



JISUAN FANGFA 计算方法

主编 李铭明 江开忠

欢迎网上购书

本社网址：<http://www.dhupress.net>

天猫旗舰店：<http://dhdx.tmall.com>

责任编辑 / 杜亚玲

文字编辑 / 刘红梅

封面设计 / 潘志远

ISBN 978-7-5669-0323-5



9 787566 903235 >

定价:36.00元

计 算 方 法

主编 李铭明 江开忠

编者 郑中团 俞卫琴

東華大學出版社

内容简介

本书是编者在多年从事计算方法课程教学经验的基础上编写的. 全书共分七章, 内容包括计算方法的基本概念及应用软件——Matlab, 详细介绍了函数插值法的基本概念、各种插值方法和数值积分的各种插值型求积公式, 函数逼近的基本概念及包括曲线拟合的最小二乘法在内的基本逼近方法, 阐述了矩阵分解法、迭代法的基本概念和相应应用以及泰勒级数法的相关内容.

本书适用于普通高校理工类本科专业学生和非数学类研究生, 也可为科学技术和工程技术人员提供学习参考.

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/李铭明, 江开忠主编. —上海: 东华大学出版社,
2013. 7

ISBN 978-7-5669-0323-5

I. ①计… II. ①李…②江… III. ①计算方法 IV.
①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 162505 号

责任编辑: 杜亚玲

文字编辑: 刘红梅

封面设计: 潘志远

计算方法

李铭明 江开忠 主编

出版: 东华大学出版社(上海市延安西路 1882 号, 200051)

本社网址: <http://www.dhupress.net>

天猫旗舰店: <http://dhdx.tmall.com>

营销中心: 021-62193056 62373056 62379558

印刷: 苏州望电印刷有限公司

开本: 710 mm×1 000 mm 1/16

印张: 17.5

字数: 360 千字

版次: 2013 年 7 月第 1 版

印次: 2013 年 7 月第 1 次印刷

书号: ISBN 978-7-5669-0323-5/O·015

定价: 36.00 元

前 言

随着计算机技术与计算数学的发展,数值计算的很多原理和基本方法越来越广泛地被应用到科学计算的各个领域.各领域的科学技术人员很需要利用计算机进行各种模型和问题的数值计算方法.

计算方法是我校计算机专业等理工类学生的一门重要基础课程,在培养学生的科学思维、数值方法、计算机应用能力、创新能力中有着举足轻重的作用.本教材按照算法的不同分类安排相应的内容,适当改变了传统教材以内容为主的章节安排,这种安排能够针对同一种算法,通过不同的教学内容来体现相应的应用,使学生能够掌握算法的精髓.全书共分七章,分别介绍了计算方法课程所用到的基本概念及应用软件,函数插值法的基本概念、各种插值方法以及数值积分的各种插值型求积公式,函数逼近的基本概念及包括曲线拟合的最小二乘法在内的基本逼近方法,矩阵分解法,迭代法的基本概念及相应应用,泰勒级数法的相关内容.

感谢上海工程技术大学基础教学学院李路副院长对本书的编写提出的宝贵意见和建议.

感谢上海工程技术大学数学教学部赵德钧教授对本书的编写给予的支持和帮助.

参与本书编写的老师还有上海工程技术大学数学教学部的肖翔老师,深表感谢.

由于编者的水平有限,本书的缺点和错误在所难免,敬请各位读者批评指正.

编 者

目 录

第一章 绪论	1
1.1 计算方法课程的基本概念	1
1.2 误差的基本概念	3
1.2.1 误差及分类	3
1.2.2 绝对误差与相对误差	3
1.2.3 有效数字	4
1.3 设计算法的注意问题	6
1.3.1 选用稳定的算法	6
1.3.2 注意简化计算步骤,减少运算次数	8
1.3.3 要避免两个相近数相减	9
1.3.4 要避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法	10
1.3.5 要注意浮点运算的特点,防止大数“吃掉”小数	11
1.3.6 计算过程中应十分小心地处理病态的数学问题	11
1.4 向量与矩阵的范数	12
1.4.1 向量范数	12
1.4.2 矩阵范数	15
1.5 软件 MATLAB 介绍	19
1.5.1 MATLAB 的工作环境	19
1.5.2 搜索路径与扩展	21
1.5.3 MATLAB 的帮助系统	21
1.5.4 MATLAB 绘图及程序设计	22
第二章 插值法	29
2.1 插值法的基本概念	29
2.2 函数插值逼近	30

