普通高等教育“十一五”规划教材

计算方法

第二版

◎ 同登科　周生田　张高民　编

中国石油大学出版社

普通高等教育“十一五”规划教材

计 算 方 法

（第二版）

同登科 周生田 张高民 编

中国石油大学出版社

内容简介

本书详细介绍了科学与工程计算中常用的数值计算方法。主要内容包括：误差分析、非线性方程的数值解法、线性方程组的直接解法和迭代解法、代数插值和曲线拟合、数值积分与微分和常微分方程数值方法等，每章均附有习题、复习题和数值实验题；第7章为上机实习，列出了本书中主要算法的C语言程序和具体计算实例。

本书可作为理工科大学非数学专业的教材或教学参考用书，也可供从事科学与工程计算的科技人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/同登科等主编. —2版. —东营：中国石油大学出版社，2009.5

ISBN 978-7-5636-2847-6

Ⅰ. 计… Ⅱ. 同… Ⅲ. 数值计算—高等学校—教材 Ⅳ. O241

中国版本图书馆CIP数据核字(2009)第071667号

书　　名：计算方法(第二版)
作　　者：同登科　周生田　张高民

责任编辑：宋秀勇(电话　0546—8392139)
封面设计：赵志勇

出 版 者：中国石油大学出版社(山东 东营 邮编 257061)
网　　址：http://www.uppbook.com.cn
电子信箱：yibian8392139@163.com
排 版 者：中国石油大学出版社排版中心
印 刷 者：沂南县汇丰印刷有限公司
发 行 者：中国石油大学出版社(电话　0546—8392139)
开　　本：180×235　印张：12.75　字数：256千字
版　　次：2009年7月第2版第1次印刷
定　　价：19.80元

前　言
PREFACE

本书在2000年第一版的基础上，根据几年来使用的情况，校订了部分印刷错误，并对部分内容做了修订，使得本书更适合作为非数学专业本科生的教材。

在编写本书的过程中，充分考虑了学生的知识水平，注重语言简洁流畅、通俗易懂。内容组织由浅入深，理论分析科学严谨，使学生能够循序渐进地掌握本课程的基本理论和分析解决问题的基本思路和技巧。本书加强了数值实验内容，自始至终贯穿一个基本理念，即在数学理论上等价的方法在实际数值计算上往往是不等效的，因此特别注重数值计算的实践。

修订后全书共分7章。第1章为绪论，第2章为非线性方程求根，第3章为线性方程组的直接解法和迭代解法，第4章为插值与曲线拟合，第5章为数值积分与微分，第6章为常微分方程初值问题的数值解法，第7章为上机实习，列出了本书中主要算法的C语言程序和具体计算实例。它是本书的又一特色，给教授本课程的教师和学生提供了一些训练的素材。全书讲授时数为32～48学时(也可增加16个学时的实验课)。

本书1、2、3章由周生田编写；第4、5章由同登科编写；第6章由张高民编写；第7章由刘珊编写。全书最后由同登科统稿。

学习本书所需要的数学基础是高等数学和线性代数。本书还附有一定数量的习题，通过这些习题可以加深对各章内容的理解，掌握必要的解题技巧。本书可作为理工科大学非数学专业的教材或数学参考用书，也可供从事科学与工程计算的科技人员参考。

承蒙中国石油大学出版社为本书的出版给予了大力的支持。我们希望使用本书的老师、同学及广大读者对本书予以批评指正。

编　者

2009年2月

目　录
CONTENTS

第1章 绪 论

1.1 计算方法的研究对象和特点

在科学实验和工程技术中,利用数学作为一种研究手段,大多数情况是希望通过数学讨论最终获得所需要的结果,即先把实际问题转化成数学问题,然后进行求解.一般来说,要想找出各种数学问题的精确解是很困难的,即使有些问题能够求出其精确解,但是计算过程繁琐,工作量大.因此我们有必要讨论求解各种数学问题近似解的方法.近似解又称数值解.计算方法就是研究数学问题的数值解及其理论的一个数学分支,它又称为计算数学或数值分析.

