

高等教育教材

计算方法

崔国华 许如初 编著



电子工业出版社
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY

<http://www.phei.com.cn>

高等教育教材

计算方法

崔国华 许如初 编著

洪帆 主审

电子工业出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京·BEIJING

内 容 简 介

本书系统地介绍了常用的数值计算方法及有关的基础理论知识。全书共分7章,第1~6章包括引论、插值方法等计算方法的基础知识及基本理论。前6章中每章都有小结和一定数量的习题。第7章为计算实习内容,用于指导学生上机实习;该章共有6个实习,配有一定数量的编程例题和上机实习题。

本书取材适当,内容安排深入浅出、通俗易懂,易于教学、便于自学。学习本书需要具备高等数学、线性代数和算法语言等基础知识。

本书可作为本科计算机专业学生的教材,也可供成教本科、专起本计算机专业学生和有关工程技术人员的参考书。

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有,侵权必究。

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/崔国华,许如初编著.—北京:电子工业出版社,2002.7

高等教育教材

ISBN 7-5053-7813-9

I. 计… II. ①崔… ②许… III. 数值计算—计算方法—高等学校—教材 IV. 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 051751 号

责任编辑:束传政 特约编辑:李 莉

印刷者:北京市增富印刷有限责任公司

出版发行:电子工业出版社 <http://www.phei.com.cn>

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编 100036

经 销:各地新华书店

开 本:787×1092 1/16 印张:17 字数:435.2 千字

版 次:2002 年 7 月第 1 版 2002 年 7 月第 1 次印刷

印 数:5 000 册 定价:22.00 元

凡购买电子工业出版社的图书,如有缺损问题,请向购买书店调换。若书店售缺,请与本社发行部联系。
联系电话:(010)68279077

前 言

计算方法是计算机科学的重要内容。如何将解决各类问题的数学方法转化为能利用计算机实现的数值计算方法将直接关系到我们解决实际计算问题的能力以及计算机的应用广度,随着科学技术的快速发展和计算机的广泛应用,学习和掌握常用的数值计算方法及有关的基础理论知识,已成为工科高等教育的一个重要内容。对于计算机专业的成教本科学生和自学考试本科学生来说,面对其今后的实际应用,这方面的知识尤为重要。

目前,国内外关于“计算方法”的教材很多,但主要用于理工科各专业的本科生和研究生,而针对成教本、专科和夜大计算机专业学生的实际情况和专业特点的教材却少见,因此,编写一本较为通俗易懂,便于自学并与计算机专业结合较紧密的教材就十分有必要了。

本书共分7章,第1~6章中系统介绍了各种常用的数值计算方法,包括计算方法的主要原理、结论及推导。该部分各章中都配有一定数量的习题并附有答案,以便读者通过练习而进一步理解和掌握各章节的基本内容以及必要的解题技巧。这一部分用于课堂讲授,根据编者的教学实践建议用50学时左右授完较妥。第7章是计算实习,用于学生上机实验。该部分有6个实习,为了有效地指导学生上机实验和供学生自学,在每个实习中对主要算法都给出了框图和用BASIC或FORTRAN语言编写的程序与例题,以及上机实习的题目。这一部分应与前面第1~6章并行使用,学生上机时间应为10~12学时,题目可以从本章后面所给出的实习题中挑选。

本书编写的宗旨是把计算方法的学习与程序设计、上机实践更紧密地结合起来,以提高学生分析问题和解决实际问题的能力。学习本书只要求读者具备高等数学、线性代数和算法语言的基本知识。

