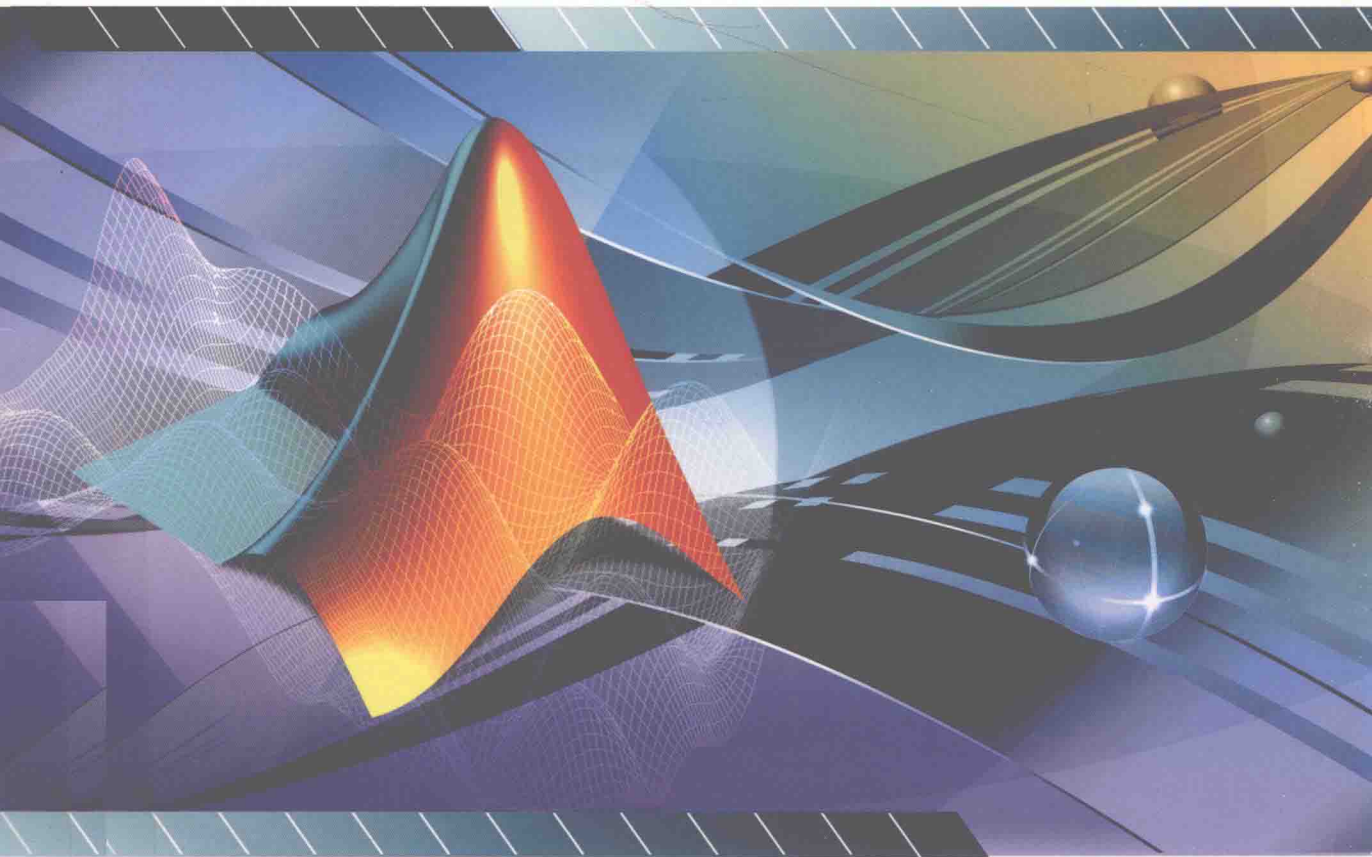



“新工科建设”教学探索成果·“十三五”规划教材

数值分析

• 陈欣 曲绍波 刘芳 主编
• 武芳芳 郭策安 张琪 副主编



 中国工信出版集团

 电子工业出版社
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY
<http://www.phei.com.cn>

“新工科建设”教学探索成果·“十三五”规划教材

数值分析

陈欣 曲绍波 刘芳 主编

武芳芳 郭策安 张琪 副主编

电子工业出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京·BEIJING

内 容 简 介

“数值分析”也叫“计算方法”，主要研究使用计算机解决数学问题的数值计算方法和理论。本书主要内容包括非线性方程（组）求根、解线性方程组的直接法和迭代法、曲线拟合和函数插值、数值微积分、常微分方程的数值解法、矩阵的特征值问题等。考虑到工科院校该课程教学的目的是满足工程和科研应用需要，因此本书更注重介绍工程应用的方法，弱化数学理论的推导证明，并且各章大多配有应用案例、上机实验和习题。本书提供配套电子课件，登录华信教育资源网（www.hxedu.com.cn）注册后可以免费下载。

