

■ 高等学校教材

数值计算方法

■ 杨一都 编著



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

0241/164

2008

高等学校教材

数值计算方法

杨一都 编著

高等教育出版社

内容提要

本书是为普通高等学校理工科师生编写的数值计算方法教材,简明易学,富于创新。在突出计算数学的基本思想的同时,注重经典数值方法的共性,特别注意同微积分、线性代数基础知识的衔接。另外,书中还介绍了相关数学问题和数值方法的历史背景、科学意义和几何直观,并结合 MATLAB 软件来组织内容和实践,给出了一些典型算法相对应的函数式 M 文件和算例,以及相关的 MATLAB 库函数,每章还给出了计算实习题。

全书内容共八章,包括数值计算中的误差、插值法与最小二乘法、数值积分与数值微分、方程求根、线性代数方程组数值解法、矩阵特征值与特征向量的计算、常微分方程初值问题数值解法、MATLAB 与数值实验。

本书可作为高等学校理工科各专业本科生数值分析或计算方法课程的教材,也可供科技工作者学习参考。全书讲授 36~54 学时,具备微积分和线性代数知识即可读懂。

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法 / 杨一都编著. —北京:高等教育出版社,
2008.4

ISBN 978 - 7 - 04 - 023354 - 4

I. 数… II. 杨… III. 数值计算 - 计算方法 - 高等学
校 - 教材 IV. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 021349 号

策划编辑 张长虹 责任编辑 崔梅萍 封面设计 王凌波
责任绘图 吴文信 版式设计 范晓红 责任校对 王超
责任印制 毛斯璐

出版发行 高等教育出版社
社 址 北京市西城区德外大街 4 号
邮政编码 100011
总 机 010 - 58581000
经 销 蓝色畅想图书发行有限公司
印 刷 国防工业出版社印刷厂

购书热线 010 - 58581118
免费咨询 800 - 810 - 0598
网 址 <http://www.hep.edu.cn>
<http://www.hep.com.cn>
网上订购 <http://www.landaco.com>
<http://www.landaco.com.cn>
畅想教育 <http://www.widedu.com>

开 本 787 × 960 1/16
印 张 15.25
字 数 270 000

版 次 2008 年 4 月第 1 版
印 次 2008 年 4 月第 1 次印刷
定 价 19.40 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

物料号 23354 - 00

前 言

随着电子计算机的迅猛发展,科学计算已经渗透到科学技术和社会生活的各个领域,已和理论分析,实验科学并列为三大科学方法。科学计算包括一系列计算性的学科分支:计算数学、计算物理、计算化学、计算生物学、计算地质学、计算气象学、计算材料学等,而其中计算数学则是科学计算的理论基础和核心。

计算数学是一门以数学为基础理论,以计算机为工具,研究解决数学问题的方法、程序及相关理论的学科。本书介绍计算数学基础知识。

课程改革一直是数学界关注的课题,普林斯顿大学鄂维南教授最近说:“现有的应用数学课程必须简化。特别是计算数学的课程,真的不是很‘痛快’,太繁琐,我看了都头疼。要使它变得雅致。”他还说,他曾在学生中做过测试,有的人回答不出简单的问题。原因就是学得太“细”了。作者在长期教学实践中深有同感,因此,本书追求简明,选材上强调科学性、思想性和基础性,注意揭示一些经典数值方法的潜在共性,注意结合微积分、线性代数基础知识介绍数值方法及其基本原理,还注意介绍数学问题和数值方法的历史背景、科学意义和几何直观。

美国工程院院士 Moler 教授等开发的 MATLAB 是集数值计算、符号运算及图形处理等强大功能于一体的科学计算平台,培养学生使用 MATLAB 编程解题的能力日愈必要。本书采用伪代码表示算法,使用 MATLAB 作为教学用的计算机语言,在第八章中对 MATLAB 程序设计作了介绍,给出了与第 1 章—第 7 章的一些典型算法相对应的函数式 M 文件和算例,给出了相关的 MATLAB 库函数,并在第 1 章—第 7 章安排了相应的计算实习题。这样做有利于学生提高科学计算能力和加深对数值方法理论的理解。