我们知道,计算必须依靠计算工具进行,但进行数学计算的工具所能执行的只是对具有一定数位的数进行加、减、乘、除四则运算,即使是现代的电子计算机也是如此.因此计算数学的主要内容是研究怎样把数学问题的求解运算归结为对有限数位数的四则运算.计算数学是计算机科学的重要内容,随着科学技术的发展和计算机的广泛应用,掌握计算数学的基本概念和研究计算机上常用的算法,对计算机使用者来说是非常必要的,只有掌握了各类数学问题的数值计算方法才能更好地使用计算机,才能更有效地解决实践中提出的各类数学问题.

计算方法是一门内容丰富,研究方法深刻,有自身理论体系的课程.它有以下特点:

(1) 面向计算机,要根据计算机特点提供实际可行的有效算法.

(2) 有可靠的理论分析,能任意逼近并达到精度要求,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,这都建立在相应数学理论的基础上.

(3) 要有好的计算复杂性,时间复杂性好是指节省时间,空间复杂性好是指节省存储量,这也是建立算法要研究的问题,它关系到算法能否在计算机上实现.

(4) 要有数值实验,即任何一个算法除了在理论上要满足上述三点外,还要通过数值实验证明是行之有效的.

求解一个数学问题可以采用不同的算法,每种算法都有自己的特点及适用范围.衡量一个算法的优劣可以根据运算量、存储量、收敛速度及误差大小等因素来确定.通常还要根据数学问题的实际背景来考虑.数学问题的数值解与精确解之间一般会有误差,研究数值解必须先讨论有关误差的知识,下面予以介绍.

1.2 误差及有关概念

一个物理量的真实值和计算的结果往往存在差异，它们的差称为误差．许多数值方法给出的解答仅仅是所要求的真解的某种近似，因而研究数值方法，必须注重误差分析，分析误差的来源，误差的传播情况以及对计算结果给出合理的误差估计．

一、误差的来源

误差的来源是多方面的，主要有以下几个方面：

1. 模型误差

用计算机解决科学计算问题首先要建立数学模型，它是对被描述的实际问题进行抽象、简化而得到的，是在一定条件下理想化，所以总要加上许多限制，忽略一些次要因素，简化许多条件，因而总是近似的，这就不可避免地要产生误差．我们把这种数学模型的解与实际问题的解之间出现的误差，叫做模型误差．只有实际问题提法正确，建立数学模型时又抽象、简化得合理，才能得到好的结果．

2. 观测误差

在数学模型中通常总包含有一些观测数据，如温度、长度、电压等，这些数据的值一般是由观测或实验得到的．由于观测手段的限制，得到的数据和实际大小之间必然有误差，这种观测产生的误差称为观测误差．

3. 截断误差（又称方法误差）

由实际问题建立起来的数学模型，在很多情况下要得到准确解是困难的．当数学模型不能得到准确解时，通常要用数值方法求它的近似解，如常把无限的计算过程用有限的计算过程代替，这种模型的准确解和数值方法的准确解之间的误差称为截断误差．

4. 舍入误差

在实际计算中遇到的数可能位数很多，甚至是无穷小数．如 π、$\sqrt{2}$、$\frac{1}{3}$ 等，由于数值计算是按有限位进行的，例如，用计算机做数值计算时，由于计算机位数有限，对超过位数的数字就要进行舍入．此外，在做乘法、除法时，得到的积和商都只能保留一定的位数，这也要进行舍入．这种由于在计算过程中对数进行舍入而引起的误差，称为舍入误差．例如，用 3.141 6 作 π 的近似值产生的误差就是舍入误差．