本书适合作为普通工科院校少学时本科生和研究生教材或教辅使用。

未经许可，不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有，侵权必究。

图书在版编目（CIP）数据

数值分析/陈欣等主编. —北京：电子工业出版社，2018.8

ISBN 978-7-121-34560-9

I. ①数… II. ①陈… III. ①数值分析—高等学校—教材 IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2018）第 135165 号

策划编辑：冉 哲 杨 寰

责任编辑：冉 哲

印 刷：三河市华成印务有限公司

装 订：三河市华成印务有限公司

出版发行：电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编 100036

开 本：787×1 092 1/16 印张：13 字数：370 千字

版 次：2018 年 8 月第 1 版

印 次：2018 年 8 月第 1 次印刷

定 价：35.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题，请向购买书店调换。若书店售缺，请与本社发行部联系，联系及邮购电话：（010）88254888，88258888。

质量投诉请发邮件至 zltz@phei.com.cn，盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

本书咨询方式：ran@phei.com.cn。



前言

“数值分析”也叫“计算方法”，是大学理工类各专业普遍开设的一门课程，其主要研究使用计算机解决数学问题的数值计算方法和理论。数值计算是当今科学研究的基本手段之一，它是计算数学、计算机科学与其他工程学科结合的产物。随着工程技术突飞猛进的发展，大量复杂计算问题也随之产生，使得数值计算显得尤为重要，这也推动了数值计算的发展。

在多年的教学中，我们也曾采用过一些经典的数值分析教材，取得过一定的教学效果，但这类教材更关注理论与系统的完整性，自然无法全面考虑学生层次不同、学时数减少及工科教学目的改变等因素，毕竟普通工科院校在我国高校中占大多数。本书的写作目的是为普通工科高等院校提供一本易于理解的、有一定工程应用背景的，并且用实际问题引导的教材。

本书的主要内容与其他“数值分析”教材基本一致，包括数值代数、数值逼近和微分方程数值解法的主要内容。在内容编写上，具有以下特点：在介绍数学理论时，力求简明扼要，在不失严谨性的前提下，弱化一些数学理论和繁复的推导，省略部分定理的证明；在介绍数值方法时，尽量采用形象且通俗易懂的语言，借助图、表对算法、现象进行描述和分析，强调算法的实际应用和分析比较。

本书在章节安排上，考虑了近几年普通工科院校本课程教学学时数减少的现状，并结合了知识的相关性。本书主要内容包括：第1章为绪论，第2~4章介绍了非线性方程（组）的数值解法和线性方程组的数值解法，第5、6章介绍了曲线拟合与函数插值和数值微积分，第7章介绍了常微分方程的数值解法，第8章介绍了矩阵的特征值问题。对学时较少的院校，这样的安排有利于教学内容的连贯性，方便编制教学计划。

考虑到工科院校“数值分析”课程教学的目的是满足工程和科研应用的需要，因此本书更注重介绍工程应用的方法，并且各章大多配有应用案例，指导学生对实际问题进行建模，并使用数值分析方法进行求解。此外，各章大多还附有上机实验和习题，以提高学生的实践能力。

本书适合作为普通工科院校少学时本科生和研究生教材或教辅使用，并提供配套电子课件，登录华信教育资源网注册后可以免费下载。

本书由沈阳工业大学和沈阳理工大学联合编写，几位作者都具有多年教学经验，且从未间断本科、研究生课程的数值分析教学工作，无论是对教学内容、体系、方法和安排，还是对工程教育的发展方向，以及工科学生的实际情况，均有着深刻的理解，这使得本书的写作

