

数值计算方法

—— 算法及其程序设计

◎主编 龔 莹

SHUZHUISUANFANGFA
SUANFA JI QI CHENGXU SHEJI



高等院校计算机科学与技术专业“十二五”规划教材

数值计算方法—— 算法及其程序设计

主 编 龔 莹
副主编 马军星 梁锦锦
潘少伟 谢文昊



0241-43
83

西安电子科技大学出版社



北航

C1746402

内 容 简 介

本书比较全面地介绍了科学与工程计算中一些基本的数值计算方法。全书共10章,主要内容包括线性方程组的直接解、线性方程组的迭代解、非线性方程的近似解、插值、曲线拟合的最小二乘法、积分与微分的数值方法、常微分方程的数值方法、数值计算方法的编程实现及工程数值计算方法实验指导等。同时每章配有一定的算例分析、小结及习题,并在书末给出了部分习题的参考答案。

本书的特色是:注重算法与程序实现,强调理论知识与程序设计的紧密结合,既有理论性,也有实用性;书中精选了相当数量的算法,配备有N-S流程图算法描述及其相应的C程序和MATLAB程序,所有程序都已调试通过;重点突出,解释详尽;例题、习题丰富;最后一章是与所学内容紧密结合的上机实验与指导。全书阐述严谨、脉络清晰,深入浅出,便于教学。

本书可作为高等理工院校各专业本科生、研究生“数值计算方法”课程的教材或教学参考书,也可供从事数值计算的科技工作人员学习参考。

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法:算法及其程序设计/鬻莹主编. —西安:西安电子科技大学出版社, 2014. 6

高等院校计算机科学与技术专业“十二五”规划教材

ISBN 978 - 7 - 5606 - 3378 - 7

I. ①数… II. ①鬻… III. ①数值计算—计算方法 IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 119117 号

策划编辑 马乐惠

责任编辑 雷鸿俊 马乐惠

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 陕西华沐印刷科技有限责任公司

版 次 2014年6月第1版 2014年6月第1次印刷

开 本 787毫米×1092毫米 1/16 印张 16

字 数 374千字

印 数 1~3000册

定 价 28.00元

ISBN 978 - 7 - 5606 - 3378 - 7/O

XDUP 3670001 - 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

“数值计算方法”是高等院校多个专业学生的必修课程。随着科学技术的不断发展与计算机技术的广泛应用，数值计算在工程应用领域越来越凸显出重要作用。笔者从事数值计算方法课程的教学工作多年，在教材内容的选择上，参考了很多相关的资料，吸取了很多同仁的宝贵经验，并融进了作者多年的教学经验。本书与高校40~60学时的教学安排相吻合，也适用于自学。全书尽量凸显算法理论与计算机编程实现的互动性，紧紧围绕工程实际应用需要，注重算法流程图说明和程序实现。在遵循本学科基础性和实用性并重的前提下，尽量注意由浅入深、融会贯通的教学理念，注重培养学生的基本计算能力和编程能力。

本书强调理论知识与程序设计的紧密结合，注重算法与程序实现，既有理论性，也有实用性。全书力求阐述严谨、脉络清晰、深入浅出；把握教学难度、深度、广度、实用度的一体性，以便学生为科学工程技术问题提供有效可靠的数值计算方法。

在学习本课程之前，应先修“高等数学”、“线性代数”和“高级语言程序设计”等课程。

讲授全书约需要40~60学时，各章建议学时为：第1章2~3学时；第2章6~8学时；第3章6~9学时；第4章6~8学时；第5章6~9学时；第6章3~5学时；第7章6~9学时；第8章6~9学时。第10章为上机实验指导，读者可以有针对性地上机实验，提高编程能力，巩固所学知识。