上述几种误差都会影响计算结果的准确性．由于计算方法是研究数学问题的数值解法，所以不讨论前两种误差，只讨论截断误差和舍入误差．

二、绝对误差与相对误差

1. 绝对误差与绝对误差限

定义 1　设 x 为准确值，x^* 为 x 的一个近似值，称 $e^*=x^*-x$ 为近似值 x^* 的

绝对误差，简称误差．

实际上准确值 x 通常无法得到，从而不可能得到 x^* 的绝对误差 e^* 的真值，只能根据测量工具或计算的情况估计出误差的绝对值的一个上界 ε^*，即

$$|e^*|=|x^*-x|\leqslant\varepsilon^*$$

这个正数 ε^* 通常叫做近似值 x^* 的绝对误差限. 有了绝对误差限，就可知道准确值 x 的范围

$$x^*-\varepsilon^*\leqslant x\leqslant x^*+\varepsilon^*$$

在工程上常用

$$x=x^*\pm\varepsilon^*$$

表示这个范围.

误差限 ε^* 越小，表示 x^* 越靠近 x，计算结果越准确. 但是在很多情况下绝对误差的大小还不能完全刻划一个近似值的准确程度，例如，测量 1 000 m 和 1 m 两个长度，若它们的绝对误差都是 1 cm，显然前者的测量比较准确．由此可见，决定一个量的近似值的精确度，除了考虑绝对误差的大小外，还要考虑该量本身的大小，为此引入相对误差的概念．

2. *相对误差与相对误差限*

定义 2 设 x 为准确值，x^* 为近似值，则称

$$e_r^*=\frac{e^*}{x}=\frac{x^*-x}{x}\qquad(x\neq0)$$

为近似值 x^* 的相对误差．

在实际计算中，由于准确值 x 一般无法得到，常将相对误差取成

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

相对误差常常无法得到，只能估计出它的大小范围．若有正数 ε_r^*，使

$$|e_r^*|=\left|\frac{e^*}{x^*}\right|\leqslant\varepsilon_r^*$$

则称 ε_r^* 为近似值 x^* 的相对误差限．

三、有效数字

为了可以从近似数的有限位小数表示本身就能知道近似数的精度，我们引入有效数字概念．大家知道，当 x 有很多位数字时，常按照“四舍五入”原则，取 x 的前几位数字作为 x 的近似值 x^*．

例如　$x=\sqrt{2}=1.414\ 213\ 562\ 37\cdots$

若只取到小数后四位数字得

$$x^*=1.414\ 2$$

其误差为 $0.000\ 013\ 56\cdots$，误差限为 $0.000\ 05=\frac{1}{2}\times10^{-4}$.

此时称 x^* 准确到小数后第四位，并称由此位算起的前五位数字 14142 为 x^* 的有效数字．

定义 3 设 x^* 为 x 的近似值，x^* 可以写成

$$x^* = \pm 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m$$

其中 x_1 是 1 到 9 中的一个数字；$x_2,\cdots,x_n$ 是 0 到 9 中的一个数字；m 为整数，且 x^* 的绝对误差为

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

则称 x^* 作为 x 的近似数具有 n 位有效数字；$x_1,x_2,\cdots,x_n$ 为 x^* 的有效数字.

显然，在 m 相同的情况下，n 越大，则 10^{m-n} 越小，故有效位数越多，绝对误差越小. 而且只要知道了有效数字位数，就容易写出它的绝对误差限.

例 1 按四舍五入原则写出下列各数具有五位有效数字的近似数：

187.932 5，0.037 855 51，8.000 033，2.718 281 8

解 按定义，上述各数具有五位有效数字的近似数分别是

187.93，0.037 856，8.000 0，2.718 3

注意 $x=8.000\ 033$ 的五位有效数字近似数是 8.000 0 而不是 8，因为 8 只有 1 位有效数字．

有效数字与相对误差限有如下关系：

定理 1 设 $x^* = \pm 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m \neq 0$ 是 x 的具有 n 位有效数字的近似值，则其相对误差限为

$$\varepsilon_r \leqslant \frac{1}{2x_1} \times 10^{1-n}$$

反之，若 x^* 的相对误差限为

$$\varepsilon_r \leqslant \frac{1}{2(x_1+1)} \times 10^{1-n}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字.