更具有针对性。我们期望通过本书使数值分析内容更容易理解、学习和掌握，以促进课堂教学质量的提高。

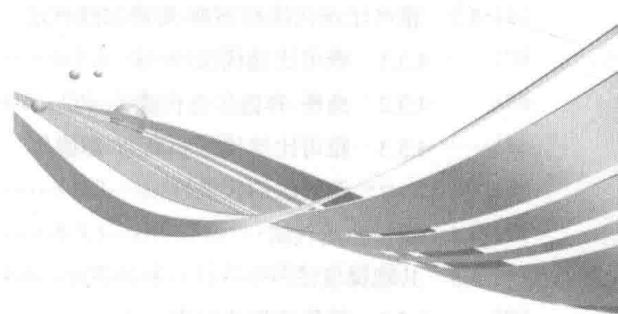
本书的出版得到了沈阳工业大学和诸多老师的支持与帮助，在此深表感谢！

限于编者水平有限，教材中仍会存在不妥与错误之处，欢迎广大读者批评指正。

作者
2018年6月



扫描二维码，获取习题解答



目录

第 1 章 绪论..... 1

1.1 引言.....1

1.2 误差.....2

1.2.1 误差来源与分类.....2

1.2.2 绝对误差、相对误差与有效数字.....3

1.3 数值算法设计原则.....6

习题 1.....9

第 2 章 非线性方程与方程组的数值解法..... 11

2.1 引言..... 11

2.2 二分法..... 12

2.3 简单迭代法..... 14

2.3.1 简单迭代法的构造原理..... 14

2.3.2 迭代法的收敛性..... 16

2.3.3 局部收敛性与收敛阶..... 18

2.3.4 迭代法的加速技巧..... 20

2.4 牛顿法及其变形方法..... 22

2.4.1 牛顿法..... 22

2.4.2 牛顿法的变形..... 25

2.5 多项式方程求根法..... 30

2.6 非线性方程组的数值解法..... 31

2.7 应用案例：球体进水深度问题..... 33

习题 2..... 33

上机实验..... 35

第 3 章 解线性方程组的直接法..... 36

3.1 引言..... 36

3.2 高斯消去法..... 37

3.2.1 高斯消去法的基本思想..... 37

3.2.2 n 元线性方程组的高斯消去法..... 38

3.3 列主元高斯消去法..... 42

3.4 直接三角分解法及列主元三角分解法..... 43

3.4.1 直接三角分解法..... 43

3.4.2 列主元三角分解法..... 47

3.5 特殊矩阵的三角分解法..... 49

3.5.1 对称矩阵的三角分解法..... 49

3.5.2 对称正定矩阵的三角分解法..... 50

3.5.3 三对角方程组的追赶法..... 52

3.6 应用案例：食物营养配餐问题..... 54

习题 3..... 56

上机实验..... 57

第 4 章 解线性方程组的迭代法..... 58

4.1 预备知识..... 58

4.1.1 向量的数量积及其性质..... 58

4.1.2 向量范数和向量序列的极限..... 59

4.1.3 矩阵范数和矩阵序列的极限..... 60

4.1.4 方程组的性态与矩阵的条件数..... 62

4.2 简单迭代法..... 64

4.2.1 简单迭代法的基本构造..... 64

4.2.2 迭代法的收敛性..... 64

4.2.3 迭代法收敛的误差估计	66	习题 5	119
4.3 雅可比迭代法和高斯-赛德尔迭代法	66	上机实验	121
4.3.1 雅可比迭代法	67	第 6 章 数值微积分	123
4.3.2 高斯-赛德尔迭代法	69	6.1 数值积分的基本概念	123
4.3.3 雅可比迭代法和高斯-赛德尔 迭代法的收敛性	72	6.1.1 求积公式与代数精度	123
4.4 超松弛迭代法	74	6.1.2 插值型求积公式	124
4.5 共轭梯度法	76	6.2 牛顿-柯特斯公式	125
4.5.1 等价的极值问题	77	6.2.1 牛顿-柯特斯系数及常用求积 公式	125
4.5.2 最速下降法	78	6.2.2 误差估计	128
4.5.3 共轭梯度法	79	6.2.3 收敛性与稳定性	129
4.6 应用案例: 迭代法在求解偏微分 方程中的应用	82	6.2.4 复化求积公式	130
习题 4	84	6.3 龙贝格算法	132
上机实验	86	6.3.1 变步长梯形求积算法	132
第 5 章 曲线拟合与函数插值	88	6.3.2 理查森外推算法	134
5.1 曲线拟合的最小二乘法	88	6.3.3 龙贝格算法	135
5.1.1 最小二乘问题	88	6.4 高斯型求积公式	137
5.1.2 最小二乘拟合多项式	90	6.4.1 求积公式的最高代数精度	137
5.2 插值问题的提出	94	6.4.2 正交多项式	138
5.3 拉格朗日插值	96	6.4.3 高斯型求积公式的一般理论	140
5.3.1 线性插值与二次插值	96	6.4.4 高斯-勒让德求积公式	141
5.3.2 拉格朗日插值多项式	97	6.5 数值微分	143
5.3.3 插值余项	99	6.5.1 中点方法	143
5.4 差商与牛顿插值	102	6.5.2 插值型求导公式	145
5.4.1 差商的定义与性质	102	6.6 应用案例: 卫星轨道长度计算问题	146
5.4.2 牛顿插值公式	103	习题 6	148
5.5 差分与等距节点插值	105	上机实验	150
5.5.1 差分的定义与性质	105	第 7 章 常微分方程的数值解法	151
5.5.2 等距节点插值公式	106	7.1 引言	151
5.6 埃尔米特插值	108	7.2 简单数值计算方法	152
5.7 分段低次多项式插值	111	7.2.1 欧拉法	152
5.7.1 高次多项式插值的龙格现象	111	7.2.2 隐式欧拉法	153
5.7.2 分段线性插值	112	7.2.3 梯形法	154
5.7.3 分段三次埃尔米特插值	112	7.2.4 改进欧拉法	155
5.8 三次样条插值	113	7.3 龙格-库塔方法	156
5.8.1 三次样条函数	113	7.3.1 泰勒展开公式	156
5.8.2 三次样条插值函数的计算	114	7.3.2 龙格-库塔方法的基本思想	158
5.9 应用案例: 应用三次样条函数实现 曲线拟合	117	7.3.3 二阶龙格-库塔公式	159
		7.3.4 三阶龙格-库塔公式	160