本书由华中科技大学洪帆教授担任主审,在本书的编写过程中,得到了许多老师的关心和支持,编者在此深表感谢。

编 者

目 录

第 1 章 引论	(1)
§ 1.1 计算方法的主要内容	(1)
§ 1.2 误差的基本概念.....	(3)
1.2.1 误差的来源	(3)
1.2.2 误差、误差限、相对误差和有效数字	(5)
1.2.3 有效数字与相对误差限的关系.....	(8)
1.2.4 算术运算的误差及误差限	(9)
§ 1.3 在近似计算中应注意的一些原则.....	(11)
1.3.1 遵循的法则	(11)
1.3.2 注意的问题	(12)
小结	(14)
习题	(14)
第 2 章 插值方法与曲线拟合	(15)
§ 2.1 插值多项式的存在惟一性	(15)
§ 2.2 Lagrange 插值	(16)
2.2.1 线性插值	(16)
2.2.2 抛物插值	(17)
2.2.3 Lagrange 插值公式	(18)
2.2.4 插值余项	(19)
§ 2.3 Newton 插值	(23)
2.3.1 基函数	(23)
2.3.2 差商的概念	(24)
2.3.3 差商的性质	(24)
2.3.4 Newton 插值公式	(27)
§ 2.4 Hermite 插值	(28)
§ 2.5 分段插值	(34)
2.5.1 高次插值的 Runge 现象	(34)
2.5.2 分段插值的概念	(35)
2.5.3 分段线性插值.....	(36)
2.5.4 分段三次 Hermite 插值.....	(38)
§ 2.6 三次样条插值	(40)
§ 2.7 曲线拟合的最小二乘法	(44)
2.7.1 直线拟合	(45)
2.7.2 多项式拟合	(46)
2.7.3 其他函数曲线拟合	(48)

小结	(51)
习题	(52)
第3章 数值积分和数值微分	(55)
§ 3.1 数值积分	(55)
3.1.1 机械求积公式和代数精度	(55)
3.1.2 求积公式的构造方法	(60)
3.1.3 Newton-Cotes 求积公式	(64)
3.1.4 复化求积法	(68)
3.1.5 Romberg 求积公式及算法	(71)
§ 3.2 数值微分	(77)
3.2.1 差商型数值微分	(77)
3.2.2 插值型数值微分	(77)
3.2.3 样条插值型数值微分	(79)
3.2.4 Richardson 外推型数值微分	(80)
小结	(82)
习题	(82)
第4章 常微分方程数值解法	(84)
§ 4.1 尤拉法、隐式尤拉法和二步尤拉法	(84)
4.1.1 尤拉法	(85)
4.1.2 隐式尤拉法和二步尤拉法	(86)
4.1.3 局部截断误差与精度	(88)
§ 4.2 改进的尤拉法	(89)
4.2.1 梯形公式	(90)
4.2.2 改进的尤拉法	(91)
§ 4.3 龙格-库塔法	(96)
4.3.1 龙格-库塔法的基本思想	(96)
4.3.2 二阶龙格-库塔方法	(96)
4.3.3 高阶龙格-库塔法	(99)
4.3.4 变步长龙格-库塔法	(102)
§ 4.4 收敛性与稳定性	(103)
4.4.1 收敛法	(103)
4.4.2 稳定性	(107)
§ 4.5 一阶方程组及高阶方程	(109)
4.5.1 一阶方程组	(109)
4.5.2 高阶方程的初值问题	(110)
§ 4.6 边值问题的数值解法	(112)
小结	(115)
习题	(116)
第5章 方程求根	(118)
§ 5.1 根的隔离与二分法	(118)

5.1.1	根的隔离	(118)
5.1.2	二分法	(120)
§ 5.2	迭代法及其收敛性	(122)
5.2.1	迭代法的基本概念	(122)
5.2.2	迭代过程的收敛性	(124)
§ 5.3	收敛速度及收敛过程的加速	(130)
5.3.1	迭代的收敛速度	(130)
5.3.2	收敛过程的加速	(132)
§ 5.4	牛顿法	(136)
5.4.1	牛顿法的构造及牛顿迭代公式	(136)
5.4.2	牛顿法的收敛性和收敛速度	(137)
5.4.3	初始值的选取	(140)
5.4.4	牛顿下山法	(142)
§ 5.5	近似牛顿法	(144)
5.5.1	简化牛顿法	(144)
5.5.2	弦截法	(144)
5.5.3	快速弦截法	(146)
5.5.4	抛物线法	(148)
小结		(151)
习题		(152)
第 6 章	线性方程组的数值解法	(153)
§ 6.1	解线性方程组的直接法	(153)
6.1.1	Gauss 消去法	(153)
6.1.2	列主元消去法	(156)
6.1.3	矩阵的三角分解	(157)
6.1.4	追赶法	(163)
6.1.5	平方根法	(167)
6.1.6	向量和矩阵的范数	(170)
§ 6.2	解线性方程组的迭代法	(179)
§ 6.3	简单迭代法	(181)
小结		(189)
习题		(189)
第 7 章	计算实习	(192)
§ 7.1	插值方法	(192)
7.1.1	Lagrange 插值法	(192)
7.1.2	Newton 插值法	(194)
§ 7.2	曲线拟合(最小二乘法)	(197)
§ 7.3	数值积分	(199)
7.3.1	复化梯形法	(199)
7.3.2	复化 Simpson 法	(201)

