



面向21世纪高职高专系列规划教材

计算方法及其 MATLAB实现

杨志明 编著



西安电子科技大学出版社
XIDIAN UNIVERSITY PRESS

面向 21 世纪高职高专系列规划教材

计算方法及其 MATLAB 实现

杨志明 编著

西安电子科技大学出版社

2009

内 容 简 介

本书是为普通高等院校理工科应用数学和计算机专业的学生学习“计算方法”课程所编写的教材。全书共9章,内容包括:误差分析、非线性方程的数值解法、解线性方程组的直接法和迭代法、矩阵特征值与特征向量的计算、插值法、最小二乘法与曲线拟合、数值积分与数值微分、常微分方程初值问题的数值解法。本书不仅介绍各种数值算法的数学原理,而且强调了这些算法在计算机上的实现及其在现实中的应用。由此结合 MATLAB 数值计算软件在相应各章都给出了 MATLAB 算法及主要程序,并附有习题及数值实验题,书末附有 MATLAB 简介及部分习题参考答案。全书阐述严谨,条理清晰,通俗易懂,便于教学。

本书也可作为其他理工专业学生学习“计算方法”课程的教材或参考书,亦可为科研和工程技术工作者解决数值计算问题提供参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算方法及其 MATLAB 实现/杨志明编著.

—西安:西安电子科技大学出版社,2009.8

ISBN 978 - 7 - 5606 - 2259 - 0

I. 计… II. 杨… III. 计算机辅助计算—软件包, MATLAB IV. TP391.75

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 072891 号

策 划 杨丕勇

责任编辑 张晓燕

出版发行 西安电子科技大学出版社(西安市太白南路2号)

电 话 (029)88242885 88201467 邮 编 710071

网 址 www.xduph.com 电子邮箱 xdupfxb001@163.com

经 销 新华书店

印刷单位 西安文化彩印厂

版 次 2009年8月第1版 2009年8月第1次印刷

开 本 787毫米×1092毫米 1/16 印 张 19.75

字 数 465千字

印 数 1~4000册

定 价 28.00元

ISBN 978 - 7 - 5606 - 2259 - 0/O · 0098

XDUP 2551001—1

*** 如有印装问题可调换 ***

本社图书封面为激光防伪覆膜,谨防盗版。

前 言

随着计算机技术的广泛应用,科学计算已成为现代高素质人才必备的能力.继实验方法和理论方法之后,数值计算已成为科学研究的第三种重要方法.近年来,在高等教育中如何培养学生的科学计算能力日益受到人们的重视,计算方法已成为现代高等教育的重要内容,成为许多理工科院校本专科学生的必修课程.为了更好地帮助读者在学习计算方法时能深入理解与掌握这门课程的基本理论,开拓数学思维,灵活运用它的思想方法,不断提高综合分析与解决问题的能力,作者根据教育部最新公布的全国理工科院校“计算方法”课程教学大纲的要求及多年的教学经验编写了本书.

在多年的教学工作中,作者深切地感受到理论与实践的脱离一方面致使学生对本课程许多繁杂的计算望而生畏,另一方面也使得本课程的一些重要特征(如计算速度和稳定性等)很难被深入理解.因此,如何在书中将算法原理、误差分析等理论知识与针对算法实现的编程技术有机地接合起来,从而进一步提高学生的学习兴趣,是作者编写本书的主要目的.

近年来出现了一些优秀的数学软件,如 MAPLE、MATLAB、MATHEMATICA 等,这些软件的内核包含了一些关键而又复杂的数值算法,大大提高了编程效率. MATLAB 更以其强大的数值计算性能而备受关注.例如,矩阵特征值问题的 QR 方法若用 C 语言编程,全部程序大约需要 300 条语句,而用 MATLAB 编程,则不必懂得 QR 方法的具体细节,只需一两条语句即可解决问题.因此一般来讲, MATLAB 的程序极为简短.更重要的是, MATLAB 具有很严格的解题规范.如解线性方程组 $Ax=b$ 时,它会根据矩阵 A 的不同特征选择适合于 A 的算法进行求解,因而大可不必担心 MATLAB 解题的准确性.为此,本书以附录的形式介绍了 MATLAB 软件的基本知识,并在每章的“MATLAB 解法及主要程序”一节中融合了与该章内容相关的 MATLAB 函数及命令,而且就该章的主要方法提供了 MATLAB 程序(所有程序均已在 MATLAB 6.5 下运行通过),从而力争使计算方法的理论学习与编程实验紧密结合起来.