计算数学基础是每一位科研人员和工程技术人员必备的知识,也是每一位理工科大学生必修的重要课程。本书可作为高等院校理工科各专业本科学生“数值分析”和“科学计算方法”课程的教材或教学参考书,也可供理工科研究生和科技工作者学习参考。全书讲授 36 ~ 54 学时,使用时可根据专业需要和学生已具备的知识决定内容的取舍。学习本书必须具备微积分和线性代数基础

知识。

本书第1章—第7章主要参考文献[1]~[20],第8章主要参考文献[21]~[23],此外§8.4和附录还参考了贵州大学罗贤兵老师的工作,贵州师范大学陈震老师等也为本书提供了许多帮助。作者在贵州大学(1974—1977)和武汉大学(1978—1981)学习期间曾得到李长明教授和雷晋干教授的悉心指导。作者还有幸聆听了石钟慈、林群院士,应隆安、吕涛、陈传森、朱起定、蔡大用教授的演讲。这些都是本书素材的重要源泉。

作者诚挚地感谢高等教育出版社领导和张长虹、崔梅萍编辑,他们为提高本书的质量和出版付出了辛勤的劳动。诚挚地感谢西安交通大学何银年教授、郑州大学石东洋教授对本书的鼓励和宝贵意见。

由于作者水平所限,书中若有疏漏之处,诚望读者指正。

作者

2007年4月

目 录

第一章 数值计算中的误差	1
§1.1 误差来源	1
§1.2 误差 误差限 有效数字	3
§1.3 用微分计算函数值误差	4
§1.4 计算方法的数值稳定性	7
§1.5 秦九韶算法	10
习题一	12
第二章 插值法与最小二乘法	14
§2.1 多项式插值	14
§2.2 Lagrange 插值公式	16
§2.3 插值余项	21
§2.4 Newton 插值公式	23
§2.5 Hermite 插值	29
§2.6 分段插值	32
§2.7 3 次样条函数	36
§2.8 曲线拟合的最小二乘法	40
习题二	47
第三章 数值积分与数值微分	49
§3.1 机械求积公式	50
§3.2 插值型求积公式	52
§3.3 复合求积公式	59
§3.4 Romberg 积分法	62
§3.5 Gauss 求积公式	68

§3.6 数值微分	72
习题三	78
第四章 方程求根	80
§4.1 压缩映射原理与不动点迭代法	80
§4.2 Newton 迭代法	90
§4.3 简化 Newton 迭代法 弦截法 Newton 下山法	93
§4.4 二分法	96
习题四	98
第五章 线性代数方程组数值解法	100
§5.1 迭代法	100
§5.2 向量范数和矩阵范数	107
§5.3 迭代法的收敛性	111
§5.4 Gauss 消去法	117
§5.5 解三对角方程组的追赶法	125
§5.6 矩阵的 LU 分解及应用	126
§5.7 方程组的条件数与误差分析	131
习题五	134
第六章 矩阵特征值与特征向量的计算	137
§6.1 特征值与特征向量	137
§6.2 幂法与反幂法	141
§6.3 Householder 变换	148
§6.4 QR 方法	152
习题六	155
第七章 常微分方程初值问题数值解法	157
§7.1 Euler 法	158
§7.2 改进 Euler 法	164
§7.3 Runge-Kutta 法	165
§7.4 收敛性与稳定性	169

§7.5 常微分方程组初值问题数值解法.....	173
习题七.....	177
第八章 MATLAB 与数值实验.....	179
§8.1 MATLAB 的基本使用方法.....	179
§8.2 MATLAB 绘图功能.....	192
§8.3 MATLAB 程序设计方法.....	194
§8.4 数值实验.....	213
§8.5 一些典型算法的 MATLAB 库函数.....	222
附录 习题答案.....	229
参考文献.....	233

第一章 数值计算中的误差

对误差的研究是计算数学的主要课题. 大多数数值方法给出的答案都仅仅是近似解, 因此了解并估计所引起的误差是重要的. 本章介绍可能产生的各种误差, 介绍有效数字、函数值误差、计算方法的数值稳定性等概念, 以递推法为例指出设计数值稳定性好的计算方法对减少舍入误差影响的重要性. 本章还介绍了一种高效率计算方法——秦九韶算法.

§1.1 误差来源

任何一个在生产活动和科学实践中提出的问题要在计算机上得到解决, 一般都要经过四个步骤. 首先要建立一个能比较真实地反映物理现实的数学模型, 然后根据该数学模型的特点选择合适的计算方法, 然后采用某种计算机语言编制程序, 最后在计算机上计算. 这个过程会产生各种各样的误差, 归结起来主要有以下四种.