7.3.5 四阶龙格-库塔公式	161	8.2 对称矩阵的雅可比方法	182
7.4 线性多步法	162	8.2.1 平面旋转矩阵	182
7.4.1 线性多步法的一般公式	162	8.2.2 雅可比方法	184
7.4.2 阿当姆斯显式与隐式公式	163	8.3 QR 方法	186
7.4.3 阿当姆斯预测-校正公式	166	8.3.1 正交变换	186
7.5 一阶方程组与高阶方程	167	8.3.2 矩阵的 QR 分解	188
7.5.1 一阶方程组	167	8.3.3 QR 算法	191
7.5.2 化高阶方程为一阶方程组	168	8.4 求实对称三对角矩阵特征值的二分法	192
7.6 应用案例: 闭电路中电流的计算问题	170	8.4.1 特征多项式序列及其性质	192
习题 7	172	8.4.2 求特征值的二分法	193
上机实验	173	8.5 应用案例: 互联网页面等级计算问题	195
第 8 章 矩阵的特征值问题	174	习题 8	197
8.1 幂法和反幂法	174	上机实验	198
8.1.1 幂法	174	参考文献	199
8.1.2 幂法的加速技巧	178		
8.1.3 反幂法	180		

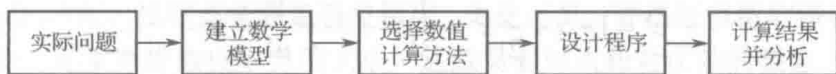
第 1 章

绪论

1.1 引言

数值分析也称为计算方法，它研究用计算机求解数学问题的数值方法及其理论，是计算数学的主体部分。它涉及科学计算中的常见问题，如函数的插值与逼近、数值积分与数值微分、线性与非线性方程的求解、矩阵特征值问题和微分方程的数值解法等。

数学与科学技术一向有着密切的关系并相互影响，利用科学技术解决实际问题时通常都需要建立数学模型。但很多数学模型较为复杂，往往不易求出精确解，于是人们讨论问题的简化模型，求其解析解，而过于简化的模型又会导致所求的解不能满足精度要求。随着计算机科学与技术的飞速发展和计算数学理论的日益成熟，特别是具备超强计算能力的计算机系统的出现，为求解复杂的数学模型提供了强大的硬件保障。一批适合计算机求解并节省计算量的数值分析方法随之产生，并被广泛使用，成为科学计算的主要方法。目前，数值分析在科学与工程计算、信息科学、管理科学、生命科学、经济学等领域中有着广泛应用，已经成为与理论分析和科学实验并列的第三种科学研究方法和手段。用计算机求解数学问题，基本过程如下：



用数值方法解决数学问题就是完成以下工作：如何把数学模型归结为数值问题，如何估计一个给定算法的精度或构造精度更高的算法，如何分析误差在计算过程中的积累和传播，如何使算法较少占用存储量，如何分析算法的优缺点。应当指出，数值方法的构造和分析是密不可分的，二者缺一不可。

对于给定的数学问题，常常可以构造出多种数值方法。那么，如何评价这些方法的优劣呢？一般来说，一个好的方法应具有如下特点。

- ① 针对计算机设计，结构简单，易于编程实现。

② 有可靠的理论分析. 例如, 误差分析、稳定性分析等, 在理论上应能保证方法的收敛性和数值稳定性.

③ 有好的复杂度. 好的时间复杂度能够提高方法的计算速度, 节省时间; 好的空间复杂度能够节省存储空间.

④ 便于设计数值实验. 通过数值实验来验证算法的可行性和有效性.

在学习数值分析课程时, 要掌握方法的基本原理和思想, 要注意方法处理的技巧及其与计算机的结合, 要重视误差分析、收敛性及稳定性的基本理论, 达到灵活运用数值分析方法解决实际问题的目的.

1.2 误差

1.2.1 误差来源与分类

科学计算中所处理的数据和计算的结果往往都是在一定范围内的近似数值, 它们与真实值之间总存在着一些偏差. 也就是说, 一个物理量的真实值与计算出的值通常是不相等的, 其差值称为误差. 引起误差的原因是多方面的, 按来源不同可分为如下 4 类.

