

面向21世纪高等院校计算机教材系列

数值计算方法

● 马东升 编



机械工业出版社
China Machine Press

面向 21 世纪高等院校计算机教材系列

数值计算方法

马东升 编



机械工业出版社

本书介绍了计算机上常用的数值计算方法，阐明了数值计算方法的基本理论和实现，讨论了有关数值算法的收敛性和稳定性问题。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。选材既考虑基础性又注重实用性，叙述力求深入浅出，通俗易懂，并有典型的例题，每章后有较丰富的习题，书末附有习题答案。

本书可作为高等学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。

图书在版编目 (CIP) 数据

数值计算方法/马东升编. —北京：机械工业出版社，
2001. 6

面向 21 世纪高等院校计算机教材系列

ISBN 7-111-08968-5

I . 数 … II . 马 … 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 (2000) 第 030611 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：王琼先

责任印制：路 琳

北京市密云县印刷厂印刷·新华书店北京发行所发行

2001 年 6 月第 1 版·第 1 次印刷

787mm×1092mm 1/16 · 14.25 印张·351 千字

0001—5000 册

定价：21.00 元

凡购本图书，如有缺页、倒页、脱页，由本社发行部调换

本社购书热线电话：(010) 68993821、68326677 - 2527

出版说明

随着计算机技术的飞速发展,计算机在经济与社会发展中的地位日益重要。在高等院校的培养目标中,都将计算机知识与应用能力作为其重要的组成部分。为此,国家教育部根据高等院校非计算机专业的计算机培养目标,提出了“计算机文化基础”、“计算机技术基础”和“计算机应用基础”三个层次教育的课程体系。根据计算机科学发展迅速的学科特点,计算机教育应面向社会,面向潮流,与社会接轨,与时代同行。随着计算机软硬件的不断更新换代,计算机教学内容也必须随之不断更新。

为满足高等院校计算机教材的需求,机械工业出版社聘请了清华大学、北方交通大学、北京邮电大学等高等院校的老师,经过反复研讨,结合当前计算机发展需要和编者长期从事计算机教学的经验精心编写的“面向 21 世纪高等院校计算机教材”系列丛书。

本套教材以理论教学和实践教学相结合,图文并茂、内容实用、层次分明、讲解清晰、系统全面,其中溶入了教师大量的教学经验,是各类高等院校、高等职业学校及相关院校的最佳教材,也可作为培训班和自学用书。

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的科学计算,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问题,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。阅读本书只需具备高等数学和线性代数的基本知识即可。

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谢意。

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

前言

第1章 数值计算方法与误差分析	1
1.1 数值计算方法	1
1.2 误差的来源	1
1.3 近似数的误差表示法	3
1.3.1 绝对误差	3
1.3.2 有效数字	4
1.3.3 相对误差	6
1.3.4 有效数字与相对误差	7
1.4 数值运算误差分析	9
1.4.1 函数运算误差	9
1.4.2 算术运算误差	10
1.5 减小运算误差若干原则	11
1.6 小结	16
习题	16
第2章 非线性方程的数值解法	18
2.1 初始近似值的搜索	18
2.1.1 逐步搜索法	18
2.1.2 区间二分法	19
2.2 简单迭代法	21
2.2.1 迭代原理	21
2.2.2 迭代的收敛性	22
2.2.3 局部收敛性	26
2.2.4 迭代过程的收敛速度	28
2.2.5 迭代过程的加速	29
2.3 牛顿切线法	32
2.3.1 公式的建立	32
2.3.2 牛顿切线法的收敛情况	34
2.3.3 牛顿切线法的修正算法	35
2.4 弦截法	39
2.4.1 单点弦法	39
2.4.2 双点弦法(快速弦法)	41
2.5 多项式方程求根	42