7.3.3	自动变步长梯形法	(203)
7.3.4	Romberg 公式	(205)
§ 7.4	常微分方程数值解法	(209)
7.4.1	改进的尤拉法	(209)
7.4.2	四阶龙格-库塔法	(211)
7.4.3	亚当姆斯预测-校正系统	(214)
§ 7.5	方程求根	(219)
7.5.1	二分法	(219)
7.5.2	牛顿法	(225)
§ 7.6	线性方程组的解法	(230)
7.6.1	消去法	(230)
7.6.2	列主元消去法	(234)
7.6.3	直接三角分解法	(241)
7.6.4	改进的平方根法	(247)
7.6.5	追赶法	(249)
7.6.6	Jacobi 迭代法	(251)
7.6.7	Gaus+Seidel 迭代法	(253)
	实习题	(256)
	部分习题答案	(259)
	参考文献	(263)

第1章 引 论

§ 1.1 计算方法的主要内容

随着科学技术的发展,出现了大量复杂的数值计算问题,在实际解决这些计算问题的长期过程中,形成了计算方法这门科学。计算方法是专门研究各种数学问题的数值解法(近似解法),包括方法的构造和求解过程的理论分析。计算必须依靠计算工具进行,进行数字计算的工具有所能执行的只是对具有一定数位的数进行加、减、乘、除四则运算,即使是现代化的电子数字计算机也是如此。因此,计算方法的主要内容是怎样把数学问题的求解运算都归结为对有限数位的数进行四则运算。这就产生了许多值得研究的问题,如怎样把关于连续变量的问题转化为离散变量的问题,这两种问题的解有多大差异呢?又如在计算的每一步中对于数都不是做精确的运算,那么在大量进行这种运算之后产生的差异又有多大,等等。因此,计算方法是一门内容丰富、有自身理论体系的学科。

在生产和科学研究中遇到的大量计算问题不是人工手算(包括使用算盘以及计算器一类简单的计算工具)所能胜任的,计算机的出现,并随着计算机性能的不断提高,极大地促进了计算方法这门学科在理论和应用上的快速发展。目前计算机已成为数值计算的主要工具。随着科学技术的不断发展和计算方法的广泛应用,掌握计算方法的基本理论和方法对计算机使用者来说是非常必要的,只有掌握了各类数学问题的数值计算方法,才能更好地使用计算机,才能更有效地解决实践中需要解决各类数学问题。

计算方法是数学问题为研究对象的,它既有纯数学的高度抽象性与严密科学性的特点,又有应用的广泛性与实际试验的高度技术性的特点,具体地说有如下四大特点。

(1) 面向计算机,要根据计算机特点提供实际可行的有效算法。即算法只能包括加、减、乘、除运算和逻辑运算,是计算机能直接处理的。

(2) 有可靠的理论分析,能任意逼近并达到精度要求,对近似算法要保证收敛性和数值稳定性,还要对误差进行分析,而且都是建立在相应数学理论基础上的。

(3) 有好的计算复杂性。时间复杂性好是指节省时间,空间复杂性好是指节省存储量。这也是建立算法时要研究的问题,因为它关系到算法能否在计算机上完成。

(4) 要有数值实验。即任何一种算法除了从理论上要满足上述三点外,还要通过数值实验证明是行之有效的。

计算方法最基本的立足点是容许误差,在误差容许的范围内对某一数学问题进行近似计算,得到能满足要求的近似结果。在进行近似计算时,常采用以下几种方法。

1. 离散化方法

把求连续变量问题转化为求离散变量问题称为离散化。离散化可以认为是计算方法中基本的概念与方法之一。

因为计算机只能执行算术的和逻辑的运算,因此,任何涉及连续变量的计算问题都需要经

过离散化以后才能进行。

例 1.1 计算定积分。

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (1.1)$$

解 这是一个连续性的数学问题,其几何意义是求曲边梯形 Tabcd 的面积 S (见图 1.1),此问题在计算机上无法计算,可将此问题离散化,求出 S 的近似值。

(1) 将区间 $[a, b]$ n 等分: $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$, 其中 $x_i = x_0 + ih; i = 1, 2, \dots, n$;
 $h = \frac{b-a}{n}$ 。

(2) 对每个小区间 $[x_{i-1}, x_i], i = 1, 2, \dots, n$, 所对应的小曲边梯形的面积 S_i 用梯形面积近似替代(见图 1.2), 即

$$S_i \approx \frac{h}{2} [f(x_{i-1}) + f(x_i)]$$

$$(3) S = \sum_{i=1}^n S_i \approx \frac{h}{2} \sum_{i=1}^n [f(x_{i-1}) + f(x_i)] = \frac{h}{2} [f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)]$$