1. 模型误差

建立数学模型时, 需对实际问题进行抽象和简化, 忽略一些次要因素, 这样建立的数学模型只是实际问题的一种近似, 它们之间的误差称为模型误差.

例 1.1 物体在重力作用下自由下落, 其下落距离 s 和时间 t 的关系由下列公式描述:

$$s = \frac{1}{2}gt^2, \quad g \approx 9.81 \text{ m/s}^2.$$

这是一个经典的数学模型, 但它忽略了空气阻力这个因素, 从而求出的 s 只是近似的. 它与物体实际下落距离之差就是模型误差.

2. 观测误差

在数学模型中往往有若干常数和参数, 它们多半是观测得来的, 受测量仪器和视力等因素的限制必然有误差, 称这种误差为观测误差. 例如, 例 1.1 中的重力加速度 $g \approx 9.81 \text{ m/s}^2$ 就是观测来的, 它与实际重力加速度之差就是观测误差.

3. 截断误差

计算数学的基本原理是用有限逼近无限, 离散逼近连续, 把无限的计算过程用有限步计算代替, 由此产生的误差称为截断误差或方法误差.

例 1.2 用四则运算计算 $e^{0.5}$.

解 $e^{0.5}$ 是指数函数 e^x 在 $x = 0.5$ 处的值, 用 Taylor 级数法求. e^x 的 Taylor 级数为

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} \quad (|x| < \infty),$$

取 $x = 0.5$ 得

$$e^{0.5} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{0.5^k}{k!}.$$

右端是无穷和, 怎么算? 一个自然的做法是有限代替无限:

$$e^{0.5} \approx \sum_{k=0}^n \frac{0.5^k}{k!}.$$

用这个公式算, 把无限的计算过程用有限步计算代替. 例如取 $n = 3$ 计算得

$$e^{0.5} \approx \sum_{k=0}^3 \frac{0.5^k}{k!} = 1.645833.$$

准确值为 $e^{0.5} = 1.648721\dots$, 出现了误差.

上述 Taylor 级数法是计算函数值的一种基本方法, 这种方法舍弃了无穷级数的后半段, 因而出现了误差, 这种误差就是截断误差, 又称为方法误差.

4. 舍入误差

在计算机中, 数 x 表示为规格化浮点形式 (为简单起见, 设以 10 为基)

$$x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_r \times 10^p,$$

这里, $a_1 \neq 0$, p 是阶码, r 是字长.

计算机字长有限, 因此在计算机上只能表示出有限位数. 当一个数位太多或是无理数时, 计算机就要进行四舍五入, 从而产生误差, 这种误差称为舍入误差.

例 1.3 在 7 位十进制计算机上, π , $\sqrt{2}$ 和 $\frac{1}{3}$ 分别只能表示成近似数 0.3141593×10^1 , 0.1414214×10^1 和 0.3333333×10^0 ; $7777777 + 7111111$

的计算结果为 0.1488889×10^9 ; 它们的误差就是舍入误差.

计算机字长有限, 加减运算时, 要先将阶码统一为较大者, 然后相加减, 于是当数量级相差很大的数作加减运算时, 会出现大数吃小数的现象, 从而产生误差, 这种误差也称为舍入误差.

例 1.4 在 7 位十进制计算机上

$$\begin{aligned} 10^7 + 1 &= 0.1000000 \times 10^8 + 0.1000000 \times 10^1 \\ &= 0.1000000 \times 10^8 + 0.00000001 \times 10^8 \\ &= 0.1000000 \times 10^8 = 10^7, \end{aligned}$$

1 被 10^7 吃掉了, 导致计算结果有舍入误差.

为了避免大数吃掉小数这种现象发生, 多个符号相同的数求和时, 从绝对值最小的数到绝对值最大的数依次相加.

上面四种误差中, 前两种属应用数学范畴, 是不可避免的, 所以一般情形数学模型总是近似的, 既然这样, 硬是要求数学问题的准确解也就没有意义了. 后两种属计算数学范畴, 计算数学的一个基本任务是分析数值计算方法的截断误差和舍入误差, 并把它们控制在允许范围内.