2.2.1	拉格朗日插值法	30
2.2.2	牛顿插值公式	36
2.2.3	埃尔米特(Hermite)插值	43
2.2.4	分段低次插值	47
2.2.5	三次样条插值	50
2.3	数值积分的插值型求积公式	55
2.3.1	梯形公式、辛普生公式与柯特斯公式	55
2.3.2	龙贝格求积公式	62
2.3.3	高斯型求积公式	65
2.3.4	重积分数值求积公式	68
2.4	数值微分的插值型求导公式	71
2.4.1	两点公式	72
2.4.2	三点公式	72
第三章	逼近法	76
3.1	函数逼近	76
3.1.1	函数逼近的基本概念	76
3.1.2	正交多项式	80
3.1.3	最佳一致逼近	86
3.1.4	最佳平方逼近	90
3.2	曲线拟合的最小二乘法	94
3.2.1	基本原理	94
3.2.2	线性最小二乘拟合	95
3.2.3	非线性最小二乘拟合	100
3.3	超定方程组的最小二乘解	102
第四章	矩阵分解法	106
4.1	矩阵分解	106
4.1.1	矩阵的三角分解	106
4.1.2	矩阵的 QR 分解	117
4.1.3	矩阵的 SVD 分解	129

4.2 线性方程组的直接算法	132
4.2.1 直接三角分解法	133
4.2.2 平方根法(Cholesky 分解)	134
4.2.3 三对角方程组	135
4.3 矩阵特征值问题计算	137
4.3.1 引言	137
4.3.2 雅可比方法	142
4.3.3 QR 方法	147
第五章 迭代法	160
5.1 迭代法的基本概念	160
5.2 线性方程组迭代数值解	162
5.2.1 雅可比迭代法	163
5.2.2 高斯-赛德尔迭代法	164
5.2.3 超松弛迭代法	167
5.3 非线性方程迭代数值解	183
5.3.1 迭代法及其收敛性	184
5.3.2 迭代法的加速收敛	192
5.3.3 牛顿(Newton)迭代法	197
5.3.4 非线性方程组数值解	204
5.4 矩阵的特征值与特征向量迭代数值解	211
5.4.1 幂法	211
5.4.2 反幂法	219
第六章 泰勒展式法	226
6.1 Taylor 公式	226
6.1.1 一元函数的 Taylor 公式	226
6.1.2 多元函数的 Taylor 公式	228
6.2 数值微分	228
6.2.1 差商公式	229
6.2.2 变步长中点方法	230

6.2.3 Richardson 外推加速法	231
6.3 龙贝格数值积分	232
6.3.1 梯形公式的余项展开式	233
6.3.2 龙贝格算法	237
6.4 常微分方程初值问题数值解法	244
6.4.1 泰勒级数法	244
6.4.2 欧拉(Euler)方法	246
6.4.3 龙格-库塔法	251
6.4.4 线性多步法	257
6.4.5 一阶微分方程组与高阶微分方程的数值解法	261
习题答案	266
参考文献	270

第一章 绪 论

现代科学技术问题的研究方法可分为三种:理论推导、科学实验和科学计算.这三种方法相辅相成,又相互独立且缺一不可.科学计算就是通过建立数学模型把科学技术问题转化为数学问题,然后对数学问题进行离散化,将其转化为数值问题,最后使用数值计算方法计算出数值问题的解,并把所得的解作为原科学技术问题的解.随着电子技术的发展和科学研究、生产实践的需要,电子计算机的使用日益广泛.计算机作为科学计算的主要工具越来越不可缺少,因而要求研究适合计算机使用的数值计算方法.为了更具体地说明数值计算方法的研究对象,我们考察用计算机解决科学计算问题的一般过程,可以概括为:

实际问题→数学模型→计算方法→程序设计→上机计算.

由实际问题应用有关科学知识和数学理论建立数学模型这一过程,通常作为应用数学的任务.而根据数学模型提出求解的计算方法直到编出程序上机算出结果,进而对计算结果进行分析,这一过程则是计算数学的任务,也是数值计算方法的研究对象.因此,计算方法就是研究用计算机解决数学问题的数值方法及其理论.它的内容包括:误差理论、线性与非线性方程(组)的数值解、矩阵的特征值与特征向量计算、曲线拟合与函数逼近、插值方法、数值积分与数值微分、常微分方程与偏微分方程数值解等.

