



普通高等教育“十二五”规划教材
21世纪大学数学创新教材

丛书主编 陈化

数值分析

李星 主编



科学出版社

普通高等教育“十二五”规划教材
21 世纪大学数学创新教材
丛书主编 陈 化

数 值 分 析

李 星	主 编
何水明 向东进	副主编
王军霞 王元媛	

中国地质大学精品教材建设项目资助

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

全书共9章,主要包括:误差及有效数字等概念、插值与拟合、数值积分、解线性方程组的直接法和迭代法、非线性方程和方程组求根、矩阵特征值和特征向量求解、常微分方程和偏微分方程数值解法等。每章后都附有习题,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. —北京:科学出版社,2014.1

普通高等教育“十二五”规划教材 21世纪大学数学创新教材

ISBN 978-7-03-039463-7

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(2013)第12508号



责任编辑:王 莉 责任校对:蔡 莹
责任印制:高 崑 封面设计:蓝 正

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

武汉市首壹印务有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

开本: B5(720×1 000)

2014年1月第 一 版 印张:12 1/4

2014年1月第一次印刷 字数:235 000

定价:28.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

《21 世纪大学数学创新教材》丛书编委会

主 编 陈 化

常务副主编 樊启斌

副 主 编 吴传生 何 穗 刘安平

编 委 (按姓氏笔画为序)

王卫华 王展青 刘安平 严国政

李 星 杨瑞琰 肖海军 吴传生

何 穗 陈 化 罗文强 赵东方

黄樟灿 梅全雄 彭 放 彭斯俊

曾祥金 谢民育 樊启斌

《21 世纪大学数学创新教材》丛书序

《21 世纪大学数学创新教材》为大学本科数学系列教材,大致划分为公共数学类、专业数学类两大块,创新是其主要特色和要求.经组编委员会审定,列选科学出版社普通高等教育“十一五”规划教材.

一、组编机构

《21 世纪大学数学创新教材》丛书由多所 985 和 211 大学联合组编:

丛书主编 陈 化

常务副主编 樊启斌

副 主 编 吴传生 何 穗 刘安平

丛书编委 (按姓氏笔画为序)

王卫华 王展青 刘安平 严国政 李 星

杨瑞琰 肖海军 吴传生 何 穗 陈 化

罗文强 赵东方 黄樟灿 梅全雄 彭 放

彭斯俊 曾祥金 谢民育 樊启斌

二、教材特色

创新是本套教材的主要特色和要求,创造双重品牌:

先进.把握教改、课改动态和学科发展前沿,学科、课程的先进理念、知识和方法原则上都要写进教材或体现在教材结构及内容中.

知识与方法创新.重点教材、高层次教材,应体现知识、方法、结构、内容等方面的创新,有所建树,有所创造,有所贡献.

教学实践创新.教材适用,教师好教,学生好学,是教材的基本标准.应紧跟和引领教学实践,在教学方法、教材结构、知识组织、详略把握、内容安排上有独到之处.

继承与创新.创新须与继承相结合,是继承基础上的创新;创新需转变为参编者、授课者的思想和行为,避免文化冲突.

三、指导思想

遵循国家教育部高等学校数学与统计学教学指导委员会关于课程教学的基本要求,力求教材体系完整,结构严谨,层次分明,深入浅出,循序渐进,阐述精炼,富有启发性,让学生打下坚实的理论基础.除上述一般性要求外,还应具备下列特点:

(1) 恰当融入现代数学的新思想、新观点、新结果,使学生有较新的学术视野.

(2) 体现现代数学创新思维,着力培养学生运用现代数学软件的能力,使教材真正成为基于现代数学软件的、将数学软件融合到具体教学内容中的现代精品教材。

(3) 在内容取舍、材料组织、叙述方式等方面具有较高水准和自身特色。

(4) 数学专业教材要求同步给出重要概念的英文词汇,章末列出中文小结,布置若干道(少量)英文习题,并要求学生用英文解答,章末列出习题和思考题,并列出可进一步深入阅读的文献,书末给出中英文对照名词索引。

(5) 公共数学教材具有概括性和简易性,注重强化学生的实验训练和实际动手能力,加强内容的实用性,注重案例分析,提高学生应用数学知识和数学方法解决实际问题的能力。

四、主编职责

丛书组编委员会和出版社确定全套丛书的编写原则、指导思想和编写规范,在这一框架下,每本教材的主编对本书具有明确的责权利:

