



高等学校“十一五”规划教材

计算方法

Jisuan Fangfa

樊铭渠 主编

中国矿业大学出版社

China University of Mining and Technology Press

高等学校“十一五”规划教材

计算方法

主 编 樊铭渠

副主编 张卷美 杨卫平

平

中国矿业大学出版社

内 容 提 要

本书是为工科院校各专业开设的“计算方法”课程编写的教材。内容包括绪论、方程求根、插值与逼近、数值积分与数值微分、常微分方程的数值解法、线性方程组的数值解法和矩阵特征值与特征向量的计算等7章。每章末有本章小结、思考题、习题,以及主要算法的C语言上机实验参考程序。

本书可作为高等工科院校非数学专业的教材,也可作为同等学历人员的自学教材或科技人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/樊铭渠主编. —江苏徐州:中国矿业大学出版社, 2006.11

ISBN 7 - 81107 - 454 - 0

I. 计… II. 樊… III. 计算方法 IV. 0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 082142 号

书 名 计算方法

主 编 樊铭渠

责任编辑 何 戈

责任校对 杜锦芝

出版发行 中国矿业大学出版社

(江苏省徐州市中国矿业大学内 邮编 221008)

网 址 <http://www.cumtp.com> E-mail: cumtpvip@cumtp.com

排 版 中国矿业大学出版社排版中心

印 刷 江苏淮阴新华印刷厂

经 销 新华书店

开 本 787×1092 1/16 印张 11 字数 274 千字

版次印次 2006 年 11 月第 1 版 2006 年 11 月第 1 次印刷

定 价 16.50 元

(图书出现印装质量问题,本社负责调换)

前 言

随着计算机技术的迅速普及和发展,以及计算技术的广泛应用,在生产实践的众多领域内,数值仿真已经逐渐超过甚至在某种程度已经替代传统的实验室试验。科学工作者越来越清楚地认识到数值计算的重要性。为了适应这一需求,大多数工科专业已经开设“计算方法”课,并作为必修课程。

本书是在编者多年讲授本课程的基础上编写而成的。在内容的选择上,本书力求精简,以反映计算方法课的基本特征为主,注重理论联系实际。针对初学者的特点,采用循序渐进、重点突出、难点分解、每章对难点和重点进行小结等方法尽可能地做到深入浅出,让读者能够轻松入门。

本书以工科各专业为背景,较为详细地介绍了计算方法的基本概念、基本知识,以及计算机上常用的算法,每一章后附有该章重要算法的参考程序,与课堂教学并行使用,进一步提高学生的编程能力。

全书共分七章,第一章介绍计算方法的基本概念,第二章介绍方程求根的主要算法,第三章、第四章介绍数值逼近方面的知识,第五章是常微分方程的数值解法的基础,第六、第七两章讲述线性代数中的常用算法。本书课堂教学大约需要 60 学时。

本书第一章至第三章由张卷美编写,第四章由李艳方编写,第五章由樊铭渠编写,第六章由杨卫平编写,第七章由孙亮编写,研究生翟泳、杨金梁编写了第五章至第七章的上机实验参考程序,并对全书的程序逐一验证。最后由樊铭渠统稿。

本书的编写是高等学校(矿业)信息与电气工程“十一五”规划教材的一部分,得到了中国矿业大学出版社的大力支持。本书在编写过程中还得到了山东科技大学、河南理工大学其他老师和研究生的热情帮助,他们在参与部分章节的撰写和校对方面付出了辛勤劳动,在此一并表示衷心感谢。