本书由西安石油大学计算机学院龔莹主编。第1章、第3章、第4章、第6章、第9章、第10章由龔莹编写；第2章由长安大学马军星编写；第5章、第7章由西安石油大学潘少伟编写；第8章8.1、8.2、8.5节由西安石油大学谢文昊编写，第8章8.3、8.4节由西安石油大学梁锦锦编写。全书由龔莹、梁锦锦统稿。西安石油大学计算机学院研究生王李凡、赵洋完成了书中代码的编写调试工作。本书在编写过程中，得到了西安电子科技大学出版社的大力支持和帮助，马乐惠编辑为本书的出版付出了辛勤的劳动。在此向相关人员一并表示诚挚的感谢。

限于编者的水平，书中疏漏之处在所难免，恳请各位专家和读者提出宝贵意见，以便再版时加以修正，更好地为读者服务。

编 者

2014年3月

目 录

第 1 章 引论	(1)
1.1 工程数值计算的对象特点和意义	(1)
1.2 误差分析	(2)
1.2.1 误差分析的重要性	(2)
1.2.2 误差来源及误差分类	(2)
1.2.3 绝对误差、相对误差及有效数字	(3)
1.3 算法特性及 N-S 流程图	(6)
1.3.1 算法特性	(6)
1.3.2 N-S 流程图表示	(7)
1.4 选用算法时遵循的原则	(9)
本章小结	(10)
习题	(11)
第 2 章 线性方程组的直接解	(12)
2.1 高斯消去法	(12)
2.1.1 顺序高斯消去法	(12)
2.1.2 列主元消去法	(15)
2.1.3 列主元消去法算法设计	(16)
2.2 对称正定矩阵的平方根法	(18)
2.2.1 矩阵的三角分解	(18)
2.2.2 对称正定矩阵的平方根法	(21)
2.2.3 改进的平方根法算法设计	(24)
2.3 三对角线性方程组的追赶法	(25)
2.3.1 三对角方程组	(25)
2.3.2 追赶法	(27)
2.3.3 追赶法算法设计	(28)
2.4 误差分析	(29)
2.4.1 向量和矩阵的范数	(29)
2.4.2 病态方程组与条件数	(31)
2.5 算例分析	(33)
本章小结	(37)
习题	(37)
第 3 章 线性方程组的迭代解	(39)
3.1 迭代法的基本思想	(39)

3.2 雅可比迭代法与高斯—赛德尔迭代法	(40)
3.2.1 雅可比迭代法	(40)
3.2.2 高斯—赛德尔迭代法	(42)
3.2.3 高斯—赛德尔迭代法算法设计	(44)
3.3 逐次超松弛迭代法	(45)
3.4 迭代法的收敛性	(46)
3.5 算例分析	(49)
本章小结	(52)
习题	(52)
第 4 章 非线性方程的近似解	(54)
4.1 引言	(54)
4.2 二分法	(55)
4.2.1 二分法的基本原理	(55)
4.2.2 二分法算法设计	(56)
4.3 迭代法	(57)
4.3.1 迭代法的基本原理与迭代过程的收敛性	(57)
4.3.2 埃特金(Aitken)加速算法	(60)
4.3.3 埃特金加速算法设计	(62)
4.4 牛顿迭代法	(63)
4.4.1 牛顿(Newton)迭代公式及其几何意义	(63)
4.4.2 牛顿迭代法的收敛性	(64)
4.4.3 牛顿迭代法算法设计	(66)
4.5 弦截法	(67)
4.5.1 弦截法的基本原理	(67)
4.5.2 弦截法的收敛性	(69)
4.5.3 弦截法算法设计	(70)
4.6 算例分析	(71)
本章小结	(73)
习题	(74)
第 5 章 插值	(75)
5.1 引言	(75)
5.1.1 代数插值问题	(75)
5.1.2 插值多项式的存在与唯一性	(76)
5.1.3 代数插值的几何意义	(76)
5.1.4 插值余项	(77)
5.2 拉格朗日插值	(77)
5.2.1 线性插值、抛物插值及一般插值	(77)
5.2.2 插值余项与误差估计	(79)
5.2.3 拉格朗日插值算法设计	(81)