1.1 计算方法课程的基本概念

计算方法是一门与计算机使用密切结合的实用性很强的数学课程,它既有纯数学的高度抽象性与严密科学性的特点,又有应用广泛性与实际试验的高度技术性的特点.例如,考虑线性方程组的解,在线性代数中,只介绍解的存在唯一性及有关理论和精确解法,用这些理论和方法还不能直接在计算机上求解.我们知道,用克莱姆(Cramer)法则求解一个 n 元线性方程组,要求 $n+1$ 个 n 阶行列式,总共需要进行 $(n-1)(n+1)n!$ 次乘法,当 n 充分大时,计算量是相当惊人的.如一个20元(不算太大)的方程组大约要做 10^{20} 次乘法,这项计算即使使用每秒百亿次的电子

计算机去做,也要连续工作数千年才能完成,当然这是完全没有实际意义的.而如果用消元法,求解一个 n 元线性方程组大约需要 $\frac{1}{3}n^3 + n^2$ 次乘法,一个 20 元的方程组即使用一台小型计算器也能很快解出来.这一简单的例子告诉我们,能否正确地制定算法,是科学计算成败的关键.另外,要求解这类问题还应根据方程特点,研究适合计算机使用的满足精度要求的,计算时间节省的有效算法及其相关理论.在实现这些算法时往往还要根据计算机容量、字长、速度等指标,研究具体求解步骤和程序设计技巧.有的方法在理论上虽不够严密,但通过实际计算,对比分析等手段,证明是行之有效的方法,也应该采用,这些都是数值计算方法应有的特点.概括起来有四点:

第一,面向计算机.要根据计算机特点提供实际可行的有效算法,即算法只能包括加、减、乘、除运算和逻辑运算,是计算机能直接处理的.

第二,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,这些都建立在相应数学理论上.

第三,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.

第四,要有数值实验.即任何一个算法除了从理论上要满足上述三点外,还要通过数值试验证明是行之有效的.

下面再通过一个例子直观地来说明算法选取的重要性.

例如,计算 $T = \left[\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1} \right]^3$, 通过计算机可知其结果为 $T=0.005\ 050\ 633\ 883\ 34\dots$,

经过变换, T 可以根据以下三种公式计算: (1) $T_1 = (\sqrt{2}-1)^6$; (2) $T_2 = 99 - 70\sqrt{2}$; (3) $T_3 = \left[\frac{1}{\sqrt{2}+1} \right]^6$.

如果 $\sqrt{2}$ 取精确值,则三个式子的结果是相等的.但在实际计算中,由于计算机的位数有限, $\sqrt{2}$ 只能取近似值.对 $\sqrt{2}$ 取相同的近似值,可以发现三个式子的计算结果是不相同的,见下表:

算法	计算结果与误差	
	$\sqrt{2} \approx 1.4$	$\sqrt{2} \approx 1.414$
$T_1 = (\sqrt{2}-1)^6$	0.004 096	0.005 035 03 ...
$T_2 = 99 - 70\sqrt{2}$	1	0.02
$T_3 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}+1} \right)^6$	0.005 232 78 ...	0.005 053 32 ...

从表中可知,对不同的近似值,三种算法的结果均不相同.与精确值比较可知, T_1 和 T_3 比较接近精确值,而 T_2 的结果相差甚远.因此,近似值和算法的选取对计算结果的精度影响很大.

综上所述,计算方法研究的是用计算机解决数学问题的方法和理论.其核心内容:一是算法的设计,即解题方案的准确描述;二是包括算法的稳定性、收敛性、计算速度和计算量等的分析;三是如何提高精度,减小误差.本章将主要介绍这几方面的内容.

1.2 误差的基本概念

1.2.1 误差及分类

误差是某个变量的精确值与近似值之间的差异的度量.在科学计算中,误差来源一般有以下四个方面:

(1) **模型误差**:由实际问题抽象、简化为数学问题,建立数学模型时造成的误差.

(2) **观测误差**:由于测量工具的限制或者在数据的观测时由于随机因素引起的误差.

(3) **截断误差**:数学模型的精确解和数值计算方法的近似解之间的误差.通常是由有限代替无限的过程引起的.如 $e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots$,用 $1+x$ 作为 e^x 的近似值,产生截断误差为 $\frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots$.

(4) **舍入误差**:由于计算机所表示的位数有限,通常用四舍五入的办法取近似值,由此引起的误差.如 $\pi \approx 3.1415926\cdots$,用3.1416作为 π 的近似值,产生的舍入误差为 $-0.0000073\cdots$.