本书共 9 章,基本按传统的计算方法教材内容来安排,包括了本课程最基本的一些问题:误差理论、非线性方程、线性方程组、特征值、插值、拟合、数值微积分和常微分方程.全书精选了近 100 道例题,其中部分题目给出了一题多解,以帮助读者掌握解题的思路和技巧.此外,为使读者对本课程的理论有更深入的理解,每章都配有一定数量的习题和数值实验题.相信读者通过参考本书的主要程序进行编程练习,也会进一步掌握 MATLAB 软件的使用.完成本书全部内容的学习需要 72 学时(其中附录 A 约需 8 学时),可对带有星号(*)的章节进行适当取舍.每章的“MATLAB 解法及主要程序”一节可作为自学内容.

本书的编写力求做到概念准确、结构严谨、重点突出、条理清晰、通俗易懂.值得一提的是,本书除附录 A 及各章“MATLAB 解法及主要程序”一节中的插图是用 MATLAB 绘

制的之外，其他所有图形都是用 METAPOST 及 PGF 绘图软件编程实现的，这些图形的精确与优美也使本书增色不少。

在编写本书的过程中，笔者得到了家人很大的支持和鼓励，导师尤传华教授和学友彭淑慧、王珂仔细审阅了书稿并提出了许多宝贵的修改意见，在此对他们表示衷心的感谢！对我的同事程为麟、裴东林、阮文惠的鼓励和支持深表谢意，同时对为本书的出版做出很大贡献的兰州工业高等专科学校张明新教授以及西安电子科技大学出版社杨丕勇、张晓燕等编辑表示诚挚的感谢。

倘若读者能从本书中有所受益，实乃笔者之幸。但因水平有限，书中错误与疏漏之处在所难免，敬请广大读者批评指正！

作 者
2009 年 4 月

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 课程的内容、意义和特点	1
1.2 误差的基本概念	2
1.2.1 误差的来源	2
1.2.2 误差与有效数字	3
1.3 数值计算中的误差估计	6
1.3.1 一元函数的误差估计	6
1.3.2 二元函数的误差估计	7
1.3.3 四则运算的误差	7
1.4 设计算法的若干原则	8
习题 1	12
第 2 章 非线性方程的数值解法	14
2.1 引言	14
2.1.1 问题的背景	14
2.1.2 一元方程根的隔根区间	14
2.2 二分法	15
2.3 迭代法	17
2.3.1 迭代法的基本思想	17
2.3.2 根的存在性与迭代法的收敛性	19
2.3.3 局部收敛性与收敛速度	21
2.4 迭代收敛的加速方法	24
2.4.1 迭代 - 加速方法	24
2.4.2 埃特金加速方法	26
2.5 牛顿迭代法	27
2.5.1 牛顿迭代法及其收敛性	27
2.5.2 简化牛顿法	32
2.6 弦截法	32
2.6.1 单点弦截法	32
2.6.2 双点弦截法	34
2.7 MATLAB 解法及主要程序	35
2.7.1 MATLAB 算法	35
2.7.2 主要程序	37
习题 2	40
数值实验题	41

第 3 章 解线性方程组的直接法	43
3.1 高斯消去法	43
3.1.1 高斯消去法的计算过程	43
3.1.2 高斯消去法的矩阵解释	46
3.1.3 高斯消去法的运算量	48
3.2 主元素消去法	49
3.2.1 列主元素法	50
3.2.2 全主元素法	51
3.2.3 高斯 - 约当消去法	52
3.3 三角分解法	53
3.3.1 LU 分解法	53
3.3.2 对称正定矩阵的平方根法	55
3.3.3 解三对角方程组的追赶法	59
3.4 向量范数与矩阵范数	61
3.4.1 向量范数	62
3.4.2 矩阵范数	63
3.5 方程组的敏感性、条件数*	66
3.6 MATLAB 解法及主要程序	69
3.6.1 解方程组的 MATLAB 命令及函数	69
3.6.2 主要程序	71
习题 3	75
数值实验题	77
第 4 章 解线性方程组的迭代法	78
4.1 基本迭代法	78
4.1.1 Jacobi 迭代法	79
4.1.2 Gauss - Seidel 迭代法	80
4.1.3 超松弛迭代法	81
4.2 迭代法的收敛性	83
4.2.1 单点线性迭代法的基本定理	84
4.2.2 特殊方程组的几个常用判别条件	86
4.3 MATLAB 解法及主要程序	90
4.3.1 有关的 MATLAB 函数	90
4.3.2 主要程序	91
习题 4	93
数值实验题	95
第 5 章 矩阵特征值与特征向量的计算	96
5.1 幂法与反幂法	96
5.1.1 幂法	96
5.1.2 幂法的加速	100
5.1.3 反幂法	102
5.2 Jacobi 方法	104
5.3 QR 算法*	110