由于编者水平有限,书中错误之处在所难免,敬请广大读者批评指正。

编 者

2006 年 6 月

83		去其路小素始射未为即变,一	
93		去其半的野衣挂外,二	
93		去于因裂,三	
18		目 录	
33		故小章本	
33		圆差思	
33		二圆区	
第一章 绪论			1
第一节 计算方法的主要内容			1
第二节 误差的来源与误差分析的重要性			2
一、误差的来源			2
二、误差与误差限			2
三、相对误差与相对误差限			3
四、有效数字			3
五、数据误差的影响			5
第三节 误差危害的防止			6
一、尽量避免两个相近的数相减			6
二、避免大数“吃”小数的现象			6
三、避免用绝对值相对较小的数作除数			7
四、注意简化计算步骤,减少运算次数			7
五、选用数值稳定性好的算法			8
本章小结			8
思考题			9
习题一			9
上机实验参考程序			10
第二章 方程求根			12
第一节 引言			12
一、问题的提出			12
二、二分法			13
第二节 迭代法			15
一、简单迭代法			15
二、迭代法的收敛速度			19
三、埃特金加速法			20
第三节 牛顿迭代法与弦割法			23
一、牛顿迭代法			23
二、牛顿迭代法的局部收敛性			25
三、 m 重根的处理			25
四、弦割法			27
第四节 代数方程求根			28

一、多项式求值的秦九韶算法	28
二、代数方程的牛顿法	29
三、劈因子法	29
本章小结	31
思考题	32
习题二	32
上机实验参考程序	33
第三章 插值与逼近	35
第一节 引言	35
一、问题的提出	35
二、插值多项式的存在与惟一	36
第二节 拉格朗日插值	37
一、线性插值与抛物插值	37
二、拉格朗日插值多项式	40
三、插值余项	41
第三节 差商、差分与牛顿插值	43
一、差商与牛顿插值多项式	43
二、差分与等距节点插值公式	45
第四节 逐次线性插值	49
第五节 埃尔米特插值	51
第六节 高次插值的缺点和分段低次插值	54
一、高次插值多项式的缺点	54
二、分段低次插值	55
第七节 三次样条插值	56
一、三转角方程	57
二、三弯矩方程	58
第八节 曲线拟合	60
本章小结	62
思考题	63
习题三	63
上机实验参考程序	65
第四章 数值积分与数值微分	67
第一节 引言	67
一、问题的提出	67
二、代数精度的概念	68
三、插值型求积公式	69
第二节 牛顿—柯特斯(Newton—Cotes)求积公式	70

801 一、牛顿—柯特斯公式	70
801 二、梯形公式、辛蒲生公式和柯特斯公式	71
803 第三节 复化求积公式	73
901 一、复化梯形公式	73
二、复化辛蒲生公式	73
811 三、复化柯特斯公式	74
811 四、步长的自动选择	75
111 第四节 龙贝格(Romberg)求积公式	76
111 第五节 高斯求积公式简介	78
111 第六节 数值微分	82
711 一、问题的提出	82
811 二、插值型求导公式	83
050 本章小结	86
151 思考题	86
251 习题四	86
251 上机实验参考程序	87
151	87
第五章 常微分方程的数值解法	89
858 第一节 引言	89
958 第二节 欧拉(Euler)方法	90
158 一、欧拉方法	90
051 二、梯形公式	92
181 三、改进的欧拉方法	93
181 四、欧拉两步公式	94
181 五、步长的自动选择	95
351 第三节 龙格—库塔方法	96
131 一、龙格—库塔方法的基本思想	96
181 二、二阶龙格—库塔方法	96
881 三、高阶龙格—库塔公式	97
第四节 单步法的收敛性和稳定性	100
141 一、单步法的收敛性	100
141 二、单步法的稳定性	101
151 第五节 线性多步法	102
141 一、阿当姆斯显式方法	102
141 二、阿当姆斯隐式方法	103
141 三、阿当姆斯预估—校正法	104
151 第六节 一阶方程组与高阶方程	105
151 一、一阶方程组	105
881 二、高阶微分方程的数值解法	106