2.5.1 牛顿法求多项式方程的根	42
2.5.2 算因子法	44
2.6 非线性方程组的数值解法	48
2.6.1 牛顿-拉夫森法	49
2.6.2 拟牛顿法(布罗登法)	52
2.6.3 最速下降法	53
2.7 小结	55
习题二	55
第3章 线性代数方程组的数值解法	57
3.1 消去法	57
3.1.1 高斯消去法	58
3.1.2 选主元消去法	64
3.1.3 高斯-约当消去法	69
3.2 矩阵三角分解法	72
3.2.1 矩阵三角分解原理	72
3.2.2 解线性方程组的三角分解法	74
3.2.3 平方根法	76
3.2.4 追赶法	80
3.3 向量和矩阵的范数	83
3.3.1 向量的范数	83
3.3.2 矩阵的范数	86
3.4 方程组的性态	89
3.4.1 方程组的性态和矩阵的条件数	89
3.4.2 精度分析	91
3.5 迭代法	92
3.5.1 一般迭代法	92
3.5.2 雅可比迭代	93
3.5.3 高斯-塞德尔迭代	94
3.5.4 松弛法	95
3.5.5 迭代公式的矩阵表示	96
3.6 迭代的收敛性	98
3.6.1 迭代矩阵法	98
3.6.2 系数矩阵法	102
3.6.3 迭代收敛的充分必要条件	104
3.7 小结	106
习题三	106
第4章 插值与曲线拟合	109
4.1 插值问题	109
4.2 拉格朗日插值	110

4.2.1 线性插值(两点一次插值)	110
4.2.2 抛物线插值(三点二次插值)	111
4.2.3 n 次代数插值	112
4.2.4 拉格朗日插值多项式	113
4.2.5 插值余项	117
4.3 逐次线性插值	120
4.3.1 三个节点时的情形	121
4.3.2 埃特金算法	121
4.4 牛顿插值	123
4.4.1 差商及其性质	123
4.4.2 牛顿插值公式	126
4.4.3 余项	127
4.5 等距节点插值	128
4.5.1 差分	128
4.5.2 等距节点牛顿插值公式	130
4.6 埃尔米特插值	132
4.7 分段插值法	134
4.7.1 高次插值的龙格现象	134
4.7.2 分段插值和分段线性插值	135
4.8 曲线拟合的最小二乘法	137
4.8.1 线性最小二乘拟合原理	137
4.8.2 直线拟合	138
4.8.3 多项式拟合	139
4.9 小结	140
习题四	140
第5章 数值积分和数值微分	144
5.1 数值积分概述	144
5.1.1 数值积分的基本思想	144
5.1.2 代数精度	145
5.1.3 插值求积公式	147
5.1.4 构造插值求积公式的步骤	150
5.2 牛顿-柯特斯公式	151
5.2.1 公式的导出	152
5.2.2 代数精度	155
5.2.3 低阶求积公式的余项	156
5.2.4 牛顿-柯特斯公式的稳定性	158
5.2.5 复化求积法	159
5.3 变步长求积和龙贝格算法	162
5.3.1 变步长梯形求积法	163

5.3.2 龙贝格算法	165
5.4 高斯型求积公式	167
5.4.1 一般概述	167
5.4.2 高斯-勒让德求积公式	170
5.4.3 高斯型求积公式的数值稳定性	176
5.5 数值微分	176
5.5.1 机械求导法	176
5.5.2 插值求导公式	178
5.6 小结	181
习题五	181
第6章 常微分方程初值问题的数值解法	184
6.1 尤拉法	185
6.1.1 尤拉格式	185
6.1.2 两步尤拉格式	188
6.1.3 梯形格式	189
6.1.4 改进尤拉格式	189
6.2 龙格-库塔法	191
6.2.1 泰勒级数展开法	191
6.2.2 龙格-库塔法的基本思路	192
6.2.3 二阶龙格-库塔法	193
6.2.4 三阶龙格-库塔法	195
6.2.5 四阶龙格-库塔法	196
6.2.6 步长的选择	199
6.3 线性多步法	200
6.3.1 一般形式	200
6.3.2 亚当斯格式	200
6.3.3 亚当斯预报-校正格式	202
6.3.4 误差修正法	203
6.4 收敛性与稳定性	204
6.4.1 误差分析	204
6.4.2 收敛性	205
6.4.3 稳定性	206
6.5 方程组与高阶微分方程	207
6.6 小结	210
习题六	211
附录A 部分练习题答案	214
附录B 相关定理	217
参考文献	219