证明 设近似数 x 具有 n 位有效数字，绝对误差限为

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

$$|x^*| = 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m$$

故有

$$x_1 \times 10^{m-1} \leqslant |x^*| \leqslant (x_1+1) \times 10^{m-1}$$

所以相对误差限为

$$|e_r^*| = \left|\frac{x^* - x}{x^*}\right| \leqslant \frac{1}{2x_1} \times 10^{1-n}$$

其中 $x_1 \neq 0$ 是 x^* 的第一位有效数字，上式说明，有效位数越多，相对误差越小，且只要知道近似值 x^* 的有效位数 n 和第一个非零数字 x_1，就能写出它的相对误差限．

反之，由 $$|x^*-x|=|x^*|\cdot\frac{|x^*-x|}{|x^*|}=|x^*|\cdot|e_r^*|$$

因为 $$|x^*|\leqslant(x_1+1)\times10^{m-1}$$

$$|e_r^*|\leqslant\frac{1}{2(x_1+1)}\times10^{1-n}$$

故 $$\begin{aligned}|e^*|&=|x^*-x|=|x^*|\cdot|e_r^*|\\&\leqslant(x_1+1)\times10^{m-1}\times\frac{1}{2(x_1+1)}\times10^{1-n}\\&=\frac{1}{2}\times10^{m-n}\end{aligned}$$

所以 x^* 至少有 n 位有效数字．

四、数值运算的误差估计

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

$$\varepsilon(x_1{}^*\pm x_2{}^*)=\varepsilon(x_1{}^*)+\varepsilon(x_2{}^*)$$

$$\varepsilon(x_1{}^*\cdot x_2{}^*)\approx|x_1{}^*|\cdot\varepsilon(x_2{}^*)+|x_2{}^*|\cdot\varepsilon(x_1{}^*)$$

$$\varepsilon(x_1{}^*/x_2{}^*)\approx\frac{|x_1{}^*|\cdot\varepsilon(x_2{}^*)+|x_2{}^*|\cdot\varepsilon(x_1{}^*)}{|x_2^*|^2}\quad(x_2^*\neq0)$$

更一般情况，当自变量有误差时计算函数值也产生误差，其误差限可利用函数的泰勒展开式进行估计. 设 $f(x)$是一元函数，x 的近似值为 x^*，以 $f(x^*)$近似 $f(x)$，其误差界记作 $\varepsilon(f(x^*))$，泰勒展式为

$$f(x)-f(x^*)=f'(x^*)(x-x^*)+\frac{f''(\xi)}{2}(x-x^*)^2$$

ξ 介于 x,x^* 之间．

取绝对值得

$$|f(x)-f(x^*)|\leqslant|f'(x^*)|\varepsilon(x^*)+\frac{|f''(\xi)|}{2}\varepsilon^2(x^*)$$

假定 $f'(x^*)$与 $f''(x^*)$的比值不太大，可忽略 $\varepsilon(x^*)$的高阶项，于是可得计算函数的误差限为

$$\varepsilon(f(x^*))\approx|f'(x^*)|\varepsilon(x^*)$$

当 f 为多元函数时，如计算 $A=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，若 $x_1,\cdots,x_n$ 的近似值为 $x_1{}^*,\cdots,x_n{}^*$，则 A 的近似值为 $A^*=f(x_1{}^*,\cdots,x_n{}^*)$，于是函数值 A^* 的误差 $e(A^*)$由泰勒展开得

$$\begin{aligned}e(A^*)&=A^*-A=f(x_1{}^*,\cdots,x_n{}^*)-f(x_1,\cdots,x_n)\\&\approx\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f(x_1{}^*,\cdots,x_n{}^*)}{\partial x_k}\right)(x_k{}^*-x_k)\end{aligned}$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^* e_k^*$$