07 本章小结	108
17 思考题	108
87 习题五	108
87 上机实验参考程序	109
第六章 线性方程组的数值解法	113
07 第一节 引言	113
07 第二节 高斯(Gauss)消去法	114
87 一、三角形方程组及其解法	114
88 二、高斯消去法	114
88 三、矩阵的三角分解	117
88 四、列主元高斯消去法	118
08 第三节 高斯消去法的变形	120
88 一、直接三角分解法	121
88 二、平方根法	123
88 三、追赶法	125
第四节 向量范数和矩阵范数	127
88 一、向量范数	127
88 二、矩阵范数	128
08 第五节 解线性方程组的迭代法	129
08 一、迭代法的基本思想	129
88 二、雅可比迭代法	129
88 三、高斯—塞德尔迭代法	131
88 四、迭代法的收敛性	133
88 第六节 解线性方程组的超松弛迭代法	135
88 本章小结	137
88 思考题	137
88 习题六	138
88 上机实验参考程序	138
第七章 矩阵的特征值与特征向量的计算	145
10 第一节 引言	145
80 第二节 幂法及反幂法	145
80 一、幂法	146
80 二、Rayleigh 商加速	148
80 三、反幂法	149
80 第三节 雅可比方法	151
80 一、雅可比方法	151
80 二、雅可比过关法	158

目 录

第四节 QR 算法	159
本章小结	162
思考题	162
习题七	162
上机实验参考程序	163
参考文献	165

第一章 绪 论

【本章重点】 误差的基本概念;分析误差的若干原则。

【本章难点】 相对误差;有效数字。

科学技术发展到今天,电子计算机的应用已渗透到社会生活的各个领域,而数值计算是电子计算机处理实际问题的一种关键手段,从宏观天体运动学到微观分子细胞学说,从工程系统到非工程系统,都离不开数值计算。数值计算方法已经是每一位从事科学研究与应用的人不可缺少的工具之一。本章介绍数值计算方法的含义及其特点、数值运算中的误差分析。误差分析包括误差的来源、近似数的误差、运算误差分析和减少误差的若干原则。

第一节 计算方法的主要内容

数值计算方法是应用数学的一个分支,又称数值分析或计算方法,它是研究用数字计算机求解各种数学问题的数值方法及其理论的一门学科,是程序设计和对数值结果进行分析的依据和基础。

当采用计算机来求解一个实际问题时,主要分图 1-1 所示的几个步骤。

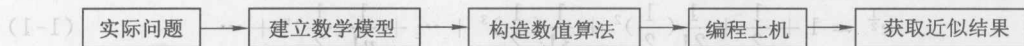


图 1-1 用计算机求解实际问题的步骤

由图 1-1 可见,数值计算方法是应用计算机进行科学计算全过程中的一个重要环节。

计算机具有很高的运算速度,但它只能依据给定的指令完成加、减、乘、除等数学运算和一些逻辑运算。因此,使用计算机求解各种数学问题,必须要把求解过程归结为按一定的规则进行一系列四则算术运算的过程。计算机只能机械地执行人所给定的指令,交给计算机执行的解题方法的每一步都必须加以准确规定。把对数学问题的解法归结为有加、减、乘、除等基本运算,并对运算顺序有完整而准确的描述的算法称为数值计算方法或简称数值算法。计算方法是研究各种数值算法及其有关理论的一门课程。从工程实际出发,本课程所要解决的数学问题是:非线性方程、线性方程组、插值和曲线拟合、数值积分和微分、常微分方程。这些数学问题的数值解法和计算机有密切关系,因此实现这些算法时还要依据计算机的容量、字长、速度等指标来研究具体的求解步骤和程序设计技巧。数值算法概括起来有如下一些特点:

(1) 面向计算机。计算机的特点是只能进行加、减、乘、除四则运算和乘方运算、逻辑运算,数值算法一般由加、减、乘、除四则运算和乘方运算、逻辑运算构成。

(2) 有可靠的理论分析。能任意逼近并达到精确要求,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。这些都是建立在相应的数学理论基础上的。

(3) 要有好的计算复杂性。一个算法的计算复杂性是指该算法的空间复杂度和时间复杂度。空间复杂度是指算法需占用的存储空间,时间复杂度是指算法包含的运算次数。空间复杂度和时间复杂度小的算法是计算复杂性优秀的算法。这也是建立算法时要研究的问题,它关系到算法能否在计算机上实现。