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, 因而是近似的. 通常, 把数学模型与实际问题之间存在的误差称为模型误差.

2. 观测误差

在数学模型中往往还有一些由观测得到的物理量, 如温度、长度、电压等, 这些观测值显然也存在误差. 这种由观测产生的误差称为观测误差.

3. 截断误差

在使用无穷级数求和时, 只能取前面有限项的和来近似作为该级数的和, 这种在计算中通过有限过程的计算结果代替无限过程的结果而造成的误差, 称为截断误差. 这是计算方法本身存在的误差, 故也称为方法误差. 例如, 指数函数 $f(x) = e^x$ 可展开为幂级数形式

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \cdots + \frac{1}{n!}x^n + \cdots$$

使用计算机求值时, 只能取有限项作为 e^x 的近似值

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

根据泰勒 (Taylor) 定理, 部分和 $S_n(x)$ 作为 e^x 的近似值的余项为

$$R_n(x) = e^x - S_n(x) = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!}e^\xi$$

式中, ξ 为 0 与 x 之间的数.

$R_n(x)$ 即为将 $S_n(x)$ 作为 e^x 的近似值所产生的截断误差.

4. 舍入误差

用计算机进行数值计算时, 由于计算机的字长有限, 因此需要对原始数据、中间结果和最终结果取有限位数字. 我们将计算过程中取有限位数字进行运算而引起的误差称为舍入误差.

例如, 用 3.14159265358 近似代替 π , 产生的误差

$$R = \pi - 3.14159265358 = 0.0000000000097932\dots$$

就是舍入误差.

在数值计算方法中, 总是假定数学模型是正确的, 观测的数据是准确的, 因而不考虑模型误差和观测误差, 主要研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响.

1.2.2 绝对误差、相对误差与有效数字

1. 绝对误差

定义 1 设 x^* 为准确值, x 为 x^* 的一个近似值, 称

$$E(x) = x - x^*$$

为近似值 x 的绝对误差 (Absolute Error), 简称为误差 (Error).

由定义 1 可以看出, 误差 $E(x)$ 可正可负.

通常无法得到准确值 x^* , 因而不能算出 x 的绝对误差 $E(x)$ 的准确值, 只能根据测量工具或计算情况估计出误差绝对值的一个上界, 得出一个正数 ε , 使得

$$|E(x)| = |x - x^*| \leq \varepsilon$$

正数 ε 称为近似值 x 的绝对误差限 (Absolute Error Bound).

有了绝对误差限, 就可知道近似值 x 的范围

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

工程上, 习惯用 $x = x^* \pm \varepsilon$ 来表示上述事实.

绝对误差的大小在许多情况下还不能完全刻画一个近似值的精确度. 例如, 测量一个人的身高为 170 ± 1 cm, 而测量一本书的长度为 20 ± 1 cm, 是否说明两者测量的精确度是一样的呢? 如果考虑被测量数值本身的大小, 前者的误差所占比例为 $1/170 \approx 0.59\%$, 而后者的误差所占比例为 $1/20 = 5\%$, 显然前者测量得更精确. 由此可见, 评估近似值的精确度, 不仅要看绝对误差的大小, 还要考虑数值本身的大小, 这就需要引入相对误差的概念.

2. 相对误差

定义 2 设 x^* 为准确值, x 为 x^* 的一个近似值, 称

$$E_r(x) = \frac{E(x)}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*}, \quad x^* \neq 0$$

为近似值 x 的相对误差 (Relative Error).

在实际计算中, 由于准确值 x^* 一般是未知的, 通常用 x 代替相对误差 $E_r(x)$ 中的分母 x^* , 由此得近似值 x 的相对误差

$$E_r(x) \approx \frac{E(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x}$$

相对误差 $E_r(x)$ 可正可负，其绝对值的上界称为相对误差限，即若存在正数 ε_r ，使得

$$|E_r(x)| \approx \left| \frac{E(x)}{x} \right| = \left| \frac{x - x^*}{x} \right| \leq \varepsilon_r$$

成立，则称正数 ε_r 为近似值 x 的相对误差限 (**Relative Error Bound**)。

例 1 设有两个量 $x = 100 \pm 1$, $y = 1000 \pm 2$ ，求 x 与 y 的相对误差限。

解
$$E_r(x) = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \frac{1}{100} = 1\%$$

$$E_r(y) = \left| \frac{y - y^*}{y^*} \right| \leq \frac{2}{1000} = 0.2\%$$

根据定义， x 与 y 的相对误差限分别为 1% 和 0.2%。

上例表明， y 近似 y^* 的程度要比 x 近似 x^* 的程度好得多。相对误差能更好地刻画近似值的精确度。

例 2 设 $x = 6.32$ 是由准确值 x^* 经过四舍五入得到的近似值，求 x 的绝对误差限和相对误差限。

解 由已知得 $6.315 \leq x^* < 6.325$ ，故

$$-0.005 < x - x^* \leq 0.005$$

所以， x 的绝对误差限为 $\varepsilon = 0.005$ ，相对误差限为 $\varepsilon_r = \frac{0.005}{6.32} \approx 0.08\%$ 。