第1章 数值计算方法与误差分析

本章介绍数值计算方法的含义及其特点、数值运算中的误差分析。误差分析包括误差的来源、近似数的误差、运算误差分析和减小误差的若干原则。

1.1 数值计算方法

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。

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。

计算机具有很高的运算速度,但它只能依据给定的指令完成加、减、乘、除等算术运算和一些逻辑运算。因此,使用计算机求解各种数学问题,必须要把求解过程归结为按一定的规则进行一系列四则算术运算的过程。计算机只能机械地执行人为所给定的指令,交给计算机执行的解题方法的每一步都必须加以准确的规定。把对数学问题的解法归结为有加、减、乘、除等基本运算,并对运算顺序有完整而准确的描述的算法称为数值计算方法或简称数值算法。计算方法课是研究各种数值算法及其有关理论的一门课程。从工程实际出发,本课程所要解决的数学问题主要是:非线性方程、线性方程组、插值和曲线拟合、数值积分和微分、常微分方程。这些数学问题的数值解法和计算机有密切关系,因此实现这些算法时还要依据计算机的容量、字长、速度等指标,研究具体求解步骤和程序设计技巧。将数值算法概括起来有如下的一些特点:

1) 面向计算机 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,是计算机所能直接处理的。

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。这些都是建立在相应数学理论基础上的。

3) 要有好的计算复杂性 一个算法的计算复杂性是指该算法的空间复杂度和时间复杂度,空间复杂度指算法需占用的存储空间,时间复杂度指算法包含的运算次数。空间复杂度和时间复杂度小的算法是计算复杂性优秀的算法。这也是建立算法要研究的问题,它关系到算法能否在计算机上实现。

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。如某教室里有 42 名学生,数 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称某准确数的近似值。如从测量得到桌子的长度为 950mm,一般说来,这个测量值 950 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,绝大多数情况下不存在绝对的严格和精确,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。定量分析客观事物时,总是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的距离称为模型误差或称描述误差。

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 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等。其他还有比重、阻尼系数等,都是观测来的,也都含有误差。

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,这样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(例如 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。对这个问题其截断误差是

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

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 $\pi = 3.1415926\cdots$, $\sqrt{2} = 3.141421356\cdots$, $\frac{1}{3} = 0.3333\cdots$ 等,在计算机上表示这些数时只能用有限位小数,如取小数点后四位有效数字,则 $3.1416 - \pi = 0.0000073\cdots$, $1.4142 - \sqrt{2} = -0.000013\cdots$, $0.3333 - \frac{1}{3} = -0.000033\cdots$ 就是舍入误差。又比如计算机作 4 位数乘 4 位数乘法运算,若乘积也只许保留 4 位,通过把第 5 位数字进入“四舍五入”,这时产生的误差就是

舍入误差。

总括起来,误差类型一般有模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差。但在数值计算方法中主要讨论的是截断误差和舍入误差。

1.3 近似数的误差表示法

1.3.1 绝对误差

设 x^* 是准确值 x 的一个近似值, 定义

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

为近似值 x^* 的绝对误差, 简称误差。 $e(x^*)$ 又简记为 e^* 。

从这个定义可以看出, 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, 无法准确地知道绝对误差 e^* 的大小, 但根据具体测量或计算的情况, 可以事先估计出误差的绝对值不超过某个正数 ϵ^* , 把这个正数 ϵ^* 叫做误差绝对值的上界或称误差限。

如果 $|e^*| = |x - x^*| \leq \epsilon(x^*)$, 那么 $\epsilon(x^*)$ 叫做近似数 x^* 的绝对误差限, 实用当中简称误差、误差限、绝对误差或精度。 $\epsilon(x^*)$ 又简记为 ϵ^* 。

从上述定义可以看出, ϵ^* 是一个正数。又因为在任何情况下都有

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

即

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

这就表明准确值 x 在 $[x^* - \epsilon^*, x^* + \epsilon^*]$ 这个区间内, 用 $x = x^* \pm \epsilon^*$ 来表示近似数 x^* 的精确度, 或准确值所在的范围。同样有 $-\epsilon^* \leq e^* \leq \epsilon^*$, 即 $|e^*|$ 是在 ϵ^* 的范围内, 所以 ϵ^* 应取得尽可能小, 例 $x = 4.3762816\cdots$, 取近似数 $x^* = 4.376$, 则 $x - x^* = 0.0002816\cdots$, 有

$$|e^*| = 0.0002816 < 0.0003 = 0.3 \times 10^{-3}$$

同样

$$|e^*| = 0.0002816 < 0.00029 = 0.29 \times 10^{-3}$$

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

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

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所致。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方法。