5.3	牛顿插值	(82)
5.3.1	差商及其性质	(82)
5.3.2	牛顿插值多项式	(85)
5.3.3	插值余项与误差估计	(86)
5.3.4	牛顿插值算法设计	(87)
5.4	埃尔米特插值	(88)
5.4.1	概述	(88)
5.4.2	插值余项与误差估计	(89)
5.4.3	埃尔米特插值算法设计	(90)
5.5	三次样条插值	(91)
5.5.1	样条函数与插值三次样条函数	(91)
5.5.2	用型值点处的一阶导数表示插值三次样条——m 关系式	(92)
5.5.3	用型值点处的二阶导数表示插值三次样条——M 关系式	(94)
5.5.4	三次样条插值算法设计	(97)
5.6	算例分析	(98)
	本章小结	(102)
	习题	(103)
第 6 章	曲线拟合的最小二乘法	(105)
6.1	曲线拟合问题	(105)
6.2	最小二乘法原理	(105)
6.3	矛盾方程组的求解	(106)
6.4	用多项式作最小二乘曲线拟合	(109)
6.5	曲线拟合的最小二乘算法设计	(113)
6.6	算例分析	(115)
	本章小结	(116)
	习题	(116)
第 7 章	积分与微分的数值方法	(118)
7.1	梯形公式、辛甫生公式与柯特斯公式	(118)
7.1.1	梯形公式	(118)
7.1.2	辛甫生公式	(120)
7.1.3	柯特斯公式	(120)
7.1.4	柯特斯公式算法设计	(122)
7.2	龙贝格求积公式	(122)
7.2.1	龙贝格公式	(122)
7.2.2	龙贝格算法设计	(126)
7.3	高斯公式	(126)
7.3.1	高斯公式	(126)
7.3.2	高斯公式的余项与收敛性	(130)
7.4	数值微分	(132)

7.4.1 差商型求导公式	(132)
7.4.2 插值型求导公式	(133)
7.5 算例分析	(134)
本章小结	(140)
习题	(140)
第8章 常微分方程的数值方法	(142)
8.1 欧拉公式	(142)
8.1.1 欧拉公式及其几何意义	(142)
8.1.2 欧拉公式的改进	(144)
8.1.3 改进的欧拉公式算法设计	(147)
8.2 龙格—库塔方法	(148)
8.2.1 二阶龙格—库塔法	(149)
8.2.2 四阶经典的龙格—库塔算法及变步长的龙格—库塔算法	(150)
8.2.3 四阶经典的龙格—库塔法算法设计	(152)
8.3 亚当姆斯方法	(153)
8.3.1 亚当姆斯公式	(153)
8.3.2 亚当姆斯预报—校正	(156)
8.3.3 亚当姆斯预报—校正的误差分析	(158)
8.4 一阶微分方程组及高阶微分方程	(159)
8.4.1 一阶微分方程组的数值解	(159)
8.4.2 高阶微分方程的数值解	(160)
8.5 算例分析	(162)
本章小结	(165)
习题	(165)
第9章 数值计算方法的编程实现	(168)
9.1 MATLAB 编程基础	(168)
9.1.1 MATLAB 简介	(168)
9.1.2 命令窗口	(168)
9.1.3 矩阵及矩阵运算	(170)
9.2 MATLAB 程序设计入门	(173)
9.2.1 运算符和操作符	(173)
9.2.2 M 文件简介	(175)
9.2.3 流程控制语句	(176)
9.3 MATLAB 在数值计算方法中的应用	(179)
9.3.1 线性方程组的直接解	(179)
9.3.2 线性方程组的迭代解	(182)
9.3.3 非线性方程的近似解	(183)
9.3.4 插值问题	(187)
9.3.5 最小二乘法的曲线拟合	(192)