5.4	MATLAB 解法及主要程序	111
5.4.1	相关命令	111
5.4.2	主要程序	113
	习题 5	116
	数值实验题	117
第 6 章	插值法	118
6.1	引言	118
6.2	拉格朗日插值	119
6.2.1	插值基函数	120
6.2.2	拉格朗日插值多项式	121
6.2.3	拉格朗日插值多项式的余项	122
6.3	均差与牛顿插值	125
6.3.1	均差及其性质	125
6.3.2	牛顿插值公式	126
6.4	差分与等距节点插值*	128
6.4.1	差分的定义及性质	128
6.4.2	等距节点插值多项式及其余项	129
6.5	Hermite 插值	132
6.5.1	完全 Hermite 插值问题	132
6.5.2	不完全 Hermite 插值问题	135
6.6	分段低次插值	135
6.6.1	高次插值的病态性质	136
6.6.2	分段线性插值	136
6.6.3	分段三次 Hermite 插值*	138
6.7	三次样条插值	139
6.7.1	三次样条插值函数的定义	140
6.7.2	三次样条插值函数的构造	141
6.8	MATLAB 解法及主要程序	147
6.8.1	MATLAB 命令	147
6.8.2	主要程序	150
	习题 6	154
	数值实验题	156
第 7 章	最小二乘法与曲线拟合	157
7.1	用最小二乘法求解矛盾方程组	157
7.1.1	矛盾方程组	157
7.1.2	最小二乘法	158
7.2	非线性曲线拟合	161
7.2.1	多项式拟合	161
7.2.2	对数曲线拟合	164
7.2.3	指数曲线拟合	165
7.2.4	其它非线性曲线的拟合	167
7.3	MATLAB 解法及主要程序	169
7.3.1	MATLAB 算法	169

7.3.2 主要程序	170
习题 7	174
数值实验题	175
第 8 章 数值积分与数值微分	177
8.1 引言	177
8.2 牛顿-柯特斯求积公式	178
8.2.1 插值型求积方法	178
8.2.2 梯形求积公式和辛普森求积公式	178
8.2.3 牛顿-柯特斯公式	179
8.2.4 代数精确度	181
8.2.5 偶数阶求积公式的代数精确度	182
8.2.6 几种低阶求积公式的余项	183
8.2.7 求积公式的收敛性与稳定性	184
8.3 复化求积公式	185
8.3.1 复化梯形求积公式及其余项	185
8.3.2 复化辛普森求积公式及其余项	186
8.3.3 区间逐次分半求积法	188
8.4 龙贝格求积方法	190
8.5 高斯求积公式	193
8.5.1 高斯型求积公式	193
8.5.2 常用的高斯型求积公式	196
8.5.3 高斯求积公式的余项	199
8.5.4 高斯求积公式的数值稳定性和收敛性	200
8.6 数值微分	200
8.6.1 中点方法与误差分析	200
8.6.2 插值型求导公式	202
8.7 MATLAB 解法及主要程序	204
8.7.1 MATLAB 命令	204
8.7.2 主要程序	206
习题 8	210
数值实验题	212
第 9 章 常微分方程初值问题的数值解法	214
9.1 引言	214
9.2 欧拉法和改进欧拉法	215
9.2.1 欧拉法	215
9.2.2 局部截断误差和阶	217
9.2.3 隐式欧拉法和两步法	218
9.2.4 梯形法	219
9.2.5 改进的欧拉公式	221
9.3 龙格-库塔法	222
9.3.1 Taylor 级数法	222
9.3.2 龙格-库塔法的基本思想	223
9.3.3 二阶显式 R-K 方法	224