3. 有效数字

当一个准确值 x^* 有小数时，通常按照四舍五入原则得到 x^* 的近似值 x 。例如，无理数 $\pi = 3.1415926535897932384626\cdots$ ，若按照四舍五入原则分别取 2 位和 6 位小数，可得

$$\pi = 3.14, \quad \pi = 3.141593$$

不管取几位小数，其近似值的绝对误差限都不超过末尾数字的半个单位，即

$$|\pi - 3.14| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}, \quad |\pi - 3.141593| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-6}$$

定义 3 设 x^* 为准确值， x 为 x^* 的一个近似值，如果 x 的绝对误差限不超过它的某一数位的半个单位，并且从 x 左起第一个非零数字到该数位共有 n 位，则称这 n 个数字为 x 的有效数字 (**Significant Figures**)，也称用 x 近似 x^* 时具有 n 位有效数字。

例 3 若下列近似值的绝对误差限都是 0.0005，它们各具有几位有效数字？

(1) $a = 251.234$; (2) $b = -0.208$; (3) $c = 0.002$; (4) $d = 0.00013$

解 因为 $0.0005 = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$ 是小数点后第 3 位的半个单位, 所以 a 有 6 位有效数字 2, 5, 1, 2, 3, 4; b 有 3 位有效数字 2, 0, 8; c 有 1 位有效数字 2; d 没有有效数字.

有效数字还有另外一种定义方法.

定义 4 设 x 是 x^* 的一个近似值, 表示为

$$x = \pm 10^k \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n \quad (1.1)$$

其中每个 $a_i (i=1, 2, \dots, n)$ 均为 0~9 之间的一个数字, 且 $a_1 \neq 0$. 如果

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

则称 x 近似 x^* 有 n 位有效数字.

相对误差与有效数字之间的关系可由如下定理表述.

定理 1 设 x^* 的近似值为 x , 具有形如式 (1.1) 的标准形式:

(1) 如果 x 具有 n 位有效数字, 则其相对误差限为

$$|E_r(x)| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

(2) 如果相对误差限 $|E_r(x)| \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$, 则 x 至少具有 n 位有效数字.

证明

(1) 由 x 具有 n 位有效数字可知

$$|E(x)| \leq \frac{1}{2} \times 10^{k-n}$$

而相对误差限

$$|E_r(x)| = \left| \frac{E(x)}{x} \right| \leq \frac{1}{2|x|} \times 10^{k-n} \leq \frac{1}{2 \times 10^k \times 0.a_1} \times 10^{k-n} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

(2) 绝对误差限

$$\begin{aligned} |E(x)| &= |E_r(x)| |x| \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)} \times 10^k \times 0.a_1 a_2 \cdots a_n \\ &\leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{k+1-n} \times 0.(a_1+1) = \frac{1}{2} \times 10^{k-n} \end{aligned}$$

故 x 至少具有 n 位有效数字.

显然, 近似值的有效数字位数越多, 相对误差限就越小, 反之亦然.

例 4 若分别用 3.1416 和 3.1415 作为无理数 π 的近似值, 试确定它们的有效数字位数.

解 $3.1416 = 0.31416 \times 10^1$, 这里 $k=1$. 由于

$$|\pi - 3.1416| = 0.0000073465 \cdots < \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

且 $1-n=-4, n=5$, 因此 3.1416 作为 π 的近似值具有 5 位有效数字.

$3.1415 = 0.31415 \times 10^1$, 这里 $k=1$. 由于

$$|\pi - 3.1415| = 0.0000926 \dots < \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

且 $1-n=-3$, $n=4$, 因此, 3.1415 作为 π 的近似值具有 4 位有效数字.

上例表明, 准确值 x^* 的近似值 x 的每位数字不一定是有效数字, 如 3.1415 作为 π 的近似值只有 4 位有效数字 3, 1, 4, 1.

1.3 数值算法设计原则

数学本身是精确的, 但计算机所能表示的数的位数是有限的, 因而误差不可避免. 用数学上恒等变形获得的两个完全等价的式子在计算机中分别进行运算时, 结果可能会有很大差异. 为了减少误差的影响, 设计数值算法时应遵循如下原则.

1. 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, 不但可节省计算时间, 提高计算速度, 而且能减少舍入误差的积累, 这是数值计算必须遵循的原则, 也是数值计算方法要研究的重要内容.