§1.2 误差 误差限 有效数字

设 x^* 是准确值, x 是 x^* 的近似值, 怎样衡量 x 的精度?

定义 1.1 称 $e(x) = x^* - x$ 为 x 的绝对误差 (简称误差).

注意, 绝对误差不是误差的绝对值. $e(x) > 0$ 意味着 x 为 x^* 的不足近似值, $e(x) < 0$ 意味着 x 为 x^* 的过量近似值.

定义 1.2 若 $|x^* - x| \leq \epsilon$, 则称 ϵ 是 x 的误差限.

注意, 误差限不唯一, 有实际意义的是较小的误差限 ϵ .

最简单的是绝对误差, 但一般情形准确值 x^* 是不知道的, 所以最不好求的也是绝对误差. 在实践中, 通常是根据测量工具或计算情况去估计近似数的误差限. 例如, 用一把毫米刻度的米尺测量桌子的长度 x^* , 读出桌子的近似长度 $x = 1200$ mm, 它是 x^* 的近似值. x 的绝对误差无法求出, 但从米尺的刻度可知 $|x^* - x| = |x^* - 1200| \leq 0.5$, 即 x 的误差限 $\epsilon = 0.5$ mm.

绝对误差不能完全刻画近似值的精确度. 例如打字, 打 100 个字错 2 个和打 1000 个字错 5 个, 哪个差错大? 要用单位量上的误差来刻画近似值的精确度.

定义 1.3 称单位量上的误差 $e_r(x) = \frac{x^* - x}{x}$ 为 x 的相对误差.

定义 1.4 若 $|e_r(x)| \leq \epsilon_r$, 则称 ϵ_r 是 x 的相对误差限.

显然, ϵ 和 ϵ_r 之间有关系 $\epsilon_r = \frac{\epsilon}{|x|}$.

定义 1.5 如果近似值 x 的误差限是它的某一位的半个单位, 就称它准确到这一位, 若该位到 x 左边第一位非零数字共有 n 位, 则称它有 n 位有效数字.

定义 1.5 刻画了误差和有效数字的关系. 例如, 若近似值

$$x = 11.55, \quad |e(x)| \leq 0.5,$$

则 x 的误差限为个位的半个单位, 由定义 1.5 知 x 准确到个位, 有 2 位有效数字; 若 $x = 17.390$ 有 3 位有效数字, 则由定义 1.5 知它准确到十分位, 所以它有误差限 0.05, 即 $|e(x)| \leq 0.05$.

用误差大小、有效数字位数多少来衡量近似数的精度.

例 1.5 下列各数是按四舍五入原则得到的近似数, 它们各有几位有效数字?

$$82.796, \quad 0.00724, \quad 1.3200.$$

答 82.796 是四舍五入得到的, 故误差不超过末位 (千分位) 的半个单位, 所以按定义它准确到千分位, 有 5 位有效数字. 同理 0.00724 和 1.3200 分别有 3 位和 5 位有效数字.

例 1.6 近似数 3.1 与 3.10, 2.5 万与 2 万 5 千, 3.1×10^3 与 3100 是否是相同的数? 为什么?

答 不是同一个数. 因为按近似计算规定, 原始数据要用有效数字写, 凡不标明误差限的原始数据都被认为是有效数, 于是近似数 3.1 与 3.10, 2.5 万与 2 万 5 千, 3.1×10^3 与 3100 就有不同的含义, 它们的有效数字位数分别是 2, 3; 2, 5; 2, 4.

例 1.7 祖冲之在公元 480 年曾计算出圆周率 π 的值在 3.1415926 和 3.1415927 之间, 问祖冲之算出的圆周率近似值有多少位有效数字?

解 令祖冲之算出的圆周率近似值为 π' , 据题设 $\pi \in [3.1415926, 3.1415927]$, 取 $\pi' = 3.14159265$, 则 $|e(\pi')| \leq 0.5 \times 10^{-7}$. 依定义 1.5, π' 准确到千万分位, 有 8 位有效数字.

§1.3 用微分计算函数值误差

1. 用微分计算函数值误差

在计算函数值时, 如果自变量有误差会导致求出的函数值有误差, 下面推导函数值误差的计算公式.