例 用一把有毫米刻度的尺子, 测量桌子的长度, 读出来的值 $x^* = 1235\text{mm}$, 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 $1/2\text{mm}$ 。

$$|x - x^*| = |x - 1235\text{mm}| \leq \frac{1}{2}\text{mm}$$

$$1234.5\text{mm} \leq x \leq 1235.5\text{mm}$$

这表明真值 x 在 $[1234.5, 1235.5]$ 这个区间内, 写成

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

这里绝对误差 ϵ^* 是末位的半个单位。

下面讨论“四舍五入”的误差限。

设 x 为一实数, 其十进制表示的标准形式为

$$x = \pm 0.x_1x_2\cdots \times 10^m$$

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

$$x^* = \begin{cases} \pm 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m, & \text{当 } x_{n+1} \leq 4 \text{ (四舍)} \\ \pm 0.x_1x_2\cdots x_{n-1}(x_n + 1) \times 10^m, & \text{当 } x_{n+1} \geq 5 \text{ (五入)} \end{cases}$$

四舍时的误差限

$$\begin{aligned} |x - x^*| &= (0.x_1x_2\cdots x_n x_{n+1}\cdots - 0.x_1x_2\cdots x_n) \times 10^m \\ &\leq 0.x_1x_2\cdots x_n 499\cdots - 0.x_1x_2\cdots x_n) \times 10^m \\ &= 10^m \times 0.\underbrace{0\cdots 0}_{n \uparrow 0} 499\cdots \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \end{aligned}$$

五入时的误差限

$$\begin{aligned} |x - x^*| &= (0.x_1x_2\cdots x_{n-1}(x_n + 1) - 0.x_1x_2\cdots x_n\cdots) \times 10^m \\ &= (0.\underbrace{0\cdots 0}_{n-1 \uparrow 0} 1 - 0.\underbrace{0\cdots 0}_{n \uparrow 0} x_{n+1}\cdots) \times 10^m \\ &\leq 10^{m-n} (1 - 0.x_{n+1}) \end{aligned}$$

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

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

例 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) $\epsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$ 。同样取小数点后 2 位时, 近似值为 3.14, 其绝对误差 $\epsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$ 。

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 有效数字

在表示一个近似数时, 常常用到“有效数字”, 有效数字是由绝对误差决定的。

定义 设数 x 的近似值 $x^* = 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m$, 其中 x_i 是 0 到 9 之间的任一个数, 但 $x_1 \neq 0, i = 1, 2, 3, \dots, n$ 正整数, m 整数, 若

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

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。

例 $\pi = 3.141592\cdots$, 当取 3.142 作为其近似值时

$$|\pi - 3.142| = 0.000407 < 0.00005 = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

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

$$|\pi - 3.142| = 0.00059 < 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

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。

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。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, 其中每一位数字也都叫 x^* 的有效数字。但是, 如果 x^* 准确到某位数字, 将这位数字以后的数字进行四舍五入(可简称舍入)则不一定得到有效数字。例如 4.145 作为 4.138 的近似值是准确到百分位, 若再四舍五入得到 4.15, 其最后一位便不是有效数字了, 4.15 只有两位有效数字。

例 四舍五入得到的近似值 0.0203 有三位有效数字, 其绝对误差 $\epsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$ 。

又如 3.142 是 π 的四舍五入的近似值, 所以有 4 位有效数字。3.141 不是 π 的四舍五入的近似值, 所以不具有 4 位有效数字。

关于有效数字还可指出以下几点:

(1) 用四舍五入取准确值的前 n 位 x^* 作为近似值, 则 x^* 必有 n 个有效数字。

例如, $\pi = 3.1415926\cdots$, 取 3.14 作为近似值, 则有 3 位有效数字, 取 3.142 作为近似值, 则有 4 位有效数字。

(2) 有效数字位数相同的两个近似数, 绝对误差不一定相同。

例如, 设 $x_1^* = 12345$, $x_2^* = 12.345$ 二者均有 5 位有效数字, 前者的绝对误差为 $\frac{1}{2} \times 1$, 后者的绝对误差为 $\frac{1}{2} \times 10^{-3}$ 。

(3) 把任何数乘以 10^p ($p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) 等于移动该数的小数点, 这样并不影响其有效数字的位数。