第二节 误差的来源与误差分析的重要性

一、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,而影响精确度的因素是各种各样的误差。按照它们的来源,误差可以分为以下四种。

(一) 模型误差

反映与实际问题有关的量之间的计算公式即是数学模型,数学模型通常只是近似的。数学模型与实际问题之间的误差称为模型误差或描述误差。通常都假定模型误差是合理的。

(二) 观测误差

在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。由观测得到的数据与实际数据之间的误差,称为观测误差。

(三) 截断误差

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

$$e^{\frac{1}{2}} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2!} \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{1}{2}\right)^3 + \cdots + \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2}\right)^n + \cdots \quad (1-1)$$

如果用有限项 $1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2!} \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{1}{2}\right)^3 + \cdots + \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2}\right)^n$ 近似代替 $e^{\frac{1}{2}}$, 则截去的 $\frac{1}{(n+1)!} \left(\frac{1}{2}\right)^{n+1} + \cdots$ 就是截断误差。

(四) 舍入误差

在计算过程中往往要对数字进行舍入。如,受计算机可以表示的数字位数限制,无穷小数和位数很多的数必须舍入成一定的位数,这样产生的误差称为舍入误差或计算误差。例如,用 3.141 59 近似代替 π , 产生的误差:

$$\pi - 3.141\,59 = 0.000\,002\,6\cdots$$

就是舍入误差。

二、误差与误差限

设 x 为准确值, x^* 为 x 的一个近似值,则称 $e^* = x^* - x$ 为近似值 x^* 的绝对误差,简称误差。

我们知道,通常准确值难以求出,因此,很难获得绝对误差 e^* 的准确值。工程上一般根据测量工具精度或计算精度估计出它的取值范围,即估计出误差的绝对值不超过某个正数 ϵ , 即:

$$|e^*| = |x - x^*| \leq \epsilon \quad (1-3)$$

我们称正数 ϵ 为近似数 x^* 的绝对误差限, 简称误差限或精度。显然, 误差限是不惟一的。 ϵ 越小, 表示近似数 x^* 的精度越高。显然有 $x^* - \epsilon \leq x \leq x^* + \epsilon$, 工程上通常用 $x = x^* \pm \epsilon$ 来表示近似值 x^* 的精度或准确值 x 所在的范围。

例如, 测得某一物体的长度为 5 m, 其误差限为 0.01 m, 通常将准确长度记为 $s = (5 \pm 0.01)$ m, 即准确长度在 5 m 左右, 但不超过 0.01 m 的误差限。由这个例子可以看出, 绝对误差是有量纲的。

三、相对误差与相对误差限

误差限的大小还不能完全表示近似值的好坏。如有甲、乙两个学生分别做满分 100 分和 150 分的试题, 甲得 90 分, 乙得 139 分, 显然若从绝对误差角度来衡量两者成绩的优劣, 则会导致乙比甲成绩差的不合理结果。为什么这种比较不合理呢? 原因是乙做 150 分的题才错 11 分, 而甲做 100 分的题就错了 10 分。人们自然在考虑绝对误差的同时也会将其与原量的精确值大小进行比较。为此我们引入衡量近似值精度的另一尺度——相对误差。

我们称绝对误差 e^* 与准确值 x 的比值, 即:

$$e_r = \frac{e^*}{x} = \frac{x^* - x}{x} \quad (1-4)$$

为近似值 x^* 的相对误差。

在实际计算中, 由于准确值 x 总是不知道的, 通常取:

$$e_r = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*} \quad (1-5)$$

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

$$\frac{e^*}{x} - \frac{e^*}{x^*} = \frac{e^*(x^* - x)}{x^*x} = \frac{(e^*)^2}{x^*(x^* - e^*)} = \frac{(\frac{e^*}{x^*})^2}{1 - \frac{e^*}{x^*}} = O(\frac{e^*}{x^*})^2 \quad (1-6)$$