1. 拟定指导思想

按照丛书的指导思想和特色要求,拟出编写本书的指导思想和编写说明。

2. 明确创新点

教改、课改动态,学科发展前沿,先进理念、知识和方法,如何引入教材;知识和内容创新闪光点及其编写方法;教学实践创新的具体操作;创新与继承的关系把握及其主客体融合。

3. 把握教材质量

质量是图书的生命,保持和发扬科学出版社“三高”、“三严”的传统特色,创出品牌;适用性是教材的生命力所在,应明确读者对象,篇幅要结合大部分学校对课程学时数的要求。

4. 掌握教材编写环节

(1) 把握教材编写人员水平,原则上要求博士、副教授以上,有多年课程教学经历,熟悉课程和学科领域的发展状况,有教材编写经验,有扎实的文字功底。

(2) 充分注意著作权问题,不侵犯他人著作权。

(3) 讨论、拟定教材提纲,并负责编写组的编写分工、协调与组织。

(4) 拟就内容简介、前言、目录、样章,统稿、定稿,确定交稿时间。

(5) 负责出版事宜,敦促编写组成员使用本教材,并优先选用本系列教材。

《21 世纪大学数学创新教材》组编委员会

2009 年 6 月

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 在近似计算中需要注意的一些问题	9
习题一	13
第 2 章 插值与拟合	14
2.1 插值及多项式插值	14
2.2 拉格朗日插值	17
2.3 牛顿插值	21
2.4 埃尔米特插值	25
2.5 分段低次插值	28
2.6 三次样条插值	38
2.7 最小二乘拟合	45
习题二	52
第 3 章 数值积分	56
3.1 牛顿-柯特斯求积公式	56
3.2 复化求积公式	62
3.3 龙贝格公式	65
3.4 高斯型求积公式	69
习题三	77
第 4 章 解线性方程组的直接法	79
4.1 高斯消去法	79
4.2 矩阵的 LU 分解法	84
4.3 特殊线性方程组的三角分解法	89
4.4 向量范数及矩阵范数	93
4.5 方程组的性态与误差分析	95
习题四	98
第 5 章 解线性方程组的迭代法	101
5.1 常用迭代法	101
5.2 迭代法的收敛性	108
习题五	111

第 6 章 非线性方程求根	113
6.1 基本概念	113
6.2 牛顿法	119
6.3 割线法	121
6.4 非线性方程组求根	122
习题六	124
第 7 章 常微分方程数值解法	126
7.1 欧拉法	127
7.2 龙格-库塔法	133
7.3 线性多步法	138
7.4 一阶微分方程组与高阶微分方程的数值解法	149
习题七	150
第 8 章 矩阵特征值与特征向量数解法	152
8.1 幂法与反幂法	152
8.2 QR 方法	160
习题八	163
第 9 章 偏微分方程的差分法	165
9.1 偏微分方程的基本概念	165
9.2 差分法预备知识	167
9.3 抛物型方程的差分法	170
9.4 双曲型方程的差分解法	176
9.5 椭圆型方程的差分解法	177
习题九	178
习题参考答案	180
参考文献	186

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、存贮单元省、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试验

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试验,来证明算法的可行性和有效性.

例如,根据(1.2)式,取 $n = 10000$,并且利用 $\frac{1}{n!} = \frac{1}{(n-1)!} \cdot \frac{1}{n}$,在计算机上计算出 $e \approx 2.71828$. 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:插值和数据拟合、数值积分、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、矩阵特征值和特征向量的计算方法、常微分方程和偏微分方程数值解法等.

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. 那么从开始到时刻 t ,物体下降的实际距离 $s(t)$ 与下降的计算距离 $s^*(t)$ 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. 精确解与近似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,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,则准确值 x 与近似值 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:

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

如果某把尺的最小刻度是厘米, 那么在用该尺测量物体长度时, 测量出的准确值 x 与近似值 x^* 之差的绝对值一般不会超过半厘米, 即 $|e(x^*)| \leq 0.5$ (厘米), 或 $\epsilon(x^*) = 0.5$ (厘米). 如果某把尺的最小刻度是毫米, 可得 $\epsilon(x^*) = 0.5$ (毫米).

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.

如果在测量一个 10 (米) 长的物体时, 误差为 0.01 (米); 在测量一个 1 (米) 长的物体时, 误差也为 0.01 (米). 虽然两者的误差都是 0.01 (米), 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. 为此, 我们引进相对误差的概念.

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

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

下面讨论一下 $\frac{e(x^*)}{x}$ 与 $\frac{e(x^*)}{x^*}$ 之间的关系. 由于

$$\begin{aligned} \frac{e(x^*)}{x^*} - \frac{e(x^*)}{x} &= \frac{e(x^*)(x - x^*)}{x^*x} = \frac{e(x^*)^2}{[x - e(x^*)]x} \\ &= \frac{\left(\frac{e(x^*)}{x}\right)^2}{1 - \frac{e(x^*)}{x}} = \frac{e_r(x^*)^2}{1 - e_r(x^*)} \end{aligned}$$

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 $e_r(x^*)$ 比较小时, 有

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

即

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

所以,也可以用 $\frac{e(x^*)}{x^*}$ 作为 x^* 的相对误差,即 $e_r(x^*) = \frac{e(x^*)}{x^*}$.

类似地,相对误差限的定义为:

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

$$|e_r(x^*)| = \frac{|e(x^*)|}{|x^*|} \leq \frac{\epsilon(x^*)}{|x^*|} \quad \text{或} \quad |e_r(x^*)| = \frac{|e(x^*)|}{|x^*|} \leq \frac{\epsilon(x^*)}{|x^*|}$$

所以还有

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

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

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

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

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

由于精确值 y 通常未知,所以一般用近似值 y^* 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

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

同样,用近似值 y^* 代替精确值 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^* 作四则运算后,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 $e(x^*)$ 较小时,可以舍去上式右端第二项,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

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

如果 $z = f(x, y)$, 那么应用多元函数的泰勒公式, 可得(论证过程略)

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

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 $\pi = 3.14159265\cdots$, 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 $\epsilon(\pi^*) = \frac{1}{2} \times 0.0001$.

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

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, 它的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,若 x 的近似值 x^* 可表示成如下形式

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

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

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

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

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

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 (1) 因为 x^* 有 n 位有效数字,所以

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

又由于 $|x^*| = 0. a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m \geq 0. a_1 \times 10^m$, 因此

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

即

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

(2) 因为 x^* 的相对误差限

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

而且

$$|x^*| = 0. a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m \leq 0. (a_1 + 1) \times 10^m$$

所以

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