设 $f(x)$ 是一元函数, 要计算在 x^* 处的函数值 $y^* = f(x^*)$, 如果仅知道 x^* 的近似值 x , 则只能计算出 y^* 的近似值 $y = f(x)$. 让我们讨论自变量误差 $e(x) = x^* - x$ 对函数值的影响. 用微积分语言描述就是, 已知自变量改变量 $e(x) = x^* - x$, 求函数值改变量 $e(y) = y^* - y$. 在微积分中有公式

$$e(y) = dy + o(x^* - x),$$

这里 $dy = f'(x)(x^* - x)$ 是 y 的微分, 它是函数改变量 $e(y)$ 的线性部分, $o(x^* - x)$ 是高阶无穷小量. 舍去 $o(x^* - x)$, 得

$$e(y) \approx dy = f'(x)e(x). \quad (1.1)$$

(1.1) 给出了一个用微分 dy 计算函数值误差 $e(y)$ 的近似公式.

由 (1.1) 和相对误差定义得

$$e_r(y) = \frac{e(y)}{y} \approx \frac{f'(x)}{f(x)} x e_r(x). \quad (1.2)$$

(1.2) 是计算函数值相对误差 $e_r(y)$ 的近似公式.

例 1.8 设已知 $y = x^a$ 和 $e_r(x)$, 求 $e_r(y)$.

解 由 (1.2) 得

$$e_r(y) \approx a \frac{x^{a-1}}{x^a} x e_r(x) = a e_r(x),$$

即 x^a 的相对误差大约是 x 的相对误差的 a 倍.

例 1.9 正方形边长大约为 100 cm, 应该怎样测量, 才能使面积误差不超过 1 cm^2 .

解 设测量出的正方形边长为 x , 相应的面积为 S . 则 $S = x^2$. 由 (1.1) 推出

$$\begin{aligned} e(S) &\approx 2xe(x), \\ |e(x)| &\approx \left| \frac{e(S)}{2x} \right| \leq \frac{1}{200} = 0.005(\text{cm}). \end{aligned}$$

故测量边长时的误差不得超过 0.005 cm.

设 $u = f(x, y)$ 是二元函数, 已知自变量误差 $e(x), e_r(x), e(y)$ 和 $e_r(y)$. 怎样求由它们引起的函数值误差 $e(u)$ 和 $e_r(u)$? 受一元函数用微分求函数值误差的启发, 我们用全微分求二元函数函数值误差.

$$e(u) \approx du = \frac{\partial u}{\partial x} e(x) + \frac{\partial u}{\partial y} e(y), \quad (1.3)$$

$$e_r(u) = \frac{e(u)}{u} \approx \frac{\partial u}{\partial x} \frac{x}{u} e_r(x) + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{y}{u} e_r(y). \quad (1.4)$$

请读者自己写出 n 元函数的函数值误差公式.

2. 和、差、积、商的误差

令 $x^* \approx x, y^* \approx y$, 则

$$x^* \pm y^* \approx x \pm y, \quad x^* y^* \approx xy, \quad \frac{x^*}{y^*} \approx \frac{x}{y}.$$

设已知 $e(x), e_r(x)$ 和 $e(y), e_r(y)$; 让我们来求 $e(x \pm y), e_r(x \pm y), e(xy), e_r(xy)$ 和 $e(\frac{x}{y}), e_r(\frac{x}{y})$.

显然成立

$$e(x \pm y) = e(x) \pm e(y), \quad (1.5)$$

$$e_r(x \pm y) = \frac{e(x \pm y)}{x \pm y} = \frac{x}{x \pm y} e_r(x) \pm \frac{y}{x \pm y} e_r(y). \quad (1.6)$$

这表明近似数和的绝对误差是每个近似数绝对误差之和; 符号相同的近似数, 和的相对误差不超过各项中相对误差限大的那一个.

(1.6) 还告诉我们, 相近的数相减时, 差的相对误差会很大. 事实上, 当 x 和 y 十分接近时, $|x - y|$ 就很小, $|\frac{x}{x-y}|$ 和 $|\frac{y}{x-y}|$ 会很大, 相对误差 $e_r(x)$ 和 $e_r(y)$ 迅速传播, 导致差的相对误差会很大. 还可以这样解释, 相近的数前面若干位有效数字必然相同, 相减后会引引起有效数字丢失. 例如, 当 $x = 123.0176, y = 123.0131$ 都有 7 位有效数字时, $x - y = 0.0045$ 最多只有两位有效数字. 在计算数学中常通过改变计算公式以避免相近的数相减, 或采用双精度 (双倍位字长) 计算以提高计算精度.