例如 $g = 9.80 \text{ m/s}^2$ 具有 3 位有效数字, 而 $g = 0.00980 \times 10^3 \text{ m/s}^2$ 也具有 3 位有效数字。但 9.8 m/s^2 与 9.80 m/s^2 的有效数字位数是不同的, 前者有两位, 后者有 3 位。因此, 要注意诸如 0.1, 0.10, 0.100, … 它们的不同含义。

如果整数并非全是有效数字, 则可用浮点数表示。如已知近似数 $x^* = 300000$ 的绝对误差限不超过 500 即 $\frac{1}{2} \times 10^3$, 则应把它表示成 $x^* = 300 \times 10^3$ 或 0.300×10^6 。若记为 300000, 则表示其误差限不超过 $\frac{1}{2}$ 。这是因为

$$|x - 300 \times 10^3| = |x - 0.300 \times 10^6| \leqslant 500 = \frac{1}{2} \times 10^{6-3}$$

即 $m = 6$, $n = 3$, 而

$$300000 = 10^6 \times (3 \times 10^{-1} + 0 \times 10^{-2} + \dots + 0 \times 10^{-6})$$

且

$$|x - 300000| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{6-6}$$

即 $m=6, n=6$ 。

前者有 3 位有效数字, 后者有 6 位有效数字。

例 某地粮食产量为 875 万吨, 表示成

$$875 \text{ 万吨} = 875 \times 10^4 \text{ 吨} = 0.875 \times 10^7 \text{ 吨}$$

绝对误差为 $\frac{1}{2} \times 10^4$ 或 $\frac{1}{2} \times 10^{-3} \times 10^7$, 即 $\frac{1}{2}$ 万吨。而 875 万吨不能表示成 8750000 吨, 因为这时绝对误差为 $\frac{1}{2}$ 吨。

有效数位数与小数点后有多少位无关。但是具有 n 位有效数字的近似数 x^* , 其绝对误差 $\epsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$, 在 m 相同的情况下, n 越大则 ϵ^* 越小。所以有效数位数越多, 绝对误差越小。

(4) 准确值被认为具有无穷多位有效数字。

例如, 直角三角形面积 $S = \frac{1}{2}ah = 0.5ah$, 其中 a 是底边, h 是高, 不能认为公式中用 0.5 表示 $\frac{1}{2}$ 时, 只有一位有效数字。因为 0.5 是真值, 没有误差, $\epsilon^* = 0$, 因此 $n \rightarrow \infty$, 所以准确值具有无穷多位有效数字。至于底边 a 和高 h 是测量得到的, 因此是近似数, 应根据测量仪器精度来确定其有效数字的位数。

1.3.3 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 10mm 误差是 1mm, 测量 1m 误差是 2mm, 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 x 的近似值 x^* 的相对误差

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

相对误差说明了近似数 x^* 的绝对误差 ϵ^* 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

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

并将 $e_r(x^*)$ 简记为 e_r^* 。

上例中 10mm 时误差为 1mm, 1m 时误差为 2mm, 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, 后者精度比前者高。

在实际计算中, 由于 ϵ^* 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, 于是也像绝对误差一样, 只能估计相对误差的范围。

记

$$|e_r^*| = \left| \frac{\epsilon^*}{x^*} \right| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leqslant \frac{\epsilon^*}{|x^*|} = \epsilon_r(x^*)$$

$\epsilon_r(x^*)$ 称为相对误差限，在实际计算中作为相对误差，所以相对误差一般是指 $\epsilon_r(x^*)$ ， $\epsilon_r(x^*)$ 可简记为 ϵ_r^* 。

由相对误差限的定义可知，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

$$\epsilon^* = |x^*| \epsilon_r^*$$

例 光速 $c^* = (2.997925 \pm 0.000001) \times 10^{10} \text{ cm/s}$ ，其相对误差 $\epsilon_r^* = \frac{\epsilon^*}{|c^*|} = \frac{0.000001}{2.997925} = 3.34 \times 10^{-7}$ ，其中 $c^* = 2.997925 \times 10^{10} \text{ cm/s}$ 是目前光速公认值（测量值）。