是 e_r 的平方项级, 故可忽略不计。

相对误差也可正可负。同样, 我们通常用满足不等式 $|e_r| \leq \epsilon_r$ 的相对误差限 ϵ_r 来表征相对误差, 且在实际应用中常取:

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{|x^*|} \quad (1-7)$$

按定义, 上例中甲的相对误差为 10%, 乙的相对误差约为 7.3%, 因此乙的成绩优于甲。又如某商品标注其质量为 (35 ± 0.2) kg, 则由此可知商品质量的绝对误差(限)为 0.02 kg, 相对误差(限)为 $0.2/35 (\approx 0.57\%)$ 。

四、有效数字

当准确值 x 有多位数时, 常常按四舍五入的原则得到 x 的前几位近似值 x^* , 例如:

$$x = \pi = 3.141\,592\,65\ldots \quad (1-8)$$

取 3 位:

$$\leq (x_1 + 1) \times 10^{m-1} \times \frac{1}{2(x_1 + 1)} \times 10^{-n+1} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

由式(1-14)可得, x^* 至少有 n 位有效数字。

定理表明,有效数字位数越多,相对误差限就越小,精度越高。

例 1-1 依四舍五入原则写出下列各数具有 5 位有效数字的近似数。

$$913.958\ 72, \quad 39.188\ 2, \quad 0.014\ 325\ 4, \quad 8.000\ 033$$

解 按定义,上述各数具有 5 位有效数字的近似数分别为:

$$913.96, \quad 39.188, \quad 0.014\ 325, \quad 8.000\ 0$$

注意,8.000 033 的 5 位有效数字的近似数是 8.000 0 而不是 8.8 只有一位有效数字。

例 1-2 为使 $\sqrt{20}$ 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 $x_1 = 4$,由式(1-16)有:

$$\epsilon_r^* = \frac{1}{2 \times 4} \times 10^{-n+1} < 1\% \quad (1-19)$$

解之得 $n > 2$ 即可,可取 $n = 3$,即 $\sqrt{20} \approx 4.47$ 。

在实际应用中,为了使取得的近似数具有 n 位有效数字,要求所取的近似数的相对误差满足条件式(1-15)。

五、数据误差的影响

本节讨论当 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 存在误差时,计算 $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 时的误差问题。设 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$ 依次是 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的近似值,在点 $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ 利用泰勒式展开 $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$,得:

$$\begin{aligned} e(y^*) &= y^* - y = f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) - f(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ &\approx \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} (x_i^* - x_i) \end{aligned} \quad (1-20)$$

若记 $\frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^*$,则上式可简记为:

$$e(y^*) \approx \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^* (x_i^* - x_i) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^* e(x_i^*) \quad (1-21)$$

而函数 y 的近似值 y^* 的相对误差为:

$$\epsilon_r(y^*) = \frac{e(y^*)}{y^*} \approx \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^* \frac{x_i^* e_r(x_i^*)}{y^*} \quad (1-22)$$

利用式(1-21)、式(1-22),可得到两数和、差、积、商的误差估计。

两个近似数 x_1^* 与 x_2^* ,其误差限分别为 $\epsilon(x_1^*)$ 及 $\epsilon(x_2^*)$,对它们进行加、减、乘、除运算得到的误差限分别为:

$$\epsilon(x_1^* \pm x_2^*) = \epsilon(x_1^*) \pm \epsilon(x_2^*) \quad (1-23)$$

$$\epsilon(x_1^* x_2^*) \approx |x_1^*| \epsilon(x_2^*) + |x_2^*| \epsilon(x_1^*) \quad (1-24)$$

$$\epsilon(x_1^* / x_2^*) \approx \frac{|x_1^*| \epsilon(x_2^*) + |x_2^*| \epsilon(x_1^*)}{x_2^{*2}} \quad (x_2^* \neq 0) \quad (1-25)$$