定义函数 $u = f(x, y) = xy$, 由 (1.3) 和 (1.4) 推出

$$e(xy) = e(u) \approx ye(x) + xe(y), \quad (1.7)$$

$$e_r(xy) = e_r(u) \approx y \frac{x}{xy} e_r(x) + x \frac{y}{xy} e_r(y) = e_r(x) + e_r(y). \quad (1.8)$$

定义函数 $u = f(x, y) = \frac{x}{y}$, 由 (1.3) 和 (1.4) 推出

$$e(\frac{x}{y}) = e(u) \approx \frac{1}{y} e(x) - \frac{x}{y^2} e(y), \quad (1.9)$$

$$e_r(\frac{x}{y}) = e_r(u) \approx e_r(x) - e_r(y). \quad (1.10)$$

由 (1.8) 和 (1.10) 知, 对于乘法, 相对误差不会迅速传播. 由 (1.7) 和 (1.9) 知, 当 (1.7) 中乘数 x 的绝对值 $|x|$ 很大或 (1.9) 中除数 y 接近零时, 计算结果的绝对误差可能很大. 因此, 实际计算中应当尽量避免用绝对值很大的数作乘数

或用接近零的数作除数. 简言之, 避免大乘数和小除数.

例 1.10 设 x, y, z 和 w 都是近似数, $u = \frac{xy}{zw}$. 已知 $e_r(x), e_r(y), e_r(z)$ 和 $e_r(w)$, 求 $e_r(u)$ 和 u 的相对误差限.

解 由 (1.8) 和 (1.10) 推出

$$e_r(u) = e_r\left(\frac{xy}{zw}\right) \approx e_r(xy) - e_r(zw) \approx e_r(x) + e_r(y) - e_r(z) - e_r(w),$$

由三角形不等式推出约有

$$|e_r(u)| \leq |e_r(x)| + |e_r(y)| + |e_r(z)| + |e_r(w)|,$$

u 的相对误差限是乘数 x, y 和除数 z, w 的相对误差限之和.

例 1.11 设 3.14 和 2.685 分别有 3 位和 4 位有效数字, 估计函数值 $\sin(3.14 \times 2.685)$ 的绝对误差和相对误差.

解 归结为求二元函数误差. 已知 $x = 3.14$ 和 $y = 2.685$ 分别有 3 位和 4 位有效数字, $u = \sin(xy)$; 估计 $e(u)$ 和 $e_r(u)$.

由定义 1.5 得 $|e(x)| \leq 0.005, |e(y)| \leq 0.0005$. 由 (1.3) 推出

$$\begin{aligned} |e(u)| &\approx \left| \frac{\partial u}{\partial x} e(x) + \frac{\partial u}{\partial y} e(y) \right| \\ &= |\cos(xy)ye(x) + \cos(xy)xe(y)| \leq 8.178928 \times 10^{-3}, \end{aligned}$$

经计算得 $u = \sin(3.14 \times 2.685) = 0.8381475$, 所以约有

$$|e_r(u)| = \left| \frac{e(u)}{u} \right| \leq 9.758340 \times 10^{-3}.$$

§1.4 计算方法的数值稳定性

定义 1.6 用一个计算方法进行计算时, 如果初始数据误差或某一步计算的误差在以后的计算过程中不增长, 就称该方法数值稳定, 否则, 若误差增长, 就称该方法数值不稳定.

1. 求根公式的数值稳定性

一元二次方程的求根公式是每一个中学生都必须熟练掌握的基础知识, 在计算机上用求根公式解方程时出现了数值稳定性问题.

例 1.12 在 7 位十进制计算机上求 $x^2 - 26x + 1 = 0$ 的两个根.

(准确根 $x_1 = 25.961481 \cdots, x_2 = 0.038518603 \cdots$)

解法 1 用求根公式计算, 得

$$x_1 = 13 + \sqrt{168} \approx 25.96148, \quad x_2 = 13 - \sqrt{168} \approx 0.03851986.$$

x_1 的计算值有 7 位有效数字, 但 x_2 的计算值只有 4 位有效数字. 究其原因, 是因为出现了相近的数相减.