例 取 3.14 作为 π 的四舍五入的近似值时，试求其相对误差。

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

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

1.3.4 有效数字与相对误差

根据有效数字与相对误差的概念可以得出二者之间的关系。

定理 若近似数 $x^* = \pm 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m$ 具有 n 位有效数字，则其相对误差

$$|\epsilon_r^*| \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)} \quad (1-1)$$

证

$$\text{因为 } x^* = \pm 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m$$

$$\text{所以 } |x^*| \geq x_1 \times 10^{m-1}$$

又由于 x^* 具有 n 位有效数字，则

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

$$\text{所以 } |\epsilon_r^*| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n}}{x_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)}$$

$$|\epsilon_r^*| \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)}$$

一般应用中，可以取

$$\epsilon_r^* = \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)}$$

由于 n 越大， ϵ_r^* 越小，所以，有效数位数越多，相对误差就越小。

例 取 3.14 作为 π 的四舍五入的近似值时，试求其相对误差。

解 四舍五入的近似值 3.14 ，其各位都是有效数字，即 $n=3$ ，所以

$$\epsilon_r^* = \frac{1}{2 \times 3} 10^{-(3-1)} = 0.17\%$$

3.14 作为 π 的四舍五入的近似值，由绝对误差计算出的相对误差是 0.159% （见上例），而由有效数字计算出的相对误差是 0.17% ，前者比后者准确程度好，这是因为后者代表了从

3.00 到 3.99 具有 3 位有效数字时的相对误差, 而前者只代表 3.14 时的相对误差。

例 已知近似数 x^* 有两位有效数字, 试求其相对误差 ϵ_r^* 。

解

$$n=2, \epsilon_r^* = \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(2-1)}$$

但第一位有效数字 x_1 未给出, 可按最不利的情况估计

$$\begin{cases} x_1 = 1 & \epsilon_r^* = \frac{1}{2 \times 1} \times 10^{-(2-1)} = 5\% \\ x_1 = 9 & \epsilon_r^* = \frac{1}{2 \times 9} \times 10^{-(2-1)} = 0.56\% \end{cases}$$

取 $x_1 = 1$, 此时相对误差 $\epsilon_r^* = 5\%$ 为最大。

定理中的条件只是一个充分条件, 而不是必要条件。近似数的有效数字位数越多, 其相对误差就越小。但是, 相对误差越小, 有效数字位数只是可能多, 例如, 如果一个近似数 x^* 的相对误差满足定理的表达式, 并不能保证 x^* 一定具有 n 位有效数字。这由定理的证明过程可以看出。举例来说, $x = \sin 29^\circ 20' = 0.4900$, 取一个近似值 $x^* = 0.484$, 其相对误差

$$\epsilon_r^* = \left| \frac{0.4900 - 0.484}{0.484} \right| = 0.012397 < 0.0125 = \frac{1}{2 \times 4} \times 10^{-(2-1)}$$

不能由此推出 x^* 有两位有效数字, 这是因为

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

可知近似值 x^* 并不具有两位有效数字。

在实际应用时, 为了要使取的近似数的相对误差满足一定的要求, 可以用式(1-1)来确定所取的近似数应具有多少位有效数字。

例 求 $\sqrt{6}$ 的近似值, 使其相对误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-3}$ 。

解 因为 $\sqrt{6} = 2.4494 \dots$, 取 $x_1 = 2$, 设 x^* 有 n 位有效数字, 由定理 $\epsilon_r^* = \frac{1}{2 \times x_1} \times 10^{-(n-1)}$

$$\frac{1}{2 \times 2} \times 10^{-(n-1)} \leq \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

求出满足此不等式的最小正数 $n=4$, 故取 $x^* = 2.449$ 。

定理 若近似数 $x^* = \pm 0.x_1x_2\dots x_n \times 10^m$ 的相对误差

$$|\epsilon_r^*| \leq \frac{1}{2(x_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)} \quad (1-2)$$

则该近似数具有 n 位有效数字。

证

因为

$$x^* = \pm 0.x_1x_2\dots x_n \times 10^m$$

所以

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

$$\begin{aligned} |x - x^*| &= \frac{|x - x^*|}{|x^*|} |x^*| \leq \frac{1}{2(x_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)} \times (x_1 + 1) \times 10^{m-1} \\ &= \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \end{aligned}$$

由有效数字定义可知, x^* 具有 n 位有效数字。