9.3.6 数值积分	(193)
9.3.7 求解常微分方程的初值问题	(196)
本章小结	(198)
习题	(198)
第 10 章 工程数值计算方法实验指导	(200)
实验一 线性方程组的直接解——列主元消去法解线性方程组	(200)
实验二 线性方程组的迭代解——雅克比迭代法、高斯—赛德尔迭代法解线性 方程组	(203)
实验三 非线性方程的近似解——二分法、牛顿法求非线性方程的根	(206)
实验四 插值问题——拉格朗日插值与牛顿插值	(209)
实验五 曲线拟合问题——最小二乘法	(212)
实验六 数值积分——复化辛甫生公式	(214)
实验七 求解常微分方程的初值问题——改进欧拉方法与四阶龙格—库塔方法	(216)
部分习题参考答案	(219)
参考文献	(245)

第 1 章 引 论

1.1 工程数值计算的对象特点和意义

在科学研究和工程技术中,经常会遇到数学模型的求解问题。然而在许多情况下,要获得模型问题的精确解往往是十分困难的,甚至是不可能的。因此,研究各种数学问题的近似解法是非常必要的。

数值计算是数学中关于计算的一门学科,它研究如何借助计算工具求得数学问题的数值解答,即从给出一组原始数值(如模型中的某些参数)出发,按照确定的运算规则进行有限步运算,最终获得数学问题的满足精度要求的数值形式近似解。函数的计算、方程的求根都是数值计算的典型例子。

工程数值计算主要研究能用于解决工程实际问题,适合于在计算机上使用的理论可靠、计算复杂性好的数值计算方法。它提供的算法(包括计算公式、整个计算方案、计算过程)具有以下特点:

(1) 面向计算机。要根据计算机的特点提供实际可行的算法,即算法只能由计算机可执行的加减乘除四则运算和各种逻辑运算组成,调用计算机的内部函数。

(2) 要有可靠的理论分析。数值计算中的算法理论主要是连续系统的离散化及离散型方程数值求解,需要进行必要的理论分析,例如误差分析、数值稳定性分析、收敛性分析等。这些概念刻画了计算方法的可靠性、准确性、使用的方便性,以确保所得数据结果在理论上能任意逼近准确值,在实际计算时获得精度要求的近似值。

(3) 要有良好的复杂性及数值试验。计算复杂性是算法好坏的标志,它包括时间复杂性(指计算时间多少)和空间复杂性(指占用存储单元多少)。对很多数值问题使用不同算法,其计算复杂性将会大不一样,例如对 20 阶的线性方程组若用代数中的克莱姆法则求解,其乘除法运算次数需要 9.7×10^{20} 次,若用每秒运算 1 亿次的计算机计算也要 30 万年。而用数值计算方法中介绍的高斯(Gauss)消去法求解,其乘除法运算次数只需 3060 次,这说明了选择算法的重要性。

因此,工程数值计算方法既要重视与方法相关的理论,又要重视方法的应用,内容相当丰富,不能片面地将其理解为各种数值方法的简单罗列或标准程序的介绍。读者在学习中必须注意理解方法的设计原理与处理问题的技巧,重视有关的基本概念和理论,重视误差分析与收敛性、数值稳定性的讨论,认真完成一定量的理论分析题与计算机程序实习题,注重利用计算机进行科学计算能力的培养。

1.2 误差分析

1.2.1 误差分析的重要性

在数值计算工程中, 往往会出现各种各样的误差, 它们会直接影响到计算的结果。例如, 某个参数由于观测引起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并不大。但是, 这些误差经过计算机的千百万次运算之后, 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, 甚至会得到完全错误的结果。

用数值方法解决科学研究或工程技术中的实际问题, 产生的误差是不可避免的, 几乎不存在绝对的严格和精确性。但是我们可以尽可能认识误差并控制误差, 使之局限在最小(或尽量小)的范围内, 以满足工程计算精度。

1.2.2 误差来源及误差分类

误差是描述数值计算中近似值的精确程度的一个基本概念, 在数值计算中具有十分重要的地位。误差按来源可以分为模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差。