例 1-3 已测得某场地的长 l 的值为 $l^* = 110$ m,宽 d 的值为 $d^* = 80$ m。已知 $|l - l^*|$

$\leq 0.2 \text{ m}$, $|d - d^*| \leq 0.1 \text{ m}$, 试求面积的绝对误差限与相对误差限。

解 因 $s = ld$, $\frac{\partial s}{\partial l} = d$, $\frac{\partial s}{\partial d} = l$, 那么:

$$\epsilon(s^*) \approx \left| \left(\frac{\partial s}{\partial l} \right)^* \right| \epsilon(l^*) + \left| \left(\frac{\partial s}{\partial d} \right)^* \right| \epsilon(d^*)$$

其中: $(\partial s / \partial l)^* = d^* = 80 \text{ m}$, $(\partial s / \partial d)^* = l^* = 110 \text{ m}$ 。

$$\epsilon(d^*) = 0.1 \text{ m}, \epsilon(l^*) = 0.2 \text{ m}$$

于是绝对误差限为:

$$\epsilon(s^*) \approx 80 \times 0.2 + 110 \times 0.1 = 24 (\text{m}^2)$$

相对误差限为:

$$\epsilon_r^* = \frac{\epsilon(s^*)}{|s^*|} = \frac{\epsilon(s^*)}{l^* d^*} \approx \frac{27}{8800} \times 100\% = 0.31\%$$

第三节 误差危害的防止

解决一个计算问题往往有多种算法,采用不同算法,计算结果的精确度往往是不同的。人们自然希望选用那些计算量小而精度又高的算法。下面通过对误差的某些传播规律的简单分析,指出在数值计算中应注意的几个原则,它有助于鉴别计算结果的可靠性并防止危害现象的产生。

一、尽量避免两个相近的数相减

在数值运算中两个相近的数相减会使有效数字严重损失。如 $x = 532.65$, $y = 532.32$ 都具有 5 位有效数字,但 $x - y = 0.13$ 最多有两位有效数字,所以要尽量避免这类运算。

为了避免此类现象的发生,通常采用的方法是变换计算公式。

例如,当 x_1 与 x_2 很接近时,由于:

$$\lg x_1 - \lg x_2 = \lg \frac{x_1}{x_2} \quad (1-26)$$

那么可用右端的公式代替左端的公式计算。

当 x 很大时:

$$\sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}} \quad (1-27)$$

也可用右端来代替左端。

一般情况下,当 x^* 位于 x 附近时,可用泰勒式展开:

$$f(x) - f(x^*) \approx f'(x^*)(x - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2}(x - x^*)^2 + \dots \quad (1-28)$$

取右端的有限项近似左端。

二、避免大数“吃”小数的现象

若参加运算的数的数量级相差很大而计算机的位数有限,如不注意运算次序,就可能出现大数“吃”小数的现象,影响计算结果。

例 1-4 在 8 位有效数字下,求二次方程 $x^2 - (10^9 + 1)x + 10^9 = 0$ 的根。

解 利用因式分解容易求出,此方程的两个根为 $x_1 = 10^9, x_2 = 1$ 。但若用求根公式,则得:

$$x = \frac{(10^9 + 1) \pm \sqrt{(10^9 + 1)^2 - 4 \times 10^9}}{2} \quad (1-29)$$

在 8 位有效数字下,我们有:

$$\begin{aligned} 10^9 + 1 &= 10^{10} \times 0.100\,000\,00 + 10^{10} \times 0.000\,000\,001 \\ &= 10^{10} \times 0.100\,000\,00 + 10^{10} \times 0.000\,000\,00 \end{aligned} \quad (1-30)$$

$$\begin{aligned} &= 10^{10} \times 0.100\,000\,00 = 10^9 \\ \sqrt{(10^9 + 1)^2 - 4 \times 10^9} &= 10^9 \end{aligned} \quad (1-31)$$

这样求得 $x_1 = 10^9, x_2 = 0$, 结果显然是错误的。为避免这种情形出现,也可采用改变计算公式的方法。如将式:

$$x_2 = \frac{10^9 + 1 - \sqrt{(10^9 + 1)^2 - 4 \times 10^9}}{2} \quad (1-32)$$

改写成:

$$x_2 = \frac{2 \times 10^9}{10^9 + 1 + \sqrt{(10^9 + 1)^2 - 4 \times 10^9}} \quad (1-33)$$