即
$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} [f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)] \quad (1.2)$$

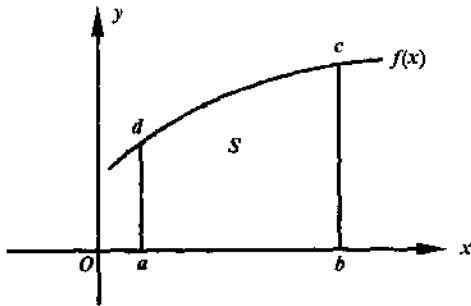


图 1.1

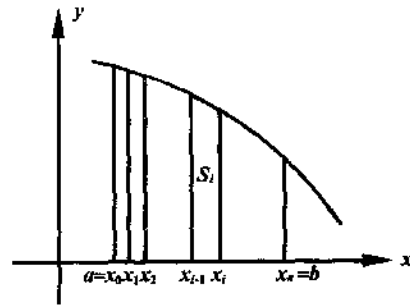


图 1.2

公式(1.2)把定积分离散成为求和运算,用式(1.2)的近似公式就可以求出式(1.1)的积分了。把一个连续性问题运用所谓的“离散化”方法,将其化为一个离散性问题,这在计算方法中对于处理连续性问题是很关键的一步。在本书的各章内容中都会涉及到。

2. “递推化”方法

递推化的基本思路就是将一个复杂的计算过程归纳为简单过程的多次重复。由于递推化算法便于编写计算机程序,所以计算方法中的许多数值方法常常采用递推化方法。

例 1.2 对给定的 x , 计算下面多项式的值。

$$p_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$$

解 令 $u_0 = a_n, u_1 = u_0 x + a_{n-1} = a_n x + a_{n-1}$,

$$u_2 = u_1 x + a_{n-2} = a_n x^2 + a_{n-1} x + a_{n-2},$$

$$u_k = u_{k-1} x + a_{n-k} = a_n x^k + a_{n-1} x^{k-1} + \dots + a_{n-k+1} x + a_{n-k}, k = 0, 1, 2, \dots, n$$

显然, $u_n = p_n$, 因此, 最终得到的 u_n 就是多项式 $p_n(x)$ 的值。

3. “近似替代”方法

有许多数学问题的解,不可能经过有限次算术运算计算出来。例如要计算任意函数的积分,求非线性方程的根,求一般微分方程的解等。而计算机运算必须在有限次停止,所以在计算方法中,必须把一无限过程的数学问题转化为满足一定误差要求的有限步来完成。对于这类问题,计算方法常采用近似替代的方法,也就是把不能用有限次运算求解的问题,转化为比较简单的可以用有限次运算求解的问题,用这种简化问题的解,作为原来问题的近似解。

例 1.3 计算无理数 e 的近似值。

解 对于函数 $f(x) = e^x$,在 $x = 0$ 处用泰勒(Taylor)公式展开,得

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \cdots + \frac{x^n}{n} + \cdots$$

取 $x = 1$ 得

$$e = 1 + 1 + \frac{1}{2} + \cdots + \frac{1}{n} + \cdots$$

这是一个无限过程,无法进行实际计算。根据近似替代方法,有

$$e \approx 1 + 1 + \frac{1}{2} + \cdots + \frac{1}{n}$$

再利用泰勒公式的余项进行误差估计。因为

$$R_h(x) = e^x - \left(1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^h}{n!}\right) = \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n+1)!} x^{n+1}, \zeta \in (0, 1)$$

所以误差

$$|R_n(1)| \leq \frac{e}{(n+1)!} < \frac{3}{(n+1)!}$$

在进行近似替代时,一定要进行误差分析,由例 1.3 可以看出,由误差分析可以确定所取的有限项数 n ,使得近似值达到所需的精度要求。

在学习计算方法这门课程时,首先应根据计算方法的特点,注意掌握方法的基本原理和思路,要注意方法处理的技巧及其与计算机的结合,要重视误差分析、收敛性及稳定性的基本理论。其次要通过例题,学习使用各种数值方法解决实际计算问题,最后,为了掌握本课程的内容,还应做一定数量的理论分析与计算练习。由于本课程内容包括了代数、微积分、常微分方程的数值方法,因此,读者必须掌握上述课程的基本内容。