1) 模型误差

用数学方法解决一个具体的实际问题, 首先要建立数学模型, 这就要对实际问题进行抽象、简化, 因而数学模型本身总含有误差, 这种误差叫做模型误差。

2) 观测误差

在数学模型中往往包含一些由观测或实验得来的物理量, 如电阻、电压、温度、长度等, 由于测量工具的精度和测量手段的限制, 它们与实际量大小之间必然存在误差, 这种误差称为观测误差。

3) 截断误差

当数学模型不能得到精确解时, 通常要采用数值方法求它的近似解, 近似解与精确解之间的误差就称为截断误差或方法误差。

例如, $e^{\frac{1}{2}} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2!} \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{1}{2}\right)^3 + \cdots + \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2}\right)^n + \cdots$, 用有限项 $1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2!} \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \cdots + \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2}\right)^n$ 近似替代 $e^{\frac{1}{2}}$ 时, 截去的 $\frac{1}{(n+1)!} \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^{n+1} + \cdots$ 就是截断误差。

4) 舍入误差

由于计算机只能对有限位数进行运算, 因此在运算中需进行合理的取舍, 如 e 、 $\sqrt{2}$ 等都要按舍入原则保留有限位数, 这时产生的误差称为舍入误差。如在 10 位十进制数的限制下, 会出现

$$\begin{aligned} 1 \div 3 &= 0.333\ 333\ 333\ 3 \\ (1.000\ 002)^2 - 1.000\ 004 &= 0 \end{aligned}$$

这两个结果都是不准确的, 后者的准确结果应为 4×10^{-12} , 所产生的误差就是舍入误差。

在数值计算中, 我们假定数学模型是准确的, 因而不考虑模型误差和观测误差, 重点

研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响。

1.2.3 绝对误差、相对误差及有效数字

1. 绝对误差

设一实数 x ，它的近似值为 x^* ， $x^* - x$ 反映了近似值和精确值差异的大小，因此称

$$\epsilon(x) = x^* - x \quad (1-1)$$

为近似数 x^* 的绝对误差。由于精确值往往是无法知道的，因此近似数的绝对误差也无法得到，但是却能估计出 $\epsilon(x)$ 的绝对值的一个上限。如果存在一个正数 η ，使得

$$|\epsilon(x)| \leq \eta \quad (1-2)$$

则称 η 为 x^* 的绝对误差限。此时

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

通常记为 $x^* = x \pm \eta$ 。

2. 相对误差

绝对误差通常不能完全反映近似数的精确程度，它还依赖于此数本身的大小，因此有必要引进相对误差的概念。近似数 x^* 的相对误差定义为

$$\epsilon_r(x) = \frac{\epsilon(x)}{x} = \frac{x^* - x}{x} \quad (1-3)$$

由于 x 未知，实际使用时总将 x^* 的相对误差取为

$$\epsilon_r(x) = \frac{\epsilon(x)}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*} \quad (1-4)$$

