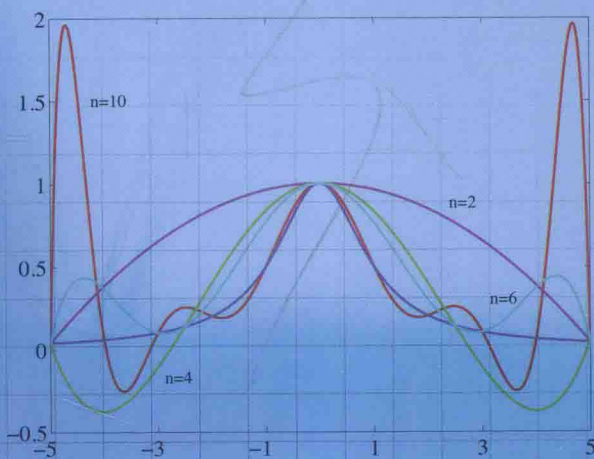


数值计算方法

主 编 褚衍东 常迎香 张建刚



科学出版社

数值计算方法

主 编 褚衍东 常迎香 张建刚

副主编 陈京荣 安新磊 周 伟 李险峰

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是根据理工科“数值计算方法课程教学基本要求”编写的,书中介绍了数值计算方法的基本概念、方法和理论,通过实例分析,提高学生解决实际问题的能力,作者以 MATLAB 为平台编写了相应算法的程序.其主要内容包括:数值计算的一般概念、非线性方程的数值解法、方程组的数值解法、插值法与曲线拟合、数值积分与数值微分、常微分方程的数值解法、矩阵特征值与特征向量的计算、无约束最优化方法、Matlab 简介等.

本书可作为普通高校理工科本科和工科硕士研究生各专业“数值计算方法”或“数值分析”教材,也可供从事科学与工程计算的科技工作者和研究人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/褚衍东,常迎香,张建刚主编. —北京:科学出版社,2016.6
ISBN 978-7-03-048475-8

I. ①数… II. ①褚… ②常… ③张… III. ①数值计算-计算方法
IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016) 第 121667 号

责任编辑:胡海霞/责任校对:张凤琴
责任印制:白洋/封面设计:迷底书装

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>

保定市中华美凯印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2016 年 6 月第 一 版 开本:720×1000 1/16

2016 年 6 月第一次印刷 印张:19 3/4

字数:398 100

定价:42.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前 言

数值计算方法是一门古老的数学分支,过去受计算工具的限制,发展缓慢.传统的教学内容有些单调,多是从数学上演绎算法,并从理论上分析算法的收敛性、稳定性等;教学方式上由于受上机条件的限制,缺乏必要的数值实验教学,只能进行课堂上的理论教学,长时间内,这一课程无法在工科学生中普及.近年来,随着计算机技术水平的迅速提高和计算机应用的日益普及,大大促进了这门学科的发展与应用,作为介绍科学计算的基础理论与基本方法的课程,数值计算方法已成为理工科院校许多专业本科生和研究生的专业基础课.面向 21 世纪教学内容、教学方法的改革研究,又加速了数值计算方法教学内容、教学方法的改革.

近年来,编者参加了部、校两级的非计算机专业计算机系列课程教学内容、教学方法与课程体系的改革研究与实践和工科数学系列课程教学内容、教学方法与课程体系的改革研究与实践,深深体会到数值计算方法不仅是数学系列课程的重要组成部分,也是计算机系列课程的有机成分,它应成为程序设计课程的补充与发展.换言之,数值计算方法要重视算法的计算机实现,要从程序设计的角度去描述算法,要加强数值实验教学,使学生通过数值实验加深对算法的理解,提高科学计算的能力.对于工科的数值计算方法课程宜以构造算法、描述算法、应用算法为主,而以分析算法(算法的收敛性和稳定性论述)为辅.

编者基于以上认识,在总结了多年从事工科数学教学,特别是数值计算方法教学体会的基础上,根据国家教委颁布的理工科数值计算方法的教学基本要求,编写了本书.本书具有如下特点:

- (1) 着力阐述构造算法的思想与过程及误差估计,叙述上力求直观、通俗易懂.
- (2) 注重算法描述,对各章中的主要算法,按在计算机上实现算法的过程予以描述,描述方法采用程序设计课程中流行的 N-S 流程图,以利于学生进行结构化程序设计.
- (3) 编写了书中所有算法的 Matlab 程序,突出强调数值算法的设计和编程实现技能,力图做到易教、易学,培养学生运用所学知识分析问题和解决问题的能力.
- (4) 加强数值实验,每章都设计了有针对性、综合性的上机题目,对数值实验提出明确要求,试图使学生通过对不同算法下计算结果的对比,或不同参数下计算结果的变化,加深对各种方法特性的理解.
- (5) 增加了应用举例,每章选讲两个结合专业的应用案例,从实际问题的背景、建立数学模型、选用数值方法求解和分析计算结果等方面进行综合性论述,利于培

养学生解决工程实际问题的能力.

