(x_1\times 10^{-1}+x_2\times 10^{-2}+\cdots+x_n\times 10^{-n}+\cdots)$$

且 $x_1\neq 0$。显然有

$$|x^*|\geqslant x_1\times 10^{m-1}$$

又因为已知 x^* 具有 n 位有效数字，则由有效数字的定义 1-4 可知

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

因此，近似数 x^* 近似代替 x 时的相对误差为

$$|E_r(x)| = \left|\frac{x - x^*}{x^*}\right| \leqslant \frac{\frac{1}{2}\times 10^{m-n}}{x_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2x_1}\times 10^{-(n-1)}$$

定理得证。

【例 1-5】 为了求取$\sqrt{20}$的一个近似数,使其相对误差不超过 0.1% ,则所取的近似数应具有多少位有效数字?

解:设为 $x = \sqrt{20}$取的近似数应具有 n 位有效数字,其相对误差满足

$$|E_r(x)| \leqslant \frac{1}{2x_1}\times 10^{-(n-1)} \leqslant 0.1\%$$

其中 $x_1 = 4$($\sqrt{20}$的最左边的有效数字为 4)。即

$$\frac{1}{2\times 4}\times 10^{-(n-1)} \leqslant 0.1\%$$

解得 $n \geqslant 3.097$。取 $n = 4$,即所取的近似数应具有 4 位有效数字,就可以保证其相对误差不超过 0.1% 。

需要指出的是,定理 1-1 中的条件只是充分条件,而不是必要条件。即:如果近似数 x^* 具有 n 位有效数字,则其相对误差一定满足

$$|E_r(x)| \leqslant \frac{1}{2x_1}\times 10^{-(n-1)}$$

但相对误差满足

$$|E_r(x)| \leqslant \frac{1}{2x_1}\times 10^{-(n-1)}$$

的近似数不一定具有 n 位有效数字。例 1-6 说明了这个问题。

【例 1-6】 设 $x = \sin 29°20' = 0.4900$。现取一个近似数为

$$x^* = 0.484$$

其相对误差为

$$|E_r(x)| = \left|\frac{x - x^*}{x^*}\right| = \left|\frac{0.4900 - 0.484}{0.49}\right| \leqslant 0.0125 = \frac{1}{2\times 4}\times 10^{-(2-1)}$$

即 $n = 2$。但实际上 $x^* = 0.484$ 不具有 2 位有效数字,因为其绝对误差

$$|x - x^*| = |0.4900 - 0.484| = 0.0060 > 0.005$$

不满足由定义 1-3 中规定的具有 2 位有效数字的条件。

定理 1-2 若一个近似数 x^* 的相对误差为

$$|E_r(x)| \leqslant \frac{1}{2(x_1+1)}\times 10^{-(n-1)}$$

则该近似数至少准确到 n 位有效数字(即该近似数至少具有 n 位有效数字)。其中 x_1 为最左边的一位有效数字。

证明 设近似数 x^* 的表示形式为

$$x^* = \pm 10^m (x_1 \times 10^{-1} + x_2 \times 10^{-2} + \cdots + x_n \times 10^{-n} + \cdots)$$

且 $x_1 \neq 0$。显然有

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

又因为

$$|E_r(x)| = \left|\frac{x-x^*}{x^*}\right| \leqslant \frac{1}{2(x_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

所以有

$$|x-x^*| \leqslant \frac{|x^*|}{2(x_1+1)} \times 10^{-(n-1)} \leqslant \frac{(x_1+1)\times 10^{m-1}}{2(x_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$
$$= \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

由有效数字的定义 1-4 可知，x^* 具有 n 位有效数字。

定理得证。

在实际应用中，如果已知某近似数的相对误差满足定理 1-2 中的条件，则可以认为该近似数具有 n 位有效数字；或者为了要使所取的近似数具有 n 位有效数字，则应取其相对误差满足定理 1-2 中条件的近似数。

同样需要指出的是，定理 1-2 中的条件只是充分条件，而不是必要条件。即：如果某近似数 x^* 的相对误差满足

$$|E_r(x)| \leqslant \frac{1}{2(x_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