于是误差限为

$$\varepsilon(A^*) \approx \sum_{k=1}^{n} \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^* \right| \varepsilon(x_k^*)$$

而 A^* 的相对误差限为

$$\varepsilon_r^* = \varepsilon_r(A^*) = \frac{\varepsilon(A^*)}{A^*} \approx \sum_{k=1}^{n} \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^* \right| \frac{\varepsilon(x_k^*)}{|A^*|}$$

例 2 已测得某场地长 l 的值为 $l^* = 110$ m，宽 d 的值为 $d^* = 80$ m，已知 $|l-l^*| \leqslant 0.2$ m，$|d-d^*| \leqslant 0.1$ m，试求面积 $S=ld$ 的绝对误差限与相对误差限．

解 因为 $S=ld$，则$\frac{\partial S}{\partial l}=d, \frac{\partial S}{\partial d}=l$，则

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

其中

$$\left(\frac{\partial S}{\partial l}\right)^* = d^* = 80 \text{ m}, \left(\frac{\partial S}{\partial d}\right)^* = l^* = 110 \text{ m}$$

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

于是绝对误差限为

$$\varepsilon(S^*) \approx 80 \times 0.2 + 110 \times 0.1 = 27 \ (\text{m}^2)$$

相对误差限为

$$\varepsilon_r(S^*) = \frac{\varepsilon(S^*)}{|S^*|} = \frac{\varepsilon(S^*)}{l^* d^*} \approx \frac{27}{8\ 800} = 0.31\%$$

1.3 数值计算中应注意的几个问题

由以上讨论可以看出，误差分析在数值计算中是一个很重要又很复杂的问题. 因为在数值计算中每一步运算都可能产生误差，而一个科学计算问题的解法，往往要经过成千上万次计算，如果每一步运算都分析误差，显然是不可能的，其实也是不必要的．人们经常这样做，通过对误差的某些传播规律的分析，指出在数值计算中应注意的一些问题，有助于鉴别计算结果的可靠性并防止误差危害现象的产生.

1. *要避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法*

用绝对值小的数作除数舍入误差会增大，如计算$\frac{x}{y}$，若 $0<|y| \ll |x|$，则可能对计算结果带来严重影响，应尽量避免．

例 3 线性代数方程组

$$\begin{cases}0.000\,01x_1+x_2=1\\ \quad\quad 2x_1+x_2=2\end{cases}$$

的准确解为

$$x_1=\frac{200\,000}{399\,999}=0.500\,001\,25$$

$$x_2=\frac{199\,998}{199\,999}=0.999\,995$$

现在四位浮点十进制数(仿机器实际计算)下用消去法求解,上述方程组可写为

$$\begin{cases}10^{-4}\times 0.100\,0x_1+10^1\times 0.100\,0x_2=10^1\times 0.100\,0\\ 10^1\times 0.200\,0x_1+10^1\times 0.100\,0x_2=10^1\times 0.200\,0\end{cases}$$

若用$\frac{1}{2}(10^{-4}\times 0.100\,0)$除第一方程减第二方程,则出现用小的数除大的数,得到

$$\begin{cases}10^{-4}\times 0.100\,0x_1+10^1\times 0.100\,0x_2=10^1\times 0.100\,0\\ 10^6\times 0.200\,0x_2=10^6\times 0.200\,0\end{cases}$$

由此解出

$$x_1=0,\quad x_2=10^1\times 0.100\,0=1$$

显然严重失真.

若反过来用第二个方程消去第一个方程中含 x_1 的项,则避免了大数被小数除,得到

$$\begin{cases}10^6\times 0.100\,0x_2=10^6\times 0.100\,0\\ 10^1\times 0.200\,0x_1+10^1\times 0.100\,0x_2=10^1\times 0.200\,0\end{cases}$$

由此求得相当好的近似解

$$x_1=0.500\,0,\quad x_2=10^1\times 0.100\,00$$

2. *要避免两相近数相减*

在数值计算中两相近数相减会造成有效数字严重损失.