例如, 计算 x^{255} 的值, 如果将 x 的值逐个相乘, 要做 254 次乘法, 但如果写成

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

只要做 14 次乘法运算即可.

又如, 计算多项式

$$P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$$

的值, 若直接计算 $a_k x^k$ ($k=0, 1, \dots, n$), 再逐项相加, 则一共需要做

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

次乘法和 n 次加法; 若采用秦九韶算法

$$P(x) = (((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \dots + a_1)x + a_0$$

则只需要做 n 次乘法和 n 次加法即可.

2. 避免两个相近数相减

如果 x 和 y 分别是准确值 x^* 和 y^* 的近似值, 则 $z = x - y$ 是 $z^* = x^* - y^*$ 的近似值, 此时 z 的相对误差满足

$$|E_r(z)| = \left| \frac{z - z^*}{z} \right| \leq \left| \frac{x}{x-y} \right| |E_r(x)| + \left| \frac{y}{x-y} \right| |E_r(y)|$$

所以, 当 x^* 和 y^* 很接近时, 两个数差的相对误差可能很大.

例 5 选择适当的方法求方程 $x^2 - 16x + 1 = 0$ 较小的根.

解 容易得到方程的两个根为 $x_1 = 8 + \sqrt{63}$, $x_2 = 8 - \sqrt{63}$.

方法 I: 由 $\sqrt{63} \approx 7.94$ 可知, 直接计算 $x_2 = 8 - \sqrt{63} \approx 8 - 7.94 = 0.06$, 只有 1 位有效数字.

方法 II: 若采用如下的变形方法进行计算, 则具有 3 位有效数字.

$$x_2 = 8 - \sqrt{63} = \frac{1}{8 + \sqrt{63}} \approx 0.0627$$

由上述两种解法可知，当两个相近的数相减时，若采用方法 I 的直接法进行计算，不仅会产生较大的相对误差，而且会丢失有效数字。

例 6 设 $A = (10^5 + a)^3$ ， $B = (10^5 + b)^3$ ， $a \neq b$ ，且均是 1 位数字，计算 $A - B$ 。

解 A 和 B 值接近，也属于两个相近数相减的情况。若直接先算 A 后算 B ，再算 $A - B$ ，既会产生较大的相对误差，又会丢失有效数字。记 $x = 10^5 + a$ ， $y = 10^5 + b$ ，利用恒等变换

$$A - B = x^3 - y^3 = (x - y)(x^2 + xy + y^2) = (a - b)(x^2 + xy + y^2)$$

得到的算式计算误差小，且不易丢失有效数字。

在进行数值计算时，如果遇到两个相近数相减的情况，可通过变换计算公式来避免或减小有效数字的损失。例如，当 $|x| \approx 0$ 时，可利用

$$1 - \cos x = 2 \sin\left(\frac{x}{2}\right)$$

当 $x_1 \approx x_2$ 时，可利用

$$\lg x_1 - \lg x_2 = \lg \frac{x_1}{x_2}$$

当 $x \gg 1$ 时，可利用

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

在一般情况下，当 $f(x^*) \approx f(x)$ 时，可用泰勒展开

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

3. 防止大数“吃掉”小数

参与计算的数，有时数量级相差很大，如果不注意采取相应措施，在它们的加、减法运算中，绝对值很小的数往往会被绝对值很大的数“吃掉”，不能发挥其作用，造成计算结果失真。例如，在 8 位十进制数计算机中计算

$$A = 63281312 + 0.2 + 0.4 + 0.4$$

此时，按照加法浮点运算的对阶规则，应有

$$A = 0.63281312 \times 10^8 + 0.000000002 \times 10^8 + 0.000000004 \times 10^8 + 0.000000004 \times 10^8$$

由于计算机只能存放 8 位十进制数，因此上式中后三个数在计算机中变成“机器零”，计算结果为

$$A = 0.63281312 \times 10^8 = 63281312.0$$

即相对小的数 0.2 和 0.4 已被大数 63281312 “吃掉”，计算结果失真。如果改变计算次序，先将三个小数相加得到数 1，再进行加法运算，就可避免上述现象。此时

$$\begin{aligned} A &= 63281312 + (0.2 + 0.4 + 0.4) \\ &= 63281312 + 1.0 = 63281313.0 \end{aligned}$$

4. 避免用绝对值很小的数作为除数

在计算中, 用绝对值很小的数作为除数, 有可能出现以下两种情况: 一是商有可能超出计算机表示的范围而引发“溢出”现象; 二是会使商的数量级增加, 当商过大时, 商作为一个大数将有可能吃掉参与运算的一些小数, 从而放大了商的绝对误差.