§ 1.2 误差的基本概念

一个物理量的真实值,即精确值和算出来的值往往存在差异,它们的差异称为误差。许多数值方法给出的解答仅仅是所要求的真解的某种近似,因而研究数值计算方法,必须注重误差分析,分析误差的来源和误差的传播情况以及对计算结果给出合理的误差估计。

1.2.1 误差的来源

误差的来源是多方面的,但主要有以下几方面。

1. 模型误差

用数学模型描述实际问题时,往往是抓住主要因素,将实际问题理想化以后,才进行数学

概括。这种描述,虽然相当好地反映了实际情况,但也有误差,这种建立数学模型时的误差称为模型误差。

例 1.4 一个物体的重量 G 与其质量 m 和重力加速度 g 的关系为 $G = mg$, 在千克·米·秒 ($\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}$) 制中 $g \approx 9.81\text{m/s}^2$, 由此建立了重量的数学模型

$$G = 9.81m$$

由于重力加速度 g 与海拔高度、温度、磁场、地貌结构等诸多因素有关,导致在不同的时间和不同的测试地点 g 的大小不同。因此,上述模型是一个近似模型,它存在着误差,此误差也就是模型误差。

2. 观测误差

数值问题的原始数据一般由观测或实验获得。而观测的结果和这些数量的实际大小总有误差。这种误差称为观测误差。

例如在测量一个物体的长度时,由于任何量具的刻度都有宽度,世上没有绝对精确的量具,同时在观测测量结果时通常也有误差,因此所测得的物体长度是近似的,即存在观测误差。

3. 截断误差

实际计算只能用有限次运算来完成,理论上的精确值往往要求用无限的过程才能求出。例如,指数函数 e^x 可展开为幂级数形式

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots$$

但用计算机求值时,不能直接得出右端无穷多项的和,而只能截取有限项求出

$$S_n(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!}$$

计算部分和 $S_n(x)$ 作为 e^x 的值必然会有误差,据泰勒(Taylor)余项定理,其截断误差为

$$e^x - S_n(x) = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} e^{\theta x}, \quad 0 < \theta < 1$$

这种误差称为截断误差。

4. 舍入误差

在进行计算时,必须要求参与计算的数的长度有限,否则计算无法进行。在利用计算机进行计算时,由于计算机字长有限,因此也要求数的长度有限。在实际计算中,大量的数的长度是无限的,例如无理数、除不尽的分数等,因此必须用与它们比较接近的数来表示它们,由此产生的误差称为舍入误差。

例 1.5 $\pi = 3.1415926\cdots$, $\sqrt{2} = 1.41421356\cdots$, $\frac{1}{3} = 0.3333\cdots$, 等等。在计算机上运算时只能有限位小数,如取小数点后四位数字,则

$$P_1 = 3.1416 - \pi = +0.000074\cdots$$

$$P_2 = 3.4142 - \sqrt{2} = -0.000013\cdots$$

$$P_3 = 0.3333 - \frac{1}{3} = -0.00003\cdots$$

就是舍入误差。

例 1.6 设一根铝棒在温度 t 时的实际长度为 L_t , 在 $t=0$ 时的实际长度为 L_0 , 用 l_t 来表示铝棒在温度为 t 时的长度计算值, 并建立一个数学模型如下

$$l_t = L_0(1 + \alpha t)$$

其中 α 是由实验观测到的常数

$$\alpha = (0.0000238 \pm 0.0000001)1/C$$

则称 $L_t - l_t$ 为模型误差。0.0000001/C 是 α 的观测误差。

例 1.7 下面的公式描述了自由落体时, 物体下落的距离和时间的关系。

$$S(t) = \frac{1}{2}gt^2, \quad g \approx 9.81\text{ms}^{-2}$$

设自由落体在时间 t 的实际下落距离为 \tilde{S}_t , 则 $S(t) - \tilde{S}_t$ 叫做模型误差。

例 1.8 一个无穷级数, 例如

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

在实际计算时, 只能取前面有限项 (例如 n 项) 来代替, 如下表示

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

这就抛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。截断误差为

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

观察误差和原始数据的舍入误差, 其来源有所不同, 但对计算结果的影响则完全一样。同时, 数学描述和实际问题之间的误差, 往往是计算工作者不能独立解决的, 甚至是尚等研究的课题。基于这些原因, 在计算方法课程中所涉及到的误差, 一般是指舍入误差 (包括初始数据的误差) 和截断误差。本书将讨论它们在计算过程中的传播和对计算结果的影响; 研究控制其影响以保证最终计算结果有足够的精度; 既能使解决数值问题的算法简便、有效, 又能使最终结果准确可靠。