如 $x=532.65$,$y=532.52$ 都具有五位有效数字,但 $x-y=0.13$只有两位有效数字.这说明必须尽量避免出现这类运算,最好是改变计算方法,防止这种现象发生.

例 4 计算 $A=10^7(1-\cos 2°)$(用四位数学表).

解 由于 $\cos 2°=0.999\,4$,直接计算:

$$A=10^7(1-\cos 2°)=10^7(1-0.999\,4)=6\times 10^3$$

只有一位有效数字.若利用 $1-\cos x=2\sin^2\frac{x}{2}$,则

$$A=10^7(1-\cos 2°)=10^7\times 2\times(\sin 1°)^2=6.13\times 10^3$$

具有三位有效数字($\sin 1°=0.017\,5$).

此例说明,可通过改变计算公式避免或减少有效数字的损失.

若 x 和 y 很接近时

$$\lg x-\lg y=\lg \frac{x}{y}$$

采用等号右端的算法．

若 x 很大时

$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$$

亦采用右边的算法．

一般，当 $f(x)\approx f(x^*)$时，可用泰勒展开

$$f(x)-f(x^*)=f'(x^*)(x-x^*)+\frac{f''(x^*)}{2!}(x-x^*)^2+\cdots$$

取右端的有限项近似左端．若无法改变算法，直接计算时就要多保留几位有效数字．

3. 要防止大数“吃掉”小数的现象

在数值计算中参与运算的数的数量级有时相差很大，而在计算机上做加、减法时要“对阶”，当绝对值相差很大的两个数进行加、减运算时，绝对值较小的那个数往往被另一个数“吃掉”而不能发挥其作用，这样就会严重影响计算结果的准确性，所以要采取相应的措施，以保证计算结果的准确性. 下面用具体例子来说明．

例 5　在五位十进制计算机上，计算

$$A=51\ 234+\sum_{i=1}^{1\ 000}\delta_i,\quad 其中\ 0.1\leqslant\delta_i\leqslant 0.9$$

解　先把参加运算的数写成规格化形式

$$51\ 234=0.512\ 34\times 10^5$$

由于在计算机中两数相加时，要先对阶，即把两数都写成绝对值小于 1 而阶码相同的数. 若取 $\delta_i=0.9$，对阶时 $\delta_i=0.000\ 009\times 10^5$，由于计算机只能表示五位小数，所以

$$\begin{aligned}A&=0.512\ 34\times 10^5+0.000\ 009\times 10^5+\cdots+0.000\ 009\times 10^5\\&\triangleq 0.512\ 34\times 10^5(符号\triangleq表示机器中相等)\end{aligned}$$

这一结果显然不可靠，这是由于对阶时出现了大数 51 234“吃掉了”小数 δ_i 的结果．如果计算时先把数量级相同的一千个 δ_i 相加，最后再加 51 234，就不会出现大数“吃掉”小数的现象．这时

$$\sum_{i=1}^{1\ 000}\delta_i=0.9\times 10^3$$

于是

$$A=0.512\ 34\times 10^5+0.009\ 00\times 10^5=52\ 134$$

所以在数值计算中，应先分析计算方案的数量量级，编程序时加以合理安排，使重要

的物理量不致于在计算过程中被"吃掉".

4. 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,不但可节省计算机的计算时间,还能减少舍入误差,这是数值计算中必须遵从的原则.

例 6 计算 x^{255} 的值.

解 如果逐个相乘要用 254 次乘法,但若写成

$$x^{255}=x\cdot x^2\cdot x^4\cdot x^3\cdot x^{16}\cdot x^{32}\cdot x^{64}\cdot x^{128}$$

只须做 14 次乘法运算即可.

又如计算多项式:

$$p_n(x)=a_nx^n+a_{n-1}x_{n-1}+\cdots+a_1x+a_0$$

的值,若直接计算 a_kx^k 再逐项相加,一共需做

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

次乘法和 n 次加法. 若采用秦九韶算法

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

只要 n 次乘法和 n 次加法就可算出 $p_n(x)$的值.