如果存在一个正数 σ ，使得

$$|\epsilon_r(x)| \leq \sigma \quad (1-5)$$

则称 σ 为 x^* 的相对误差限。

根据上述定义可知，当 $|x^* - x| \leq 1 \text{ cm}$ 时，测量 10 m 物体时的相对误差为

$$|\epsilon_r(x)| \leq \frac{1}{1000} = 0.1\%$$

而测量 100 m 物体时的相对误差为

$$|\epsilon_r(x)| \leq \frac{1}{10\,000} = 0.01\%$$

可见后者的测量结果要比前者精确。所以，在分析误差时，相对误差更能刻画数值的精确性。

例 1-1 已知 $x = 14.016\,25\cdots$ 的近似数为 $x^* = 14.01$ ，求其绝对误差和相对误差。

解 绝对误差为

$$E(x) = x^* - x = -0.006\,25\cdots \approx -0.006$$

相对误差为

$$E_r(x) = \frac{x^* - x}{x} \approx -0.0004$$

例 1-2 设 $x^* = 4.32$ 是由精确值 x 经过四舍五入得到的近似值，求 x^* 的绝对误差限和相对误差限。

解 由 x^* 是由精确值 x 经过四舍五入得到的近似值，故有

$$4.315 \leq x < 4.325$$

$$-0.005 \leq x - x^* < 0.005$$

因此, 绝对误差限为 $\eta = 0.005$, 相对误差限为 $\sigma = 0.005 \div 4.32 \approx 0.12\%$ 。

3. 有效数字

为了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, 于是需要引进有效数字的概念。在实际计算中, 当准确值 x 有很多位数时, 我们通常按四舍五入得到 x 的近似值 x^* 。例如无理数 $\pi = 3.141\,592\,653\,589\,7\cdots$, 按四舍五入原则分别取 2 位和 4 位小数时, 则得

$$\pi \approx 3.14, \pi \approx 3.1416$$

不管取几位得到的近似数, 其绝对误差不会超过末位数的半个单位, 即

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

此时, 称 3.14 的有效数字为 3 位, 3.1416 的有效数字为 5 位。

定义 1.1 设数 x^* 是数 x 的近似值, 如果 x^* 的绝对误差限是它的某一位的半个单位, 并且从 x^* 左起第一个非零数字到该数位共有 n 位, 则称这 n 个数字为 x^* 的有效数字, 也称用 x^* 近似 x 时具有 n 位有效数字。

例 1-3 将 $22/7$ 作为 π 的近似值, 它有几位有效数字? 绝对误差限和相对误差限各为多少?

解

$$\frac{22}{7} = 3.1428\cdots, \pi = 3.1415\cdots$$

由于

$$\left| \frac{22}{7} - \pi \right| \approx 0.0013 < \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

所以由定义 1.1 知, $\frac{22}{7}$ 作为 π 的近似值有 3 位有效数字。

绝对误差限为

$$E = 3.1428 - 3.1415 = 0.0013$$

相对误差限为

$$E_r = \frac{E}{\pi} = \frac{0.0013}{3.1415} = 0.000\,41$$

一般地, 实数 x 经过四舍五入后得到的近似值 x^* 可写为如下标准形式:

$$x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m \quad (1-6)$$

所以, 当其绝对误差限满足

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \quad (1-7)$$

时, 则称近似值 x^* 具有 n 位有效数字, 其中 m 为整数, a_1 是 1~9 中的某个数字, $a_2, \cdots, a_n$ 是 0~9 中的数字。

根据上述有效数字的定义, 不难验证 π 的近似值 3.1416 有 5 位有效数字。事实上 $3.1416 = 0.314\,16 \times 10^1$, 由于

$$|\pi - 3.1416| = |3.141\,592\,653\,5\cdots - 3.1416| = 0.000\,007\,346\,5 < \frac{1}{2} \times 10^{1-5}$$

这里 $m=1, n=5$, 所以它具有 5 位有效数字。

4. 有效数字与绝对误差、相对误差之间的关系

定理 1.1 若有 $x^* = \pm 10^m(a_1 \times 10^{-1} + a_2 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n})$ 表示近似数 x^* , 如果它具有 n 位有效数字, 则其相对误差限为

$$|e_r(x^*)| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} \quad (1-8)$$

反之, 若 x^* 的相对误差限满足

$$|e_r(x^*)| \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)} \quad (1-9)$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字。

证明 因为

$x^* = \pm 10^m(a_1 \times 10^{-1} + a_2 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n})$, $a_1 \times 10^{m-1} \leq |x^*| \leq (a_1 + 1) \times 10^{m-1}$
所以

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

反之

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

从而, x^* 具有 n 位有效数字。

例 1-4 为使 $\sqrt{26}$ 的近似值的相对误差小于 0.1%, 则至少应取几位有效数字?