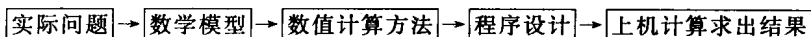
9.3.4	三阶、四阶显式 R - K 方法	225
9.3.5	变步长 R - K 方法	228
9.4	单步法的收敛性与稳定性	229
9.4.1	收敛性	229
9.4.2	绝对稳定性	230
9.5	线性多步法	233
9.5.1	用数值积分法构造线性多步公式	233
9.5.2	用泰勒展开法构造线性多步公式	236
9.5.3	几种重要的 4 阶线性多步格式	238
9.5.4	预测 - 校正技术和外推技巧	241
9.6	一阶常微分方程组的数值解法	244
9.7	MATLAB 解法及主要程序	247
9.7.1	MATLAB 算法	247
9.7.2	主要程序	249
	习题 9	253
	数值实验题	254
附录 A	MATLAB 简介	256
A.1	MATLAB 的发展历史	256
A.2	MATLAB 语言的特点	257
A.3	MATLAB 的工作环境	258
A.4	数值计算	262
A.5	图形功能	272
A.6	符号运算	282
A.7	程序设计	290
附录 B	部分习题参考答案	300
参考文献		306

第1章 绪 论

1.1 课程的内容、意义和特点

科学实验方法、科学理论方法和科学计算方法是现代社会的三类科学方法。本书的目的是介绍一些常用的、基本的科学计算方法。其内容可以概括为“用计算机求解数学问题的数值方法和理论”，简称“数值计算方法”。这里所谓数值计算方法，是指用这些计算方法所给出的答案一般是所求真解的某些近似值。

为了具体说明计算方法的研究对象，我们考察用计算机解决科学计算问题时经历的几个过程：



由实际问题的提出到上机求得问题解答的整个过程都可看做是应用数学的范畴。如果细分的话，由实际问题应用有关科学知识和数学理论建立数学模型这一过程，通常作为应用数学的任务。而根据数学模型提出求解的数值计算方法直到编出程序上机算出结果，这一过程是计算数学的任务，也是计算方法研究的对象。计算方法的内容包括函数的数值逼近、数值微分和数值积分、非线性方程数值解、数值线性代数、常微分方程数值解等，它们都是以数学问题为研究对象的，只是计算方法不像纯数学那样只研究数学本身的理论，而是把理论与计算紧密结合，着重研究数学问题的数值方法及其理论。

计算方法是一门内容丰富，研究方法深刻，有自身理论体系的课程，既有纯数学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，是一门与计算机紧密结合的实用性很强的数学课程，其方法和理论是我们解决某些实际问题时必须探讨的。我们知道，对一个实际问题，除了对其进行性质论证外，人们主要关心的是问题的解，包括解析解和数值解。但在任何时候都可以获得解析解的，即使有解析解有时也未必适用。如求积分 $\int_a^b e^{-x^2} dx$ ，由于函数 $f(x) = e^{-x^2}$ 没有有限形式的原函数，也就不能用 Newton - Leibniz 公式给出积分值的精确值。又如解 n 元线性方程组 $Ax = b$ (A 非奇异)，由 Cramer 法则知，它的解是 $x_i = D_i / D$ (D, D_i 均为 n 阶行列式)，这种方法虽然能得到问题的解析解，但当 n 较大时，运算量过大，因而不适用。事实上，可以验证求解 $Ax = b$ 的乘法运算次数为 $n!(n^2 - 1)$ 次，若用 3000 亿次每秒的巨型计算机计算，那么解 $n = 20$ 的线性方程组仅计算乘法就需要用

$$\frac{20!(20^2 - 1)}{3 \times 10^{11} \times 60 \times 60 \times 24 \times 365} = 102.6052(\text{年})$$

而当 $n=100$ 时,则需要 9.8635×10^{142} 年.

可见,这种解析解已毫无实用价值可言,我们必须研究适合计算机使用的、满足精度要求且计算时间短的有效算法及其相关的理论. 在实现这些算法时还要根据计算机的容量、字长、速度等指标,研究具体的求解步骤和程序设计技巧. 有的方法虽然在理论上不够严格,但通过实际计算、对比分析等手段证明是行之有效的,也应采用. 这就是计算方法具有的特点,概括起来有四点:

第一,面向计算机,用数值方法求解数学问题首先要设计算法. 由于计算机只能完成有限次的四则运算和有限次的逻辑运算,因此用计算机求解数学问题必须把所求解的数学问题按一定规则转化为一系列的四则算术运算. 我们把对数学问题的解法归结为只有“+,-,×,÷”等基本运算并有确定运算次序的完整而准确的描述称为“数值算法”或“算法”.

第二,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. 这些都建立在相应数学理论的基础上.