5. 要使用数值稳定的算法

所谓算法,就是给定一些数据,按着某种规定的次序进行计算的一个运算序列. 它是一个近似的计算过程,我们选择一个算法,主要要求它的计算结果能达到给定的精确度.

一般而言,在计算过程中初始数据的误差和计算中产生的舍入误差总是存在的,而数值解是逐步求出的,前一步数值解的误差必然要影响到后一步数值解. 我们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,否则是数值不稳定的. 只有稳定的数值方法才可能给出可靠的计算结果,不稳定的数值方法毫无实用价值. 下面举例说明.

例 7 计算积分 $I_n=\int_0^1 x^n e^{x-1}dx \ (n=0,1,2,\cdots,9)$.

解 由分部积分法可得:

$$\begin{aligned}I_n&=\int_0^1 x^n e^{x-1}dx=x^n e^{x-1}\Big|_0^1-n\int_0^1 x^{n-1}e^{x-1}dx\\&=1-nI_{n-1} \qquad (n=1,2,\cdots)\end{aligned}$$

由于

$$I_0=\int_0^1 e^{x-1}dx=1-e^{-1}\approx 0.632\,1 \triangleq I_0^*$$

以 I_0^* 为初值可以得出如下逆推公式：

$$\begin{cases} I_0^* = 0.632\ 1 \\ I_n^* = 1 - nI_{n-1}^* \end{cases} \quad (n=1,2,\cdots,9)$$

依次代入，计算结果为：

$I_1^* = 0.367\ 9$， $I_2^* = 0.264\ 2$， $I_3^* = 0.207\ 4$， $I_4^* = 0.170\ 4$，

$I_5^* = 0.148\ 0$， $I_6^* = 0.112\ 0$， $I_7^* = 0.216\ 0$，

$I_8^* = -0.728\ 0$， $I_9^* = 7.552\ 0$

由 I_n 的表达式易知：

① $I_n > 0$；

② $I_n < I_{n-1}$.

但上面的计算结果却并不都是这样，为什么会造成这样错误的结果呢？

主要原因是在计算初值 I_0^* 时产生了舍入误差（$I_0 = 0.632\ 120\ 558\cdots$，实际上仅取四位有效数字），误差约为 $0.205\ 6\times10^{-4}$，舍入误差在后继的计算过程中不断传播，不断增大，从而导致错误结果.

事实上，由

$$I_n = 1 - nI_{n-1}\text{（理论递推公式）}$$

$$I_n^* = 1 - nI_{n-1}^*\text{（实际计算公式）}$$

相减，得

$$\begin{aligned} I_n - I_n^* &= -n(I_{n-1} - I_{n-1}^*) = (-1)^2 n(n-1)(I_{n-2} - I_{n-2}^*) \\ &= \cdots = (-1)^n n!(I_0 - I_0^*) \end{aligned}$$

由此可见，若 I_0^* 的误差为 $0.205\ 6\times10^{-4}$，则 I_n^* 的误差约为 $(n!)\times0.205\ 6\times10^{-4}$，所以计算 I_9^* 时产生的误差约为 $(9!)\times0.205\ 6\times10^{-4}$.

由此可见，误差的传播速度非常快.

那么碰到这样的问题应当怎么办呢？如果我们从另外一个角度考虑这个问题，即将递推公式改写为

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

按照这个公式进行计算（从后向前），I_n 的误差缩小为原来的 $\frac{1}{n}$.

所以按公式 $I_{n-1}^* = \frac{1}{n}(1 - I_n^*)$ 进行计算，在求 I_{n-1}^* 时 I_n^* 的误差影响较小. 为了利用上述公式，先求 I_{10}^* 的某个初值.

由于

$$I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx < \int_0^1 x^n dx = \frac{1}{n+1}$$