根据误差来源,可以将误差分为两类:一类是固有误差,包括模型误差和观测误差;另一类是计算误差,包括截断误差和舍入误差.计算方法课程所考虑的主要是计算误差.

1.2.2 绝对误差与相对误差

定义 1.2.1 设 x 为精确值, x^* 为 x 的一个近似值,称 $E(x^*) = x - x^*$ 为近似值 x^* 的**绝对误差**,简称**误差**,且可简记为 E . $|E(x^*)|$ 的大小标志着 x^* 的近似程度, $|E(x^*)|$ 越小说明 x^* 的精确程度越高.由于精确值 x 一般无法得到,从

而绝对误差 $E(x^*)$ 也是无法求得的. 在实际测量计算时, 常常根据实际情况估计出 $|E(x^*)|$ 的大小范围, 即设法得到一个适当小的正数 ϵ , 使得 $|E| = |x - x^*| \leq \epsilon$, 称 ϵ 为绝对误差限(简称误差限). 显然有 $x^* - \epsilon \leq x \leq x^* + \epsilon$. 通常用 $x = x^* \pm \epsilon$ 表示精确值的范围. 一个近似值的绝对误差限不唯一, 通常取满足 $|x - x^*| \leq 0.5 \times 10^n$ 的最小值.

注意: 绝对误差和绝对误差限通常是有量纲的.

在实际问题中, 判断一个近似值的精确程度不仅要观察绝对误差的大小, 还应考虑数据本身的大小. 所以常常用相对误差来衡量一个数据的精确程度.

定义 1.2.2 近似值 x^* 的绝对误差与精确值 x 之比 $E_r(x^*) = \frac{x - x^*}{x}$ ($x^* \neq 0$) 称为近似值 x^* 的相对误差, 可简记为 E_r . 显然绝对误差 $E(x^*)$ 和相对误差 $E_r(x^*)$ 的关系为 $E_r(x^*) = \frac{E(x^*)}{x}$. 若设法得到一个适当小的正数 η , 使得 $|E_r(x^*)| = \left| \frac{x - x^*}{x} \right| \leq \eta$, 称 η 为近似值 x^* 的相对误差限.

与绝对误差类似, 由于精确值 x 未知, 相对误差也是无法求得的, 但实际中常以下式计算相对误差: $E_r(x^*) = \frac{E(x^*)}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*}$.

注意: 相对误差和相对误差限没有量纲.

【例 1.2.1】 已知月球到地球的平均距离 $x = 38\,440\,000 \pm 2\,000(\text{m})$, 某条街道的长度为 $y = 1\,000 \pm 10(\text{m})$. 则近似值 x^* 和 y^* 的绝对误差限分别为 $\epsilon(x^*) = 2\,000 \text{ m}$ 和 $\epsilon(y^*) = 10 \text{ m}$. 根据绝对误差的概念, x^* 的精度比 y^* 低. x^* 和 y^* 的相对误差限分别为 $\eta(x^*) = \frac{2\,000}{38\,440\,000} \leq \frac{1}{10\,000}$ 和 $\eta(y^*) = \frac{1}{100}$. 根据相对误差的概念, x^* 的精度比 y^* 高.

实际计算中, 常常用相对误差来衡量一个近似值的精度.

1.2.3 有效数字

当精确值 x 有多位数字时, 常常按四舍五入的原则得到 x 的有限位数的近似值 x^* , 例如 $\pi = 3.141\,592\,6\cdots$, 取 3 位有效数字时, $\pi_3^* = 3.14$, 绝对误差 $|\epsilon(\pi_3^*)| = 0.001\,592\,6\cdots$. 取 5 位有效数字时, $\pi_5^* = 3.141\,6$, 绝对误差 $|\epsilon(\pi_5^*)| = 0.000\,007\,3\cdots$. 它们的误差都没有超过近似值的末位数字的半个单位, 即

$$|\pi - \pi_3^*| \leq 0.5 \times 10^{-2}, \quad |\pi - \pi_5^*| \leq 0.5 \times 10^{-4}.$$

定义 1.2.3 如果近似值 x^* 的误差的绝对值不超过某一位数字的半个单位,

该位数字到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位, 则称用 x^* 近似 x 时具有 n 位有效数字, 简称 x^* 有 n 位有效数字.

例如, $\pi_3^* = 3.14$ 和 $\pi_5^* = 3.1416$ 作为 π 的近似值分别具有 3 位和 5 位的有效数字.