解 由于 $\sqrt{25} < \sqrt{26} < \sqrt{36}$, 所以 $\sqrt{26}$ 的首位非零数字是 $a_1 = 5$, 根据定理 1.1 有

$$|\epsilon_r(x)| \leq \frac{1}{2 \times 5} \times 10^{-(n-1)} < 0.1\%$$

解之得 $n > 3$, 故取 $n = 4$ 即可满足要求。也就是说, 只要 $\sqrt{26}$ 的近似值具有 4 位有效数字, 就能保证 $\sqrt{26} \approx 5.099$ 的相对误差小于 0.1%。

5. 误差传播

数值计算中误差产生与传播情况非常复杂。由于参与运算的数据往往都是些近似数且带有误差, 而这些误差在多次运算中又会进行传播, 导致计算结果产生一定的误差。

下面针对函数 $y = f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 由自变量 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 小的波动, 而导致因变量 y 的变化作误差估计。我们这里假定该函数是可微分的。令 $(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 为准确值, 近似值为 $(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$, 那么函数 y 的绝对误差可表示为

$$\begin{aligned} e(y^*) &= y - y^* = f(x_1, x_2, \cdots, x_n) - f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*) \\ &\approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_i^*} \cdot (x_i - x_i^*) \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot E(x_i^*) \end{aligned} \quad (1-10)$$

y 的相对误差为

$$\begin{aligned} e_r(y^*) &= \frac{e(y^*)}{y^*} \approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot E(x_i^*) \cdot \frac{1}{y^*} \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \frac{x_i^*}{x_i^*} \cdot \frac{E(x_i^*)}{y^*} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \frac{x_i^*}{y^*} \cdot E_r(x_i^*) \end{aligned} \quad (1-11)$$

例 1-5 已测得某长方形场地长 a 的值为 $a^* = 110$ m, 宽 d 的值 $d^* = 80$ m, 若已知 $|a - a^*| \leq 0.2$ m, $|d - d^*| \leq 0.1$ m, 试求其面积的绝对误差限与相对误差限。

解 $S = ad$, 由式(1-10)知

$$\Delta s = \left. \frac{\partial s}{\partial a} \right|_{a=a^*, d=d^*} (a - a^*) + \left. \frac{\partial s}{\partial d} \right|_{a=a^*, d=d^*} (d - d^*)$$

$$|\Delta s| \leq |d^*| |a - a^*| + |a^*| |d - d^*|$$

故 $|\Delta s| \leq 80 \times 0.2 + 110 \times 0.1 = 27$ m², 而相对误差限为

$$\left| \frac{\Delta s}{s^*} \right| \leq \frac{|a - a^*|}{|a^*|} + \frac{|d - d^*|}{|d^*|} \leq 0.31\%$$

1.3 算法特性及 N-S 流程图

1.3.1 算法特性

广义地说, 为解决一个问题而采取的方法和步骤, 称为“算法”。例如, 描述太极拳动作的图解, 就是“太极拳的算法”。一首歌曲的乐谱, 也可以称为该歌曲的算法, 因为它指定了演奏该歌曲的每一个步骤, 按照它的规定就能演奏出预定的曲子。

一个算法具有以下特点:

1) 有穷性

一个算法应包含有限的操作步骤, 而不能是无限的。事实上, “有穷性”往往指在合理的范围之内。如果让计算机执行一个历时 1000 年才结束的算法, 这虽然是有穷的, 但超过了合理的限度, 人们也不把它视作有效算法。究竟什么算“合理限度”, 并无严格标准, 由人们的常识和需要而定。

2) 确定性

算法中的每一个步骤都应当是确定的, 而不应当是含糊的、模棱两可的。例如, 一个健身操的动作要领中的一个动作“手举过头顶”, 这个步骤就是不确定的、含糊的。是双手都举过头, 还是左手或右手? 不同的人可以有不同的理解。算法中的每一个步骤应当不致被解释成不同的含义, 而应是十分明确无误的。也就是说, 算法的含义应当是唯一的, 而不应当产生“歧义性”。所谓“歧义性”, 是指可以被理解为两种(或多种)的可能含义。