本书的编写分工如下: 第 1 章、第 5 章由安新磊编写, 第 2~4 章由张建刚编写, 第 6 章由褚衍东和常迎香编写, 第 7 章由周伟编写, 第 8 章由陈京荣编写, 附录由李险峰编写. 全书由褚衍东、常迎香教授和张建刚副教授负责框架拟定和统稿.

限于编者水平, 书中疏漏之处在所难免, 敬请同行专家与读者不吝赐教.

编 者

2015 年 10 月

目 录

前言

第 1 章 数值计算的一般概念	1
1.1 误差的基本知识.....	2
1.2 减少误差的措施及算法稳定性.....	7
小结.....	14
思考题.....	15
习题 1.....	15
数值实验 1.....	16
第 2 章 非线性方程的数值解法	18
2.1 二分法.....	18
2.2 简单迭代法.....	21
2.3 收敛阶和加速法.....	28
2.4 Newton 法与割线法.....	35
2.5 应用举例.....	43
小结.....	45
思考题.....	45
习题 2.....	46
数值实验 2.....	47
第 3 章 方程组的数值解法	48
3.1 Gauss 消去法.....	49
3.2 选主元 Gauss 消去法.....	53
3.3 矩阵的三角分解法.....	60
3.4 追赶法.....	67
3.5 平方根法.....	72
3.6 范数与误差估计.....	77
3.7 迭代法.....	82
3.8 非线性方程组的数值解法.....	96
3.9 应用举例.....	110
小结.....	117
思考题.....	118

习题 3	119
数值实验 3	121
第 4 章 插值法与曲线拟合	124
4.1 插值问题及代数插值的基本概念	124
4.2 Lagrange 插值法	125
4.3 Newton 插值法	130
4.4 Hermite 插值法	140
4.5 分段低次插值法	144
4.6 三次样条插值法	146
4.7 曲线拟合法	153
4.8 多元线性最小二乘法	163
4.9 多重多元线性最小二乘法	163
4.10 应用举例	165
小结	168
思考题	169
习题 4	169
数值实验 4	170
第 5 章 数值积分与数值微分	172
5.1 插值型求积公式	172
5.2 Newton-Cotes 求积公式	173
5.3 复化求积法	177
5.4 Romberg 求积方法	181
5.5 Gauss 型求积公式	186
5.6 二重积分的数值解法	190
5.7 数值微分	196
5.8 应用举例	200
小结	204
思考题	205
习题 5	206
数值实验 5	207
第 6 章 常微分方程的数值解法	208
6.1 Euler 法	208
6.2 Runge-Kutta 方法	214
6.3 线性多步法	220
6.4 数值解法的收敛性及稳定性	227

6.5	微分方程组及高阶微分方程的数值解法	231
6.6	常微分方程边值问题的数值解法	234
6.7	应用举例	239
	小结	243
	思考题	243
	习题 6	244
	数值实验 6	245
第 7 章	矩阵特征值与特征向量的计算	246
7.1	幂法与反幂法	246
7.2	Jacobi 法	256
7.3	QR 方法	262
7.4	应用举例	266
	小结	269
	思考题	270
	习题 7	270
	数值实验 7	271
第 8 章	无约束最优化方法	273
8.1	无约束问题的极值条件	273
8.2	一维搜索	274
8.3	几种下降算法介绍	281
8.4	共轭梯度法	286
8.5	应用举例	290
	小结	292
	思考题	293
	习题 8	293
	数值实验 8	294
附录	Matlab 简介	295
A.1	基本运算	295
A.2	M 文件与 M 函数	297
A.3	程序结构	298
A.4	基本绘图方法	301
A.5	数值计算中的常用函数	305

可见构造算法的重要性!