定义 1.2.4 如果近似值 x^* 写成标准形式 $x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^k$, 且满足不等式 $|x^* - x| \leq 0.5 \times 10^{k-n}$, 则称 x^* 有 n 位有效数字. 其中 a_i 为 0 到 9 中的某一数字, 且 $a_1 \neq 0$.

在 k 相同的情形下, n 越大, 则 10^{k-n} 越小, x^* 的误差限越小, 故一般有效数字位数越多, 绝对误差限越小.

【例 1.2.2】 设 $x = \lg 2 = 0.301\,02\cdots$, $x^* = 0.301\,0$, $y = e^2 = 7.389\,056\cdots$, $y^* = 7.38$, 求近似值各有多少个有效数字?

解 $\varepsilon(x^*) = |x - x^*| = 0.000\,02\cdots \leq 0.5 \times 10^{-4}$, 小于万分位的半个单位, 因此, $x^* = 0.301\,0$ 的小数点后的数字均为有效数字, 故 x^* 有 4 个有效数字. $\varepsilon(y^*) = |y - y^*| = 0.009\,056\cdots \leq 0.5 \times 10^{-1}$, 小于十分位的半个单位, 因此, $y^* = 7.38$ 个位和十分位的数字为有效数字, 百分位的数字不是有效数字, 故 y^* 有 2 个有效数字.

下面讨论相对误差与有效数字的关系.

定理 1.2.1 设 x^* 写成标准格式: $x^* = \pm 10^k \times 0.a_1a_2\cdots a_n$ (其中 $a_1 \neq 0$) 是 x 的近似值, (1) 如果 x^* 有 n 位有效数字, 则 x^* 的相对误差限为 $|E_r^*| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$; (2) 若 x^* 的相对误差限为 $|E_r^*| \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1}$, 则 x^* 至少有 n 位有效数字.

证明 (1) 由 x^* 的标准化格式得 $10^{k-1} \times a_1 \leq |x^*| \leq 10^{k-1} \times (a_1+1)$, 当 x^* 有 n 位有效数字时, $|E_r^*| = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{0.5 \times 10^{k-n}}{a_1 \times 10^{k-1}} \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$, 结论得证.

(2) 由 $10^{k-1} \times a_1 \leq |x^*| \leq 10^{k-1} \times (a_1+1)$ 知

$$\begin{aligned} |x - x^*| &\leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} \times x^* \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} \\ &\quad \times 10^{k-1} \times (a_1+1) = 0.5 \times 10^{k-n}. \end{aligned}$$

根据有效数字的定义, x^* 至少有 n 位有效数字. ■

【例 1.2.3】 已知近似数 x^* 有两位有效数字, 求其相对误差限.

解 不妨记近似数 $x^* = 0.a_1a_2\cdots a_m \times 10^k$, 因为 x^* 有两位有效数字, 所以绝对误差 $E(x^*) \leq 0.5 \times 10^{k-2}$, 故相对误差

$$|E_r(x^*)| = \left| \frac{E(x^*)}{x^*} \right| \leq \frac{0.5 \times 10^{k-2}}{0.a_1 a_2 \cdots a_m \times 10^k} \leq \frac{0.5 \times 10^{k-2}}{0.1 \times 10^k} = 0.05,$$

其中 x^* 的第一位有效数字 a_1 未知, 按第一位有效数字出现的最不利的情况估计. 故 x^* 的相对误差限为 5%.

1.3 设计算法的注意事项

由上述讨论可知, 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决, 往往要经过成千上万次运算, 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. 人们经常通过对误差的某传播规律的分析, 指出在数值计算中应该注意的一些原则, 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, 下面我们给出在数值计算中应该注意的一些原则.

1.3.1 选用稳定的算法

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的精度. 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.

【例 1.3.1】 求 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx$ ($n=0, 1, 2, \dots, 8$) 的值.

解 由于

$$I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n},$$

初值为

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln 6 - \ln 5 = \ln(1.2).$$

于是可建立递推公式

$$\begin{cases} I_0 = \ln(1.2), \\ I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1}, \quad (n=1, 2, \dots, 8). \end{cases} \quad (1.3.1)$$

若取 $I_0 = \ln(1.2) \approx 0.182$, 按 (1.3.1) 式就可以逐步算得

$$\begin{aligned} I_1 &= 1 - 5I_0 \approx 0.09, \\ I_2 &= \frac{1}{2} - 5I_1 \approx 0.05, \\ I_3 &= \frac{1}{3} - 5I_2 \approx 0.083, \\ I_4 &= \frac{1}{4} - 5I_3 \approx -0.165. \end{aligned}$$

因为在 $[0, 1]$ 上被积函数 $\frac{x^n}{x+5} \geq 0$ (仅当 $x=0$ 时为零), 且当 $m > n$ 时, $\frac{x^n}{x+5} \geq \frac{x^m}{x+5}$ (仅当 $x=0$ 时, 等号成立), 所以 $I_n (n=0, 1, 2, \dots, 8)$ 是恒正的, 并有 $I_0 > I_1 > I_2 > \dots > I_8 > 0$.