第三,要有好的计算复杂性,同一数学问题可能有多种数值计算方法,但未必都有效. 评价一个算法好坏的标准是:计算结果的精度和得到结果需要付出的代价. 计算代价也就是完成计算需要支付的金额. 算法由算术运算组成,用计算机来实现. 计算机计费的主要依据有两项:① 时间复杂性,即使用 CPU 的时间,主要由算术运算的次数决定;② 空间复杂性,即占用存储器的空间,主要由使用数据的数量和实现算法时附加空间的数量决定. 因此,计算代价也称为计算复杂性.

第四,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.

综上所述,数值计算方法的实用性、理论性和实践性都很强,它是涉及数学面比较宽并且与计算机密切相关的一门基础性学科. 在计算机高度发展的今天,应用数值方法不仅可以求解常规的数学问题,而且可以求解大规模的复杂数学问题.

1.2 误差的基本概念

1.2.1 误差的来源

在科学与工程计算中,估计计算结果的精确度是十分重要的工作,而影响精确度的是各种各样的误差.

(1) **模型误差**:用计算机解决实际问题时首先要建立数学模型,它是对被描述的问题进行抽象和简化而得到的,因而是近似的. 我们把数学模型与实际问题之间出现的这种误差称为模型误差.

(2) **观测误差**:在建立的数学模型中往往还有一些根据观测得到的物理量,如温度、长度、电压等,这些参量显然也包含误差. 这种由观测产生的误差称为观测误差.

(3) **截断误差(又称方法误差)**:在数值求解某个数学问题时,常常用有限过程逼近无限过程,用能计算的问题代替不能计算的问题,由此而产生的误差称为截断误差. 如

$$e = 1 + \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \cdots + \frac{1}{n!} + \cdots$$

用有限项

$$1 + \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \cdots + \frac{1}{100!}$$

近似代替 e 时, 截去的

$$\frac{1}{101!} + \frac{1}{102!} + \cdots$$

就是截断误差.

(4) 舍入误差: 由于计算机的字长有限, 因而参加运算的数据以及运算结果在计算机上存放会产生误差, 这种误差称为舍入误差. 如在 10 位十进制数的限制下, 会出现

$$1 \div 3 = 0.333\ 333\ 333\ 3$$

$$(1.000\ 002)^2 - 1.000\ 004 = 0$$

这两个结果都不是准确的, 因后者的准确结果为 4×10^{-12} . 这里所产生的误差就是舍入误差.

再如, 计算地球的表面积可以用公式 $S = 4\pi R^2$, 这之中就包含了许多误差. 首先, 地球被看成是一个球, 这是地球的简单理想模型, 它与地球的实际情况有很大的差别; 其次, 地球的半径 R 要经过测量和计算得到, 无论采用怎样的测量手段, 其误差总是不可避免的; 再次, 公式中的 π 是无理数, 在计算机中无法精确表示, 所以只能够将它截断到有限字长; 最后, 输入的数据和公式的计算都被舍入.

观测误差和原始数据的来源虽然不同, 但二者对计算结果的影响是一样的. 至于模型误差和观测误差, 往往不是计算工作者能够独立解决的, 因此, 本书总假定数学模型是合理的, 观测数据是精确的, 这两类误差可忽略不计, 因而不予以讨论, 我们主要研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响.

1.2.2 误差与有效数字

定义 1.1 设 x 为准确值, x^* 为 x 的一个近似值, 称 $e(x^*) = x^* - x$ 为近似值 x^* 的绝对误差, 简称误差.

注意这样定义的误差 $e(x^*)$ 可正可负, 当绝对误差为正时近似值偏大, 叫**强近似值**; 当绝对误差为负时近似值偏小, 叫**弱近似值**.

通常我们不能算出准确值 x , 也不能算出误差 $e(x^*)$ 的准确值, 只能根据测量工具或计算情况估计出误差的绝对值不超过某正数 ϵ , 也就是误差绝对值的一个上界. ϵ 叫做近似的**误差限**, 它总是正数. 例如, 用毫米刻度的米尺测量一长度 x , 读出和该长度接近的刻度 x^* , x^* 是 x 的近似值, 它的误差限是 0.5 mm, 于是 $|x^* - x| \leq 0.5$ mm; 如读出的长度为 765 mm, 则有 $|765 - x| \leq 0.5$. 从这个不等式我们仍不知道准确的 x 是多少, 但知道 $764.5 \leq x \leq 765.5$, 说明 x 在区间 $[764.5, 765.5]$ 内.