有了稳定、可靠、效率高的数值计算方法以后,关键在于组织算法并在计算机上实现,希望读者重视算法描述的学习与数值实验.本书各章中对一些重要的、典型的算法都配以算法流程图,算法流程的描述采用程序设计课程中普遍应用的 N-S 流程图,以利于编写结构化程序.通过算法描述和数值实验,学生可以体会到从选择或构造算法、组织实现算法、编写程序、上机调试及运行、分析解释计算结果的全过程,只有通过这样全面的训练,才能达到学习数值计算方法课程的目的——提高应用计算机解决实际问题的能力.

1.1 误差的基本知识

1.1.1 误差的来源及分类

运用电子计算机进行数值计算来解决一个实际问题,所得到的数值解往往不可避免地要产生误差.误差可能来自多方面,这些误差可以概括地分为如下四类.

(1) 模型误差 在把实际问题转化成数学模型过程中,通常要略去某些次要的因素,进行合理的化简,由此所产生的误差称为模型误差.

(2) 观测误差 在数学模型中,表达式中的各类参量或定解条件中的数往往需要通过观测得到.由于观测仪器精度的限制,以及观测者观测能力的差别,观测值难免带有误差,这类误差称为观测误差(或参量误差).

(3) 截断误差 许多理论上的精确值往往需要用无限过程才能求得,而计算机只能完成有限次运算.如计算超越函数值,常用泰勒级数的前 n 项和来近似计算,这时所舍去的级数的余项,称为“截断误差”.由表达式

$$\sin x = x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \cdots + (-1)^{n-1} \frac{1}{(2n-1)!}x^{2n-1} + \cdots,$$

取部分和

$$p_n(x) = x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \cdots + (-1)^{n-1} \frac{1}{(2n-1)!}x^{2n-1}$$

作为 $\sin x$ 的近似值.则截断误差 $E_n(x) = \sin x - P_n(x)$,其拉格朗日型余项的表达式为

$$E_n(x) = \frac{(-1)^n \cos \theta x}{(2n+1)!} x^{2n+1}, \quad 0 < \theta < 1.$$

(4) 舍入误差 由于电子计算机的字长总是有限的,所以对参与计算的数据和最后得到的计算结果,都必然是用有限位小数代替无穷位小数,这样所产生的误差称为“舍入误差”.实际上,数值计算中的每一步都不可避免受舍入误差的影响.舍

入误差单从一次计算来看, 对结果的影响也许不大, 但当进行大量计算时, 这些误差经过叠加和传递, 对计算结果就可能产生较大的影响.

以上四种误差都将影响计算结果的准确性, 但模型误差和观测误差是计算工作者难以单独解决的问题. 在数值计算方法的研究中, 为了探求简便且计算精度高的方法, 就需要研究误差, 特别要研究截断误差与舍入误差, 以便能更有效地控制误差.

1.1.2 误差的基本概念

1. 绝对误差与绝对误差限

定义 1.1 设 x^* 是精确值 x 的一个近似值, 则称 $x - x^*$ 为近似值 x^* 的绝对误差, 记为 e 或 $e(x)$.

通常我们不知道精确值 x , 因而 e 常常是未知的, 但可根据实际情况给出 $|e|$ 的一个上界 ε , 即满足

$$|e| = |x - x^*| \leq \varepsilon,$$

称 ε 为近似值 x^* 的绝对误差限, 简称误差限. 显然精确值 x 满足

$$x^* - \varepsilon \leq x \leq x^* + \varepsilon.$$

在工程技术上, 常用 $x = x^* \pm \varepsilon$ 表示近似值的精度或精确值的范围.

2. 相对误差与相对误差限

评价一个近似值的精确度, 除了要看其绝对误差的大小, 还要看这个值本身的大小, 为此引入相对误差的概念.

定义 1.2 称绝对误差与精确值之比

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

为近似值 x^* 的相对误差, 记为 e_r 或 $e_r(x)$.

由于精确值 x 是未知的, 所以在实际计算中常采用

$$e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*}. \quad (1.1)$$

当 $|e_r| \ll 1$ 时,

$$\left| \frac{e}{x^*} - \frac{e}{x} \right| = \frac{|e|^2}{|x^* \cdot x|} = \frac{|e|^2/|x^*|^2}{|x^* + e|/|x^*|} = \frac{|e/x^*|^2}{|1 + e/x^*|} = \frac{|e_r|^2}{|1 + e_r|}$$

是关于 e_r 的高阶无穷小, 可以忽略不计.

若 ε 是 x^* 对 x 的绝对误差限, 则 $\varepsilon_r = \varepsilon/|x^*|$ 为 x^* 对 x 的一个相对误差限.