则有:

$$x_2 \approx \frac{2 \times 10^9}{10^9 + 10^9} = 1 \quad (1-34)$$

此结果是正确的。

三、避免用绝对值相对较小的数作除数

设 x 与 y 分别有近似值 x^* 与 y^* , $z = \frac{x}{y}$ 的近似值 $z^* = \frac{x^*}{y^*}$, 则其绝对误差为:

$$\begin{aligned} |e(z^*)| &\approx \left| \frac{1}{y^*} e(x^*) + \frac{x^*}{(y^*)^2} e(y^*) \right| \\ &\leq \frac{1}{|y^*|} |e(x^*)| + \frac{|x^*|}{(y^*)^2} |e(y^*)| \end{aligned} \quad (1-35)$$

显然,当 $|y^*|$ 很小时,近似值 z^* 的绝对误差 $e(z^*)$ 有可能很大。因此,不宜把绝对值太小的数作除数。

四、注意简化计算步骤,减少运算次数

同样一个计算问题,如果能减少运算次数,不但能节省计算机的计算时间,还能减少舍入误差。

例 1-5 计算 x^{255} 的值。

如果逐个相乘要用 254 次乘法,但若写成:

$$x^{255} = x \cdot x^2 \cdot x^4 \cdot x^8 \cdot x^{16} \cdot x^{32} \cdot x^{64} \cdot x^{128} \quad (1-36)$$

则只要做 14 次乘法运算即可。

又如计算多项式:

$$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 \quad (1-37)$$

的值,若直接计算 $a_k x^k$ 再逐项相加,一共需做:

$$n + (n-1) + \cdots + 2 + 1 = \frac{n(n+1)}{2} \quad (1-38)$$

次乘法和 n 次加法。若采用秦九韶算法:

$$\begin{cases} S_n = a_n \\ S_k = xS_{k+1} + a_k \quad (k = n-1, \cdots, 2, 1, 0) \\ P_n(x) = S_0 \end{cases} \quad (1-39)$$

则只要 n 次乘法和 n 次加法就可算出 $P_n(x)$ 的值。

五、选用数值稳定性好的算法

把运算过程中舍入误差不增长的计算公式称为数值稳定的,否则称为不稳定的。例如在 4 位十进制的限制下计算积分:

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx \quad (1-40)$$

利用关系式:

$$I_n = 5I_{n-1} = \frac{1}{n} \quad (1-41)$$

可得出算法:

$$\begin{cases} I_0 = \ln 6 - \ln 5 \approx 0.1823 \\ I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1} \quad (n = 1, 2, \cdots, n) \end{cases} \quad (1-42)$$

这个算法不具有数值稳定性,因为 $I_0 \approx 0.1823$ 的舍入误差传播到 I_1 时,该误差放大了 5 倍,传到 I_{100} 时,该误差将是 5^{100} 倍。利用估计式:

$$\frac{1}{6(n+1)} < I_n < \frac{1}{5(n+1)} \quad (1-43)$$

并取 $I_{100} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{1}{606} + \frac{1}{505} \right) \approx 0.001815$, 得出另一种算法:

$$\begin{cases} I_{100} \approx 0.001815 \\ I_{n-1} = \frac{1}{5} \left(\frac{1}{n} - I_n \right) \quad (n = 100, 99, \cdots, 1) \end{cases} \quad (1-44)$$

这个算法是稳定的,因为由 I_{100} 引起的误差在以后的计算过程中将逐渐减小。

本章小结

本章介绍了数值计算方法和误差的基本概念以及误差在近似计算中的传播规律。误差在数值计算中的危害是十分严重的,若不控制误差的传播与积累,则计算结果就会与真值有很大偏差,甚至将会完全淹没真值。因此误差的分析及防止其危害是数值计算中一个非常重要的问题,应当引起读者的充分注意。

在实际计算以及在计算机上所进行的运算中,参与运算的数都是有限位数,因此有效数