对于一般情形, 有 $|x^* - x| \leq \epsilon$, 即

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

这个不等式有时也表示为 $x = x^* \pm \epsilon$.

误差限的大小还不能完全表示近似值的好坏. 例如, 有两个量 $x=10\pm 1$, $y=1000\pm 5$, 则

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

显然 ϵ_y 比 ϵ_x 大 4 倍, 但 $\epsilon_y/y^* = 0.5\%$ 比 $\epsilon_x/x^* = 10\%$ 要小得多, 这说明 y^* 近似 y 的程度比 x^* 近似 x 的程度要好得多. 因此, 除考虑误差的大小外, 还应考虑准确值 x 本身的大小.

定义 1.2 称近似值的误差与准确值的比值

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

为近似值 x^* 的相对误差, 记为 $e_r(x^*)$.

在实际计算中, 由于真值 x 总是不知道的, 通常取

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

作为 x^* 的相对误差, 条件是 $e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x^*}$ 比较小, 此时

$$\frac{e(x^*)}{x} - \frac{e(x^*)}{x^*} = \frac{e(x^*)(x^* - x)}{x^*x} = \frac{(e(x^*))^2}{x^*(x^* - e(x^*))} = \frac{(e(x^*)/x^*)^2}{1 - (e(x^*)/x^*)}$$

是 $e_r(x^*)$ 的平方项级, 故可忽略不计.

相对误差也可正可负, 它的绝对值上界叫做相对误差限, 记作 ϵ_r , 即 $\epsilon_r = \frac{\epsilon}{|x^*|}$.

根据定义, 前面例子中 $\frac{\epsilon_x}{|x^*|} = 10\%$ 与 $\frac{\epsilon_y}{|y^*|} = 0.5\%$ 分别为 x 与 y 的相对误差限, 可见 y^* 近似 y 的程度比 x^* 近似 x 的程度好.

为了能给出一种数的表示法, 使之既能表示其大小, 又能表示其精确程度, 下面引入有效数字的概念. 在实际计算中, 当准确值 x 有多位数时, 常按四舍五入的原则得到 x 的前几位近似值 x^* , 例如

$$x = \pi = 3.141\ 592\ 65\cdots$$

取 3 位 $x_3^* = 3.14, \epsilon_3 \leq 0.002 < 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$

取 5 位 $x_5^* = 3.1416, \epsilon_5 \leq 0.000\ 008 < 0.000\ 05 = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$

它们的误差都不超过末位数的半个单位, 即

$$|\pi - 3.14| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}, |\pi - 3.1416| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

定义 1.3 若近似值 x^* 的误差限是某一位上的半个单位, 从该位到 x^* 的第一个非零数字共有 n 位, 就说 x^* 具有 n 位有效数字.

如上述 $\pi^* = 3.14$ 作为 π 的近似值, π^* 就有 3 位有效数字, 而当 $\pi^* = 3.1416$ 时, π^* 具有 5 位有效数字. 一般来说, 若 x^* 有 n 位有效数字, 则写成标准形式为

$$\begin{aligned} x^* &= \pm 10^m \times (a_1 \times 10^{-1} + a_2 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n}) \\ &= \pm (0.a_1a_2\cdots a_n) \times 10^m \end{aligned} \quad (1.1)$$

其中, $a_i (i=1, 2, \cdots, n)$ 是 0 到 9 中的一个数字, $a_1 \neq 0$, m 为整数, n 为正整数, 且

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \quad (1.2)$$

例 1.1 按四舍五入的原则写出下列各数具有 5 位有效数字的近似数:

187.9325, 0.037 855 551, 5.000 033, 2.718 281 8

按定义, 上述各数具有 5 位有效数字的近似数分别是

187.93, 0.037 856, 5.0000, 2.7183

注意, $x=5.000\ 033$ 的 5 位有效数字近似数是 5.0000 而不是 5, 因为 5 只有 1 位有效数字.