例 1.1 国际大地测量学会建议光速采用

$$c = 299792458 \pm 1.2(\text{m} / \text{s}),$$

其含义为绝对误差限 $\varepsilon = 1.2\text{m} / \text{s}$, 从而其相对误差限为

$$\frac{\varepsilon}{|c^*|} = \frac{1.2}{299792458} \leq 0.41 \times 10^{-9}.$$

x^* 对 x 的绝对误差、绝对误差限有与 x^* 相同的量纲, 而 x^* 对 x 的相对误差、相对误差限是无量纲的, 工程应用中常以百分数来表示.

3. 有效数字

表示一个数的近似值时, 常用到有效数字的概念. 对无穷小数, 可以采用四舍五入的办法来取近似值. 例如, $\pi = 3.14159265 \dots$, 若按四舍五入取四位小数, 则得 $\pi^* = 3.1416$. 且

$$|\pi - \pi^*| = 0.073 \dots \times 10^{-4} < 0.5 \times 10^{-4}.$$

上式说明 π^* 的误差限不超过其末位数的半个单位.

定义 1.3 设 x 的近似值

$$x^* = \pm 0.a_1 a_2 \dots a_n \times 10^m, \quad a_1 \neq 0. \quad (1.2)$$

如果 $|x - x^*| \leq 0.5 \times 10^{m-n}$, 那么称 x^* 作为 x 的近似值具有 n 位有效数字.

例 1.2 写出下列各数具有 5 位有效数字的近似值.

$$123.456, \quad 0.00654321, \quad 5.000024, \quad 5.000024 \times 10^3.$$

解 据定义 1.3, 以上各数具有 5 位有效数字的近似值分别是

$$123.46, \quad 0.0065432, \quad 5.0000, \quad 5.0000 \times 10^3.$$

由定义 1.3, 以下三种有效数字的写法值得注意, 不可混淆:

(1) 数 23 与 0.023 都具有两位有效数字, 在实际应用中, 一个读数的有效位数与所用单位无关.

(2) 数 0.23 与 0.2300 是有区别的, 前者具有两位有效数字, 而后者却有四位有效数字; 同理 9000 与 9×10^3 的有效位数也是不同的.

(3) 有效数字与绝对误差这两个概念之间有着密切的联系, 主要结论见如下定理.

定理 1.1 若 x^* 具有式 (1.2) 的形式, 具有 n 位有效数字, 则相对误差限满足:

$$e_r \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}.$$

证 据定义 1.3 知, 当 x^* 具有 n 位有效数字时, 有

$$|x^*| \geq 0.a_1 \times 10^m = a_1 \times 10^{m-1},$$

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

故由式 (1.1) 知, 其相对误差

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

故相对误差限为

$$\varepsilon_r = \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}.$$

定理 1.2 若 x^* 具有式 (1.2) 的形式, 且相对误差满足

$$e_r \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{1-n},$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证 由式 (1.2) 及式 (1.1) 知

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

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

据定义 1.3 知, x^* 具有 n 位有效数字.

例 1.3 要使 $\sqrt{2}$ 的近似值 I^* 的相对误差小于 1%, 问至少需取几位有效数字.

解 由于 $\sqrt{2} = 1.414 \cdots = 0.1414 \cdots \times 10^1$, 所以 $a_1 = 1$, 由定理 1.2 的结论知

$$\frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-n+1} < 1\%,$$

故至少取 $n = 3$.

1.1.3 误差的传播与估计

实际的数值计算中,参与运算的数据往往都是些近似值,带有误差,而在每一步运算中都会产生舍入误差或截断误差,这些误差在运算过程中会进行传播,影响计算结果.以下应用 Taylor 公式对计算误差作定量估计,研究误差在计算过程中是如何传播的,以便更好地控制误差.

以二元函数 $y = f(x_1, x_2)$ 为例,设 x_1^* 和 x_2^* 分别是 x_1 和 x_2 的近似值, y^* 是函数值 y 的近似值.函数 $f(x_1, x_2)$ 在点 (x_1^*, x_2^*) 处的 Taylor 展开式为

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) = & f(x_1^*, x_2^*) + \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^* (x_1 - x_1^*) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^* (x_2 - x_2^*) \right] \\ & + \frac{1}{2!} \left[\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} \right)^* (x_1 - x_1^*)^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} \right)^* (x_1 - x_1^*)(x_2 - x_2^*) \right. \\ & \left. + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \right)^* (x_2 - x_2^*)^2 \right] + R_2. \end{aligned}$$