如果 x 和 y 分别是准确值 x^* 和 y^* 的近似值, 则 $z = \frac{x}{y}$ 是 $z^* = \frac{x^*}{y^*}$ 的近似值. 此时 z 的绝对误差满足

$$|E(z)| = |z - z^*| = \left| \frac{(x - x^*)y^* + x^*(y - y^*)}{y^*y} \right| \approx \frac{|y^*| |E(x)| + |x^*| |E(y)|}{y^2}$$

所以, 若除数太小, 则可能导致商的绝对误差很大.

此外, 在进行除法运算时, 如果除数太小, 即使除数的误差很小, 商的误差也可能很大. 例如, 计算 $\frac{x}{y} = \frac{2.7182}{0.001} = 2718.2$, 若分母变成 0.0011, 即分母的变化只有 0.0001, 而 $\frac{x}{y} = \frac{2.7182}{0.0011} = 2471.1$. 可见, 商发生了巨大的变化.

因此, 在计算时应尽量通过等价变换避免绝对值较小的数作为除数. 如果无法改变算法, 则可采用增加有效位数的方法进行计算, 或在计算时采用双精度运算, 但这要增加机器计算时间和多占内存单元.

5. 采用数值稳定性好的算法

实际计算时, 给定的数据会有误差, 数值计算中也会产生误差, 并且, 这些误差在进一步的计算中可能会产生误差传播.

对于一个具体的数值计算方法, 如果输入数据的误差在计算过程中迅速增长而得不到控制, 则称该算法是数值不稳定的, 否则是数值稳定的.

下面的示例说明了误差传播现象.

例 7 计算积分值 $I_n^* = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx (n=0, 1, \dots, 6)$.

解 先建立一个 I_n^* 的递推公式. 由

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

由此可得到两个递推算法.

算法 1:
$$I_n^* = \frac{1}{n} - 5I_{n-1}^*, \quad n = 1, 2, \dots, 6$$

算法 2:
$$I_{n-1}^* = \frac{1}{5} \left(\frac{1}{n} - I_n^* \right), \quad n = 6, 5, \dots, 1$$

直接计算可得 $I_0^* = \ln 6 - \ln 5$. 如果采用 4 位数字计算, 则 I_0^* 的近似值为 $I_0 = 0.1823$. 记 $E_n = I_n - I_n^*$, I_n 为 I_n^* 的近似值. 则

对算法 1, 有

$$E_n = -5E_{n-1} = \cdots = (-5)^n E_0$$

按以上初始值 I_0^* 的取法有 $|E_0| \approx 0.22 \times 10^{-4} \leq 0.5 \times 10^{-4}$. 这样, 我们就得到 $|E_6| = 5^6 |E_0| \approx 0.34$. 这个数已经大大超过了 I_6^* 的实际大小, 所以 I_6 连 1 位有效数字也没有了, 误差掩盖了真值.

对算法 2, 有

$$E_{k-n} = \left(-\frac{1}{5}\right)^n E_k, \quad |E_0| = \left(\frac{1}{5}\right)^6 |E_6|$$

如果我们能够给出 I_6^* 的一个近似值, 则可由算法 2 计算 I_n^* ($n=5, 4, \dots, 0$) 的近似值. 并且, 即使 E_6 较大, 得到的近似值的误差将较小. 由于

$$\frac{1}{6(k+1)} = \int_0^1 \frac{x^k}{6} dx < I_k < \int_0^1 \frac{x^k}{5} dx = \frac{1}{5(k+1)}$$

因此, 可取 I_k^* 的一个近似值为

$$I_k = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{6(k+1)} + \frac{1}{5(k+1)} \right)$$

对 $k=6$, 有 $I_6 = 0.0262$.

按 $I_0 = 0.1823$ 和 $I_6 = 0.0262$, 分别按算法 1 和算法 2 计算, 计算结果见表 1-1, 其中 $I_n^{(1)}$ 为算法 1 的计算值, $I_n^{(2)}$ 为算法 2 的计算值. 易知, 对于任何自然数 n , 都有 $0 < I_n^* < 1$, 并且 I_n^* 单调递减. 可见, 算法 1 是不稳定的, 算法 2 是稳定的.

表 1-1 两种算法计算结果对比

n	$I_n^{(1)}$	$I_n^{(2)}$	$I_n^*(4\text{位})$
0	0.1823	0.1823	0.1823
1	0.0885	0.0884	0.0884
2	0.0575	0.0580	0.0580
3	0.0458	0.0431	0.0431
4	0.0210	0.0344	0.0344
5	0.0950	0.0281	0.0285
6	-0.3083	0.0262	0.0243

数值不稳定的算法一般在实际计算中不能采用, 数值不稳定的现象属于误差危害现象.

习题 1

1. 什么是数值分析? 它与数学科学及计算机的关系如何?
2. 列举科学计算中误差的三个来源, 说明截断误差和舍入误差的区别.