则其一定具有 n 位有效数字；但具有 n 位有效数字的近似数，其相对误差不一定满足

$$|E_r(x)| \leqslant \frac{1}{2(x_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

下面的例子将说明这个问题。

【例 1-7】 设 $x = \sqrt{20} = 4.472136$ 具有 7 位有效数字。现取一个近似数

$$x^* = 4$$

其绝对误差为

$$|x-x^*| = |4.47216-4| \leqslant 0.5 = \frac{1}{2} \times 10^{1-1}$$

由有效数字的定义 1-4 可知，近似数 $x^* = 4$ 具有 1 位有效数字。但其相对误差

$$|E_r(x)| = \left|\frac{x-x^*}{x^*}\right| = \frac{0.472136}{4.472136} \leqslant \frac{1}{2(4+1)} \times 10^{-(1-1)} = 0.1$$

最后需要说明的是，在书写或表示一个近似数时，通常有以下两种方式：

(1) 注明该近似数 x^* 及其绝对误差 η，即将近似数写成 $x^* \pm \eta$。

(2) 在没有注明近似数的绝对误差时，则默认该近似数准确到末位数字。在这种情况下，要求从其最左边的非零数字起，直到最右边的一位数字止，都是有效数字。例如，0.00203 具有 3 位有效数字，分别为 2,0,3；3.14 也具有 3 位有效数字，分别为 3,1,4。特别需要指出的是，在这种表示方式中，0.23 与 0.2300 的有效数字的位数是不一样的，前者具有 2 位有效数字，其绝对误差不超过 0.005，而后者具有 4 位有效数字，其绝对误差不超过 0.00005。

1.1.4 运算误差分析

前面已经提到，在数值计算过程中，误差的存在是不可避免的。由于受计算机（其他计算工具也是如此）有效数字位数的限制，在实际运算过程中的每一步都不可避免地要产生误差。因此，尽量减小运算过程中每一步的误差，或者将误差限制在最小的范围之内，是数值计算中要重点考虑的问题之一。

有运算就会产生误差，但不同的运算或不同的运算步骤所产生的误差是不一样的。下面举例说明不同的运算产生不同误差的情况。

【例 1-8】 设函数

$$g(x)=10^3(1-\cos x)$$

用四位数学用表计算 $g(2^\circ)$ 的近似值。

解：求解这个问题可以用以下两种方法。

方法 1

查四位数学用表得 $\cos 2^\circ=0.9994$。因此

$$g(2^\circ)=10^3(1-\cos 2^\circ)=10^3(1-0.9994)=0.6$$

方法 2

利用三角恒等式

$$1-\cos x=2\sin^2(x/2)$$

得到

$$g(x)=10^3(1-\cos x)=2\times 10^3\sin^2(x/2)$$

查四位数学用表得 $\sin 1^\circ=0.0175$。因此

$$g(2^\circ)=2\times 10^3\sin^2 1^\circ=2\times 10^3\times(0.0175)^2=0.6125$$

在以上两种解法中，初始数据（查四位数学用表得到）都准确到小数点后第四位，但最后得到的结果并不相同。究竟哪个结果更准确一些呢？下面用相对误差的概念进行分析。

在**方法 1** 中，假设准确值 $A=\cos 2^\circ$，则函数的准确值为

$$g(2^\circ)=10^3(1-A)$$

A 的近似值为 $A^*=0.9994$，则函数的近似值为

$$g^*(2^\circ)=10^3(1-A^*)$$

其中 $|A-A^*|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-4}$。由此可以计算函数的相对误差为

$$|E_r[g(2^\circ)]|=\left|\frac{E[g(2^\circ)]}{g^*(2^\circ)}\right|=\left|\frac{g(2^\circ)-g^*(2^\circ)}{g^*(2^\circ)}\right|=\left|\frac{10^3(1-A)-10^3(1-A^*)}{10^3(1-A^*)}\right|$$

$$=\left|\frac{A-A^*}{1-A^*}\right|\leqslant\frac{\frac{1}{2}\times 10^{-4}}{1-0.9994}=\frac{1}{12}=8.3\%$$

在**方法 2** 中，假设准确值 $B=\sin 1^\circ$，则函数的准确值为