式中 $(x_1 - x_1^*) = e(x_1)$, $(x_2 - x_2^*) = e(x_2)$, 一般都是小量值,如果忽略它们的高阶无穷小量,则上式简化为

$$f(x_1, x_2) \approx f(x_1^*, x_2^*) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^* e(x_1) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^* e(x_2).$$

因此, y^* 的绝对误差为

$$e(y) = y - y^* = f(x_1, x_2) - f(x_1^*, x_2^*) \approx \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^* e(x_1) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^* e(x_2), \quad (1.3)$$

式中 $e(x_1)$, $e(x_2)$ 前面的系数 $\left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^*$, $\left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^*$ 分别是一阶偏导数在 (x_1^*, x_2^*) 处的值,称为 x_1^* , x_2^* 对 y^* 的绝对误差的增长因子,分别表示绝对误差 $e(x_1)$, $e(x_2)$ 经过传播后增大或缩小的倍数.

进一步求 y^* 的相对误差

$$\begin{aligned} e_r(y) = \frac{e(y)}{y^*} & \approx \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^* \frac{e(x_1)}{y^*} + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^* \frac{e(x_2)}{y^*} \\ & = \frac{x_1^*}{y^*} \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^* e_r(x_1) + \frac{x_2^*}{y^*} \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^* e_r(x_2), \end{aligned} \quad (1.4)$$

式中 $\frac{x_1^*}{y^*} \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^*$, $\frac{x_2^*}{y^*} \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^*$ 分别是 x_1^* , x_2^* 对 y^* 的相对误差的增长因子,表示相对误差 $e_r(x_1)$, $e_r(x_2)$ 经过传播后增大或缩小的倍数.

例 1.4 测得某电阻两端的电压和流过的电流分别为 $V = 220 \pm 2$ 伏、 $I = 10 \pm 0.1$ 安, 求电阻的阻值 R^* , 并求 $e(R)$ 及 $e_r(R)$.

解 由 $V^* = 220$ 伏, $I^* = 10$ 安, 得 $R^* = 22$ 欧. 据式 (1.3) 得 R^* 的绝对误差为

$$\begin{aligned} e(R) &\approx \left(\frac{\partial R}{\partial V}\right)^* e(V) + \left(\frac{\partial R}{\partial I}\right)^* e(I) \\ &= \frac{1}{I^*} e(V) - \frac{V^*}{(I^*)^2} e(I) = \frac{1}{10} e(V) - \frac{220}{100} e(I). \end{aligned}$$

由于 $|e(V)| \leq 2$, $|e(I)| \leq 0.1$, 于是

$$|e(R)| \leq \frac{1}{10} \times 2 + \frac{220}{100} \times 0.1 = 0.42(\text{欧}),$$

从而 R^* 的相对误差为

$$|e_r(R)| = \left|\frac{e(R)}{R^*}\right| \leq \frac{0.42}{22} = 1.91\%.$$

1.2 减少误差的措施及算法稳定性

1.2.1 减少运算误差的四项措施

计算机只能对有限位数进行运算, 从而在运算中产生误差是不可避免的. 许多实际问题的求解往往要做成千上万次的数值计算, 为了保证计算结果的可靠性, 必须努力防止误差的产生、传播与扩大.

1. 避免两个相近数相减

两个相近的近似数相减, 将会严重损失结果的有效数字, 如两个具有五位有效数字的数相减, $12.584 - 12.582 = 0.002$, 结果只有一位有效数字.

一般地, 当 x_1^* 与 x_2^* 相减时, 由式 (1.4) 可得 $x_1^* - x_2^*$ 的相对误差为

$$e_r(x_1 - x_2) \approx \frac{x_1^*}{x_1^* - x_2^*} e_r(x_1) - \frac{x_2^*}{x_1^* - x_2^*} e_r(x_2),$$

从而

$$|e_r(x_1 - x_2)| \leq \frac{1}{|x_1^* - x_2^*|} [|x_1^*| \cdot |e_r(x_1)| + |x_2^*| \cdot |e_r(x_2)|].$$

当 $x_1^* \approx x_2^*$ 时, $|e_r(x_1 - x_2)|$ 将会很大, 计算精度很低. 因此, 在计算中应避免相近数的相减, 恒等变形是一种常用的方法.

当 x 为很大的正数时, $\sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}$;

当 $x \ll 1$ 时, $\frac{1 - \cos x}{\sin x} = \frac{\sin x}{1 + \cos x}$.