解法 2 用求根公式求 x_1 , 用韦达定理求 x_2 , 得

$$x_1 \approx 25.96148, \quad x_2 = 1/x_1 \approx 0.03851861.$$

避免了相近的数相减, x_2 的计算值达到了 6 位有效数字.

依定义 1.6, 解法 1 数值不稳定, 解法 2 数值稳定.

2. 递推法的数值稳定性

所谓递推法, 是指从已知的初始条件 (称为递推初值) 出发, 用一个公式 (称为递推公式) 逐次推出所需要的各中间结果及最后结果. 其中初始条件或是问题本身已经给定, 或是通过对问题的分析与化简后确定. 递推法在数值计算中极为常见, 其主要优点是算法结构比较简单, 容易在计算机上实现, 但稳定性问题不容忽视.

例 1.13 取 7 位数字计算积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx \quad (n = 0, 1, 2, \dots, 14).$$

(所谓取 7 位数字计算, 指计算过程中从左边第一位非零数字起第 8 位的数值按四舍五入的原则舍入.)

直接计算这 15 个积分, 计算量大, 显然是愚蠢的. 仔细观察发现

$$I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n}. \quad (1.11)$$

(1.11) 式给出了各个积分之间的联系, 以 (1.11) 为基础建立下列递推方法.

方法 1

$$\begin{aligned} I_0 &= \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx, \\ I_n &= \frac{1}{n} - 5I_{n-1} \quad (n = 1, 2, \dots, 14). \end{aligned} \quad (1.12)$$

该方法是递推法, 它由递推初值 I_0 和递推公式 (1.12) 两个部分组成. 用这公式, 仅算初值 I_0 时需求一个积分, 以后每递推一步只需作一次除法, 一次乘法

和一次减法. 用方法 1 解例 1.13: 首先用 Newton-Leibniz 公式算出有 7 位有效数字的

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln 6 - \ln 5 \approx 0.1823216,$$

然后用 $I_0 \approx 0.1823216$ 作为递推初值, 用 (1.12), 取 7 位数字计算, 逐步算出

$$\begin{aligned} I_1 &\approx 0.08839200, & I_2 &\approx 0.05804000, & I_3 &\approx 0.04313330, \\ I_4 &\approx 0.03433350, & I_5 &\approx 0.02833250, & I_6 &\approx 0.02500420, \\ I_7 &\approx 0.01783610, & I_8 &\approx 0.03581950, & I_9 &\approx -0.06798640, \\ I_{10} &\approx 0.4399320, & I_{11} &\approx -2.108751, & I_{12} &\approx 10.62708, \\ I_{13} &\approx -53.05848, & I_{14} &\approx 265.3638. \end{aligned}$$

让我们来看一看这些结果是否可靠, 显然 I_n 是恒正的, 而由 (1.12) 算出的 I_9, I_{11} 和 I_{13} 却为负值. 计算结果严重失真.

方法 2

$$\begin{aligned} I_{14} &= \int_0^1 \frac{x^{14}}{x+5} dx, \\ I_{n-1} &= \frac{1}{5n} - \frac{I_n}{5} \quad (n = 14, 13, \dots, 1). \end{aligned} \quad (1.13)$$

这里 I_{14} 是递推初值, (1.13) 是递推公式. 用方法 2 解例 1.13: 首先用数值积分公式 (见第 3 章) 算出有 7 位有效数字的

$$I_{14} = \int_0^1 \frac{x^{14}}{x+5} dx \approx 0.01122919,$$

然后用递推公式 (1.13), 取 7 位数字计算, 逐步算出

$$\begin{aligned} I_{13} &\approx 0.01203987, & I_{12} &\approx 0.01297665, & I_{11} &\approx 0.01407134, \\ I_{10} &\approx 0.01536755, & I_9 &\approx 0.01692649, & I_8 &\approx 0.01883692, \\ I_7 &\approx 0.02123262, & I_6 &\approx 0.02432491, & I_5 &\approx 0.02846835, \\ I_4 &\approx 0.03430633, & I_3 &\approx 0.04313873, & I_2 &\approx 0.05803892, \\ I_1 &\approx 0.08839222, & I_0 &\approx 0.1823216. \end{aligned}$$

这些结果精度高.

从数学上看, 方法 1 和方法 2 无疑都是正确的, 为什么方法 1 计算结果误