3) 有零个或多个输入

所谓输入, 是指在执行算法时需要从外界取得必要的信息。例如, 求两个整数 m 和 n 的最大公约数, 则需要输入 m 和 n 的值。一个算法也可以没有输入, 例如求 $5!$, 在执行算法时则不需要输入任何信息。

4) 有一个或多个输出

算法的目的是为了求解, “解”就是输出。没有输出的算法是没有意义的。

5) 有效性

算法中的每一个步骤都应当能有效地执行，并得到确定的结果。例如，计算 A/B ，如果 $B=0$ ，则执行 A/B 是无法有效执行的。

1.3.2 N-S 流程图表示

1973 年，美国学者 I. Nassi 和 B. Shneiderman 提出了一种新的流程图形式，即将全部算法写在一个矩形框内，在该框内还可以包含其它的从属于它的框，或者说，由一些基本的框组成一个大的框。这种流程图又称 N-S 结构化流程图(N 和 S 是两位美国学者的英文姓名的第一个字母)。这种流程图适于结构化程序设计，因而很受欢迎。

N-S 流程图有以下流程图符号：

1) 顺序结构

顺序结构用图 1-1 的形式表示。A 和 B 两个框组成一个顺序结构。

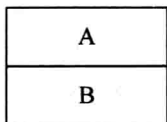
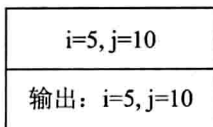


图 1-1 顺序结构流程图

例如，



表示先给 i 和 j 赋值， $i=5, j=10$ ；再输出 i 和 j 的值。

2) 选择结构

选择结构用图 1-2 的形式表示。当 P 成立时执行 A 操作， P 不成立则执行 B 操作。

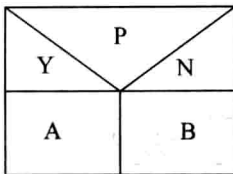
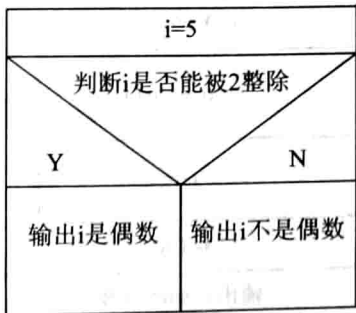


图 1-2 选择结构流程图

例如，



表示首先给变量 i 赋值: $i=5$; 判断 i 能否被 2 整除, 如果能被 2 整除, 则输出 i 是偶数, 否则输出 i 不是偶数; 最后输出为: i 不是偶数。

3) 当型循环结构

当型循环结构用图 1-3 的形式表示。当 P 成立时反复执行 A 操作, 直到 P 条件不成立。

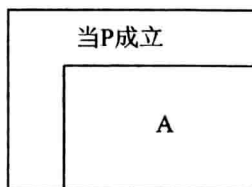
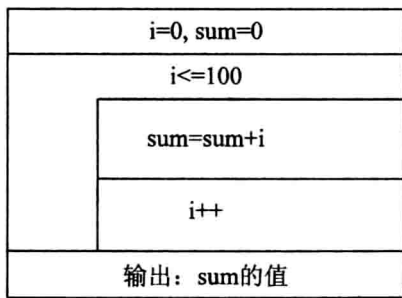


图 1-3 当型循环结构流程图

例如,



表示首先给 i 和 sum 赋值: $i=0, sum=0$; 当 $i \leq 100$ 时, 反复执行 $sum=sum+i$ 与 $i++$, 直到 $i \leq 100$ 不成立; 最后输出 sum 的值。

4) 直到型循环结构

直到型循环结构用图 1-4 的形式表示。执行 A , 再判断 P 是否成立; 反复执行 A , 并判断 P 是否成立, 若 P 成立则跳出循环, 执行下面的语句。

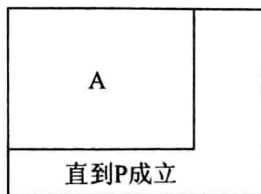


图 1-4 直到型循环结构流程图

例如,