例 1.2 重力常数 g , 如果以 m/s^2 为单位, $g \approx 9.80 \text{ m/s}^2$; 若以 km/s^2 为单位, $g \approx 0.00980 \text{ km/s}^2$, 它们都具有 3 位有效数字. 按第一种写法

$$|g - 9.80| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

这里 $m=1, n=3$; 按第二种写法

$$|g - 0.009\ 80| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-5}$$

这里 $m=-2, n=3$. 虽然它们的写法不同, 但都具有 3 位有效数字. 至于绝对误差限, 由于单位不同结果也不同, $\epsilon_1 = \frac{1}{2} \times 10^{-2} \text{ m/s}^2$, $\epsilon_2 = \frac{1}{2} \times 10^{-5} \text{ km/s}^2$, 而相对误差限都是 $\epsilon_r = 0.005/9.80 = 0.000\ 005/0.009\ 80 = 1/1960$.

注意相对误差与相对误差限是无量纲的, 而绝对误差与绝对误差限是有量纲的.

例 1.2 说明有效数字与小数点后有多少位数无关. 然而, 从式(1.2)可以得到具有 n 位有效数字的近似数 x^* , 其绝对误差限为

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

在 m 相同的情况下, n 越大则 10^{m-n} 越小, 故有效位数越多, 绝对误差限越小.

注: (1) 在有效数字的记法中, 0.154×10^{-3} 和 0.1540×10^{-3} 是不相同的, 前者只有 3 位有效数字, 而后者有 4 位有效数字.

(2) 如果只知道 $x^* = 300\ 000$ 的绝对误差限不超过 $500 = \frac{1}{2} \times 10^3$, 则应将其记为 300×10^3 或 3.00×10^5 , 此时表示 x^* 具有 3 位有效数字, 因而

$$|x^* - x| = |x - 300 \times 10^3| = |x - 0.3 \times 10^6| \leq \frac{1}{2} \times 10^{6-3} = 500$$

但若仍记为 $x^* = 300\ 000$, 则表示有 6 位有效数字, 此时

$$|x^* - x| = |x - 300\ 000| = |x - 0.3 \times 10^6| \leq \frac{1}{2} \times 10^{6-6} = 0.5$$

(3) 一个准确数字的有效位数, 应当说有无穷多位. 如 $\frac{1}{4} = 0.25$, 不能说只有 2 位有效数字.

关于相对误差限与有效数字的关系, 有

定理 1.1 用式(1.1)表示的近似数 x^* , 若它有 n 位有效数字, 则其相对误差限

$$|\epsilon_r| = \left| \frac{x^* - x}{x^*} \right| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} \quad (1.3)$$

反之,若 x^* 的相对误差限满足

$$|\epsilon_r| = \left| \frac{x^* - x}{x^*} \right| \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)} \quad (1.4)$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证明 由式(1.1)得

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

当 x^* 有 n 位有效数字时,由式(1.2)即得

$$|\epsilon_r| = \left| \frac{x^* - x}{x^*} \right| \leq \frac{0.5 \times 10^{m-n}}{a_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

反之,由

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

知, x^* 具有 n 位有效数字. □

该定理表明,有效数字的位数越多,相对误差越小.

例 1.3 为了使 $\sqrt{20}$ 的近似值的相对误差小于 1%,问至少应取几位有效数字?

解 $\sqrt{20}$ 的近似值的首位非零数字是 4,现设取 n 位有效数字,则由式(1.3)有

$$|\epsilon_r| \leq \frac{1}{2 \times 4} \times 10^{1-n} < 1\%$$

解之得 $n > 2$,所以取 $n = 3$,即 $\sqrt{20} \approx 4.47$.

1.3 数值计算中的误差估计

在数值计算中,由于参与运算的数据是观测数据,这些近似数据在进行算术运算及函数运算后对计算结果会产生什么影响?这就是下面要讨论的数值计算中的误差估计,即误差的传播问题.

1.3.1 一元函数的误差估计

设自变量 x 的近似值为 x^* ,则函数 $y = f(x)$ 的近似值 $y^* = f(x^*)$,记 x^* 与 $f(x^*)$ 的误差限分别为 $\epsilon(x^*)$ 和 $\epsilon(f(x^*))$.现将 $f(x)$ 在 x^* 点用 Taylor 公式展开,得

$$f(x) - f(x^*) = f'(x^*)(x - x^*) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x^*)^2 \quad (\xi \text{ 介于 } x \text{ 与 } x^* \text{ 之间})$$

取绝对值得

$$|f(x) - f(x^*)| \leq |f'(x^*)| \epsilon(x^*) + \frac{|f''(\xi)|}{2} \epsilon^2(x^*)$$

假定 $f'(x^*)$ 与 $f''(x^*)$ 的比值不太大,可忽略 $\epsilon(x^*)$ 的高阶项,于是得计算函数的误差限

$$\epsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)| \epsilon(x^*) \quad (1.5)$$

例 1.4 若测得圆的半径为 $R^* = 10$ mm,误差限 $\epsilon(R^*) = 0.5$ mm,相对误差为 10%,那么圆面积的误差是多少?相对误差是多少(取 $\pi = 3$)?