1.2.2 误差、误差限、相对误差和有效数字

为了衡量近似值的精确程度, 下面引入一些有关的基本概念。

【定义 1.1】 假设某一量的精确值是 x , 其近似值为 x^* , 则 x^* 与 x 的差

$$\varepsilon(x) = x^* - x$$

称为 x^* 的绝对误差, 简称误差。

$\varepsilon(x)$ 的大小标志着 x^* 的精确度。一般在同一量的不同近似值中, $\varepsilon(x)$ 越小, x^* 的精确度越高。

由于准确值 x 一般不能算出, 故绝对误差 $\varepsilon(x)$ 的准确值也不能求出, 但根据具体测量或计算的情况, 可事先估计出它的大小范围, 由此产生误差限的概念。

【定义 1.2】 假设精确值 x 的某一近似值为 x^* , 若存在一个正数 η , 使

$$\varepsilon(x) = |x - x^*| \leq \eta$$

称 η 为近似值 x^* 的绝对误差限,即为误差绝对值的“上界”,简称 x^* 的误差限。显然有

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

有时也可用

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

表示近似值的精度或准确值的所在范围。

误差限具有可确定和不惟一两个特性,由于计算者在估计其计算结果的误差限 η 时,都会尽量地将 η 估计得小一些,因此,对于同一量的不同近似值中, η 越小则近似值越精确。

对于不同量的近似值,误差限的大小还不能完全反映近似值的近似程度,必须还要考虑精确值的大小,即问题的规模。例如,若 $x = 10 \pm 1, y = 1000 \pm 5$,则

$$x^* = 10, y^* = 1000, \epsilon_x = 1, \epsilon_y = 5$$

显然 $\epsilon_y = 5\epsilon_x$,即 y^* 的误差限是 x^* 的误差限的 5 倍,但是 $\epsilon_y/y^* = 5/1000, \epsilon_x/x^* = 1/10, x^*$ 的误差范围为 10%,而 y^* 的误差范围则不超过 5%。显然 y^* 对于 y 的近似程度远比 x^* 对于 x 的近似程度好。所以,把近似数的误差与准确值的比值定义为“相对误差”,记作 ϵ_r 。

【定义 1.3】 记

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{x} = \frac{x^* - x}{x}$$

为近似数 x^* 的相对误差。在实际计算中,由于准确值 x 总是不知道的,所以也把

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$$

记为近似值 x^* 的相对误差,条件是 $|\epsilon_r|$ 比较小。

与前面引入的误差一样,相对误差可为正也可为负,我们把相对误差绝对值的上界叫做相对误差限,记作

$$\epsilon_r = \frac{\eta}{|x^*|}$$

其中 η 是 x^* 的误差限。

例 1.9 光速 $c = (2.997925 \pm 0.000001) \times 10^{10}$ cm/s,这时 $c^* = 2.997925 \times 10^{10}$ cm/s 的相对误差限是

$$\epsilon_r = \frac{0.000001}{2.997925} \approx 0.0000003$$

c^* 是 c 的很好的近似值。

例 1.10 用一把有毫米刻度的米尺,来测量桌子的长度,读出的长度 $x^* = 1235$ mm,这是桌子实际长度 x 的一个近似值,由米尺的精度知道,这个近似值的误差不会超过 0.5 mm,则有

$$|x^* - x| = |1235 - x| \leq 0.5 \text{ mm}$$

即

$$1234.5 \leq x \leq 1235.5$$

这表明 x 在 $(1234.5, 1235.5)$ 这个区间内,写成

$$x = (1235 \pm 0.5) \text{ mm}$$

例 1.11 光速 c 的近似值目前公认是

$$c^* = 2.997925 \times 10^{10} \text{ cm/s}$$

通常记为

$$c = (2.997925 \pm 0.000001) \times 10^{10} \text{ cm/s}$$

为了可以从近似数的有限位小数的本身,就能知道近似数的精度,现引入有效数字概念。

【定义 1.4】若近似值 x^* 的绝对误差限是某一位上的半个单位,且该位直到 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,或说 x^* 精确到该位。

判定近似值有效数字的位数通常采用四舍五入的方法。例如对于近似值 x^* ,首先确定 x^* 是由精确值的哪一位四舍五入产生的,那么称 x^* 精确到这一位的前一位,并且从近一位开始,一直到前面第一个不等于 0 的数都是 x^* 的有效数字。

例 1.12 设 $x = \pi = 3.1415926\cdots$, $x_1^* = 3$, $x_2^* = 3.1$, $x_3^* = 3.14$, $x_4^* = 3.142$, 问 x_1^* , x_2^* , x_3^* 和 x_4^* 分别有几位有效数字?