在上述计算结果中, I_4 的近似值是负的, 这个结果显然是错的. 为什么会这样呢? 这就是误差传播所引起的危害. 由递推公式 (1.3.1) 可看出, I_{n-1} 的误差扩大了 5 倍后传给 I_n , 因而初值 I_0 的误差对以后各步计算结果的影响, 随着 n 的增大愈来愈严重. 这就造成 I_4 的计算结果严重失真.

如果改变计算公式, 先取一个 I_n 的近似值, 用下面的公式 (1.3.2) 倒过来计算 $I_{n-1}, I_{n-2}, \dots$ 即:

$$I_{k-1} = \frac{1}{5k} - \frac{1}{5} I_k \quad (k = n, n-1, \dots, 1), \quad (1.3.2)$$

情况就不同了. 我们发现 I_k 的误差减小到 $\frac{1}{5}$ 后传给 I_{k-1} , 因而初值的误差对以后各步的计算结果的影响是随着 n 的增大而愈来愈小.

由于误差是逐步衰减的, 初值 I_n 可以这样确定, 不妨设 $I_9 \approx I_{10}$, 于是由

$$I_9 = \frac{1}{50} - \frac{1}{5} I_{10}$$

可求得 $I_9 \approx 0.017$, 按公式 (1.3.2) 可逐次求得

$$\begin{aligned} I_8 &\approx 0.019, & I_7 &\approx 0.021, \\ I_6 &\approx 0.024, & I_5 &\approx 0.028, \\ I_4 &\approx 0.034, & I_3 &\approx 0.043, \\ I_2 &\approx 0.058, & I_1 &\approx 0.088, \\ I_0 &\approx 0.182. \end{aligned}$$

显然,这样算出的 I_0 与 $\ln(1.2)$ 的值比较符合. 虽然初值 I_0 很粗糙,但因为用公式(1.3.2)计算时,误差是逐步衰减的,所以计算结果相当可靠.

比较以上两个计算方案,显然,前者是一个不稳定的算法,后者是一个稳定算法. 对于一个稳定的计算过程,由于舍入误差不增大,因而不具体估计舍入误差也是可用的. 而对于一个不稳定的计算过程,如计算步骤太多,就可能出现错误结果. 因此,在实际应用中应选用数值稳定的算法,尽量避免使用数值不稳定的算法.

1.3.2 注意简化计算步骤,减少运算次数

计算机上使用的算法常采用递推化的形式,递推化的基本思想是把一个复杂的计算过程归结为简单过程的多次重复. 这种重复在程序上表现为循环. 递推化的优点是简化结构和节省计算量.

下面用多项式求值问题说明递推化方法.

【例 1.3.2】 对于给定的 x , 求 n 次多项式

$$P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n \text{ 的值.}$$

解 方法一:用一般算法,即直接求和法,可知乘法的次数为: $1+2+3+\cdots+n = \frac{n(n+1)}{2}$; 加法次数为 n .

方法二:逐项求和法

$$\text{令 } t_k = x^k, \text{ 则 } t_{k-1} = x^{k-1},$$

$$\text{所以 } t_k = xt_{k-1}.$$

$$\text{记 } u_k = a_0 + a_1x + \cdots + a_{k-1}x^{k-1} + a_kx^k.$$

可以看出前 $k+1$ 项部分和 u_k 等于前 k 项部分和 u_{k-1} 再加上第 $k+1$ 项 a_kx^k , 因此有

$$\begin{cases} t_k = xt_{k-1}, \\ u_k = u_{k-1} + a_k t_k, \end{cases} \quad k = 1, 2, \cdots, n.$$

初值应取为

$$\begin{cases} t_0 = 1, \\ u_0 = a_0, \end{cases}$$

容易看出逐步求和法所用乘法的次数为 $2n$, 加法次数为 n . 当 $n \geq 4$ 后,

$$2n < \frac{n(n+1)}{2}.$$

方法三:秦九韶方法