解 设面积 $S = \pi R^2$,则由公式(1.5)得

$$\varepsilon(S^*) = \pi R^2 - \pi R^{*2} \approx (\pi R^2)' |_{R=R^*} \varepsilon(R^*) = 2\pi R^* \varepsilon(R^*) = 30 \text{ mm}^2$$

$$\varepsilon_r(S^*) = \frac{\varepsilon(S^*)}{S^*} = \frac{\varepsilon(S^*)}{\pi R^{*2}} = \frac{30}{300} = 10\%$$

1.3.2 二元函数的误差估计

设数 x, y 的近似值分别为 x^* 和 y^* , 则函数 $z = f(x, y)$ 的近似值 $z^* = f(x^*, y^*)$. 以下求误差 $e(z^*) = z - z^* = f(x, y) - f(x^*, y^*)$. 同样, 利用二元函数的 Taylor 公式得

$$\begin{aligned} f(x, y) - f(x^*, y^*) &\approx \frac{\partial f'(x^*, y^*)}{\partial x}(x - x^*) + \frac{\partial f'(x^*, y^*)}{\partial y}(y - y^*) \\ &= \frac{\partial f'(x^*, y^*)}{\partial x}e(x^*) + \frac{\partial f'(x^*, y^*)}{\partial y}e(y^*) \end{aligned} \quad (1.6)$$

因此, 若已知 $|e(x^*)| = |x - x^*| \leq \varepsilon(x^*)$, $|e(y^*)| = |y - y^*| \leq \varepsilon(y^*)$, 则误差限

$$|\varepsilon(z^*)| \approx \left| \frac{\partial f'(x^*, y^*)}{\partial x} \right| \varepsilon(x^*) + \left| \frac{\partial f'(x^*, y^*)}{\partial y} \right| \varepsilon(y^*) \quad (1.7)$$

一般地, n 元函数 $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 在点 $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ 的近似值的误差为

$$e(y^*) \approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} e(x_i^*) \quad (1.8)$$

1.3.3 四则运算的误差

设 x, y 的近似值分别为 x^* 和 y^* , 误差限分别为 $\varepsilon(x^*)$ 和 $\varepsilon(y^*)$, 则由公式(1.6)和(1.7)得

(1) 和 $(x+y)$ 的误差:

$$\begin{aligned} e(x^* + y^*) &= (x + y) - (x^* + y^*) = e(x^*) + e(y^*) \\ \varepsilon(x^* + y^*) &\approx \varepsilon(x^*) + \varepsilon(y^*) \end{aligned} \quad (1.9)$$

(2) 差 $(x-y)$ 的误差:

$$\begin{aligned} e(x^* - y^*) &= (x - y) - (x^* - y^*) = e(x^*) - e(y^*) \\ \varepsilon(x^* - y^*) &\approx \varepsilon(x^*) + \varepsilon(y^*) \end{aligned}$$

(3) 积 (xy) 的误差:

$$\begin{aligned} e(x^* y^*) &= xy - x^* y^* \approx y^* e(x^*) + x^* e(y^*) \\ \varepsilon(x^* y^*) &\approx |y^*| \varepsilon(x^*) + |x^*| \varepsilon(y^*) \end{aligned} \quad (1.10)$$

(4) 商 $\left(\frac{x}{y}\right)$ 的误差:

$$\begin{aligned} e\left(\frac{x}{y}\right) &= \frac{x}{y} - \frac{x^*}{y^*} \approx \frac{1}{y^*} e(x^*) - \frac{x^*}{y^{*2}} e(y^*) \\ \varepsilon\left(\frac{x}{y}\right) &\approx \frac{1}{|y^*|^2} (|y^*| \varepsilon(x^*) + |x^*| \varepsilon(y^*)) \end{aligned} \quad (1.11)$$

以上结论可以推广到任意有限个变元的情形.

综上所述, 在函数运算及四则运算中误差随运算次数的增加而积累增大.

例 1.5 设 $a = 1.21 \times 3.65 + 9.81$, 其中每个数据的绝对误差限均为 0.005, 求 a 的绝对误差限.