在无法回避两相近数相减的情况下,可采用双精度计算,以增加有效数字的位数,但这需要占用更多的机器内存.

同理可知,绝对值太小的数作除数以及绝对值太大的数作乘数都会引起误差过大.

2. 防止大数淹没小数现象

当两个绝对值相差很大的数进行加法或减法运算时,绝对值小的数有被“吃掉”的可能,从而影响计算结果的可靠性.

例 1.5 计算 $I = 10^8 + \sum_{n=1}^{10^8} \frac{1}{n}$ 的值.

解 算法一

$$I = \left(\cdots \left(\left((10^8 + 1) + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{3} \right) + \cdots + \frac{1}{10^8} \right).$$

对于 8 位 10 进制浮点运算的计算机而言, $I \approx 10^8$.

事实上,对于 $0 < a \leq 1$,

$$10^8 + a = 0.1 \times 10^9 + 0.00000000a \times 10^9 \approx 0.1 \times 10^9.$$

这是因为计算机运算时,先要“对阶”,把较小的阶码提高到较大的阶码的水平.从而 a 在第 9 位上,计算机实际上采用 0.00000000×10^9 计算.

为了避免出现这种“机器零”,应当采用如下算法.

算法二

$$I = \left[\cdots \left(\left(\frac{1}{10^8} + \frac{1}{10^8 - 1} \right) + \frac{1}{10^8 - 2} \right) + \cdots + 1 \right] + 10^8.$$

这样先从小数加起,就可避免大数“淹没”小数现象.

一般地,合理安排运算次序,便可避免大数“淹没”小数的现象.对于多个数相加,要从其中绝对值最小的数起,到绝对值最大的数依次相加;对于多个数相乘,要从其中有效位数最多的数起,到有效位数最少的数依次相乘.

3. 减少运算次数,简化计算步骤

减少运算次数不仅可以提高解题速度,节约机时,而且可以减少误差产生的机会,减少误差的积累.例如,要计算 x^{255} 的值时,如果对 x 逐个相乘,共需做 254 次乘法.若采用

$$x^{255} = x \cdot x^2 \cdot x^4 \cdot x^8 \cdot x^{16} \cdot x^{32} \cdot x^{64} \cdot x^{128},$$

则只需做 14 次乘法.

4. 选择效率高的算法

算法不同, 其计算的效率也不相同, 选用效率高的算法不仅提高了计算速度, 节约了计算机时, 也会减少舍入误差的积累. 以求 $\ln 2$ 为例来说明计算效率问题, 如果选用

$$\ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \cdots + (-1)^{n-1} \frac{x^n}{n} + \cdots$$

计算 $\ln 2$, 则令 $x = 1$, 并用前 10^5 项, 则

$$\ln 2 \approx 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \cdots - \frac{1}{10^5},$$

产生的截断误差为

$$|R_1| = \left| \frac{(-1)^{10^5}}{10^5 + 1} \left(\frac{1}{1 + \xi} \right)^{10^5 + 1} \right| \leq \frac{1}{10^5 + 1} < 10^{-5}.$$

但如果采用级数

$$\ln \frac{1+x}{1-x} = 2x \left(1 + \frac{1}{3}x^2 + \frac{1}{5}x^4 + \cdots + \frac{1}{2m+1}x^{2m} + \cdots \right), \quad |x| < 1$$

来计算 $\ln 2$, 令 $x = \frac{1}{3}$, 并取前 5 项, 则

$$\ln 2 \approx \frac{2}{3} \left(1 + \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{9} + \frac{1}{5} \cdot \frac{1}{9^2} + \frac{1}{7} \cdot \frac{1}{9^3} + \frac{1}{9} \cdot \frac{1}{9^4} \right),$$

产生的截断误差为

$$R_2 = \frac{2}{3} \sum_{k=5}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \left(\frac{1}{9} \right)^k < \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{11} \frac{\left(\frac{1}{9} \right)^5}{1 - \frac{1}{9}} < 0.12 \times 10^{-5}.$$

可以看出, 后者所产生的截断误差较前者要小.

1.2.2 数值算法的概念

本门课程主要介绍解决各种问题的数值算法, 探索算法的有效描述对于理解、掌握算法及其在计算机上迅速准确地实现算法的重要性. 算法包括解题方法和解题步骤两方面的内容, 一个或一串数学公式未必能构成一个算法, 因为数学公式可以按不同的顺序来计算, 从而计算量与计算结果也不尽相同.

例 1.6 计算 n 次多项式

$$P_n(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n.$$