解 因为 x_1^* , x_2^* , x_3^* 和 x_4^* 分别是对 π 在小数点后第 1, 2, 3, 4 位进行四舍五入而产生的,因此它们分别精确到个位、0.1 位、0.01 位、和 0.001 位,所以它们分别有 1 位至 4 位有效数字。

例 1.13 设近似值 $x^* = 0.08072$, 它对应的精确值 $x = 0.0807164$, 问 x^* 有几位有效数字。

解 因为 x^* 是通过 x 在小数点后第 6 位四舍五入而产生的,因此 x^* 精确到 10^{-5} 位,由此推出 x^* 有 4 位有效数字。

用四舍五入的原则确定近似值的有效数字这种方法比较简单,但是,如果近似值不是由四舍五入而产生的,那么上述方法就失效了,这时可利用有效数字的定义来确定近似值的有效数字。

例 1.14 设近似值 $y^* = 0.002101$, 它对应的精确值 $y = 0.002018$ 。

解 y^* 的绝对误差 $|y^* - y| = 0.000083 \leq \frac{1}{2} \times 10^{-3}$, 所以 y^* 的绝对误差限等于 10^{-3} 位的半个单位,由此推出 y^* 有 1 位有效数字。

例 1.15 设 $x = 4.26972$, 那么

取 2 位, $x_1^* = 4.3$, 有效数字为 2 位;

取 3 位, $x_2^* = 4.27$, 有效数字为 3 位;

取 4 位, $x_3^* = 4.270$, 有效数字为 4 位;

取 5 位, $x_4^* = 4.2697$, 有效数字为 5 位。

值得注意的是,近似值后面的零不能随便省去。例如, 2.18 和 2.1800, 前者精确到 0.01, 有 3 位有效数字;而后者精确到 0.0001, 有 5 位有效数字。可见,它们的近似程度完全不同。

如果将 x 的近似值 x^* 表示为

$$x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$$

其中, a_1, a_2, \cdots, a_n 是 0~9 之间的自然数, $a_1 \neq 0$, 那么当

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

则根据有效数字的定义可推出 x^* 有 l 位有效数字。

从这里可以看出误差限和有效数字位之间的关系,并可以通过有效数字位来判断误差限。

例 1.16 若 $x^* = 3587.64$ 是 x 的具有六位有效数字的近似值,那么它的误差限是

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{4-6} = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

若 $x^* = 0.0023156$ 是 x 的具有五位有效数字的近似值, 则误差限是

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2-5} = \frac{1}{2} \times 10^{-7}$$

1.2.3 有效数字与相对误差限的关系

下面二个定理给出了怎样由近似值的有效数字位数求其相对误差限, 和怎样由相对误差限求近似值的有效数字位数。

【定理 1.1】 设近似值 $x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$, 其有 n 位有效数字, $a_1 \neq 0$, 则其相对误差限为 $\frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$ 。

证明 由于 x^* 有 n 位有效数字

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

而

$$|x^*| \geq a_1 \times 10^{m-1}$$

故有

$$\frac{|x^* - x|}{|x^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{a_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$$

【定理 1.2】 设近似值 $x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$ 的相对误差限为 $\frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1}$, $a_1 \neq 0$, 则它有几位有效数字。

证明 由于

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

故按题设有

$$\begin{aligned} |x^* - x| &= \frac{|x^* - x|}{|x^*|} \cdot |x^*| \\ &\leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} \times (a_1+1) \times 10^{m-1} \\ &= \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \end{aligned}$$

因此 x^* 有 n 位有效数字。

例 1.17 用 $x^* = 2.72$ 来表示 e 的具有三位有效数字的近似值, 则相对误差限是

$$\epsilon_r \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-3} = \frac{1}{2 \times 2} \times 10^{-2} = \frac{1}{4} \times 10^{-2}$$

例 1.18 要使 $\sqrt{20}$ 的近似值的相对误差限小于 0.1%, 要取几位有效数字?

由定理 1.1, $\epsilon_r \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$ 。由于 $\sqrt{20} = 4.4\cdots$, 已知 $a_1 = 4$, 故只要取 $n = 4$, 就有

$$\epsilon_r \leq 0.125 \times 10^{-3} < 10^{-3} = 0.1\%$$

即只要对 $\sqrt{20}$ 的近似值取 4 位有效数字, 其相对误差限就小于 0.1%。此时由开方表得 $\sqrt{20} \approx 4.472$ 。

1.2.4 算术运算的误差及误差限

1. 加法和减法的误差

设 x^* 是 x 的近似值, y^* 是 y 的近似值, $x^* \pm y^*$ 表示 $x \pm y$ 的近似值, 则它的误差为

$$(x^* \pm y^*) - (x \pm y) = (x^* - x) \pm (y^* - y) \quad (1.3)$$

式(1.3)说明和的误差是误差之和, 差的误差是误差之差。但是因为

$$|(x^* \pm y^*) - (x \pm y)| \leq |x^* - x| + |y^* - y| \quad (1.4)$$

所以误差限之和是和或差的误差限。以上的结论适用于任意多个近似数的和或差。任意多个数的和或差的误差限等于各数的误差限之和。

若 x 与 y 相乘的精确值和近似值分别记为 xy 和 x^*y^* , 设 $\eta(x^*), \eta(y^*)$ 分别表示 x^* 和 y^* 的误差限; $\varepsilon(x^*), \varepsilon(y^*)$ 分别表示 x^* 和 y^* 的误差, 如此便有

$$\begin{aligned} & |x^*y^* - xy| \\ &= |x^*y^* - (x^* + x - x^*)(y^* + y - y^*)| \\ &= |x^*y^* - (x^* - \varepsilon(x^*))(y^* - \varepsilon(y^*))| \\ &= |x^*y^* - x^*y^* + x^*\varepsilon(y^*) + y^*\varepsilon(x^*) - \varepsilon(x^*)\varepsilon(y^*)| \\ &\leq |x^*|\eta(y^*) + |y^*|\eta(x^*) + \eta(x^*)\eta(y^*) \end{aligned}$$

若 $\eta(y^*) \ll |y^*|, \eta(x^*) \ll |x^*|$, 则可略去 $\eta(x^*)\eta(y^*)$, 而得

$$|x^*y^* - xy| \leq |x^*|\eta(y^*) + |y^*|\eta(x^*)$$

设 y 和 y^* 均不等于 0, 则对除法的绝对误差限可推导如下

$$\begin{aligned} \left| \frac{x^*}{y^*} - \frac{x}{y} \right| &= \left| \frac{x^*}{y^*} - \frac{x^* - \varepsilon(x^*)}{y^* - \varepsilon(y^*)} \right| \\ &= \left| \frac{x^*y^* - x^*\varepsilon(y^*) - x^*y^* + y^*\varepsilon(x^*)}{y^*(y^* - \varepsilon(y^*))} \right| \\ &\leq \frac{|x^*|\eta(y^*) + |y^*|\eta(x^*)}{|y^*|^2(1 - |\varepsilon(y^*)|/|y^*|)} \\ &\leq \frac{|x^*|\eta(y^*) + |y^*|\eta(x^*)}{|y^*|^2(1 - \eta(y^*)/|y^*|)} \end{aligned}$$

若 $\eta(y^*) \ll |y^*|$, 则可略去分母中的 $\eta(y^*)/|y^*|$, 于是得近似不等式

$$\left| \frac{x^*}{y^*} - \frac{x}{y} \right| \leq \frac{|x^*|\eta(y^*) + |y^*|\eta(x^*)}{|y^*|^2}$$

归纳上述结果, 可得算术运算中绝对误差限估计公式如下。

$$\begin{aligned} \eta(x^* + y^*) &= \eta(x^*) + \eta(y^*) \\ \eta(x^* - y^*) &= \eta(x^*) + \eta(y^*) \\ \eta(x^*y^*) &\approx |x^*|\eta(y^*) + |y^*|\eta(x^*) \\ \eta\left(\frac{x^*}{y^*}\right) &\approx \frac{|x^*|\eta(y^*) + |y^*|\eta(x^*)}{|y^*|^2} \quad y \neq 0, y^* \neq 0 \end{aligned}$$

其中 $\eta(x^* + y^*), \eta(x^* - y^*), \eta(x^*y^*), \eta(x^*/y^*)$ 分别表示近似数 x^* 和 y^* 的和、差、积、商的绝对误差限。

例 1.19 设近似值 x_1^* 的误差为 0.81, x_2^* 的误差为 -0.04, 求 $x_1^* + x_2^*, x_1^* - x_2^*$ 的误差