本科生公共课工程数学系列之

《计算方法》

教师:王振海

QQ群：823654750

zhwang@nwpu.edu.cn

教材

- **聂玉峰，王振海**主编，**数值方法简明教程（第二版）**，高等教育出版社，2020.12（国家十二五规划教材）

- 作业：计算方法作业集（A、B）

周二、周三上午9：00--下午5：00，价格10元
购买地点:数学与统计学院A215房间

- 参考书
  - 1、封建湖，车刚明，计算方法典型题分析解集（第三版），西北工业大学出版社，2001
  - 2、封建湖，聂玉峰，王振海，数值分析导教导学导考（第二版），西北工业大学出版社，2006.7


"十二五"普通高等教育本科
国家级规划教材
数值方法
简明教程
(第二版)
主编
聂玉峰 王振海
高等教育出版社

法作业集
A）
学应用数学系
法教学组编

方法作业集
（B）
业大学应用数学系
方法教学组编

课程参考文献

课件下载地址：

QQ群：823654750

参考网站地址：

(1)https://learn.nwpu.edu.cn/app/coursehome.jsp?key=9DE0C3B2480F47F5E053650A280A2084

(2) http://www.nwpu-compmath.cn/szfx/

(3)其它

作业答疑：1~9周周二、四下午4：00-5：40，地点：教西A103

课程考核

- 20%-平时成绩，作业，出勤，课堂表现，慕课等
- 80%-结业考试

第一章　绪　论

内容提要

§1.1 引言

§1.2 误差的度量与传播

§1.3 数值实验与算法性能比较

投票 最多可选1项

设置

重点精讲1.1
内容概要与特点

$$10^{100}+2-10^{100}=?$$

A 0

B 2

提交

§1.1引言

科学与工程计算过程：

- 提出实际问题

  辨析其中的主要矛盾和次要矛盾，并在合理假设的条件下，运用各种数学理论、工具和方法，建立起问题中不同量之间的联系，即得到数学模型。

- 建立数学模型

  数学模型解的存在性（模型内部没有蕴含矛盾）、惟一性（模型是完备的)以及对相关数据的连续依赖性统称为模型的适定性。

- 提出数值问题

  数值问题是指有限个输入数据（问题的自变量、原始数据）与有限个输出数据（待求解数据）之间函数关系的一个明确无歧义的描述。这正是计算方法所研究的对象。

数值问题举例

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = x + y^2 \quad x \in [0,1] \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

是用一阶常微分方程初值问题表示的数学模型，要求无穷多个输出，因而它不是数值问题 。但当我们要求出有限个点处函数值的近似值时，便成为一数值问题。

科学与工程计算过程（续）

- 设计高效可靠的算法

计算方法的任务之一就是提供求得数值问题近似解的方法—算法。

概念：从程序设计的角度来讲，所谓**算法**是由一个或多个进程组成；每个进程明确无歧义地描述由操作及操作对象合成的按一定顺序执行的有限序列；所有进程能够同时执行并且协调地在有限个操作步内完成一个给定问题的求解。这里操作可以是计算机能够完成的算术运算（加减乘除）、逻辑运算、字符运算等。

分类方法1：若算法包含有一个进程则称其为串行算法，否则为并行算法。

分类方法2：从算法执行所花费的时间角度来讲，若算术运算占绝大多数时间则称其为数值型算法，否则为非数值型算法。

本课程介绍数值型串行算法。（其它类型算法参阅数据结构、并行算法等课程。）

设计高效可靠的算法（续）

可靠性：所谓算法的可靠性包括如下几个方面：算法的收敛性、稳定性、误差估计等。这些是计算方法研究的第二个任务。

一个算法在保证可靠的大前提下再评价其优劣才是有价值的。

优劣评价：可靠算法的优劣，应该考虑其时间复杂度（计算机运行时间）、空间复杂度（占据计算机存储空间的多少）以及逻辑复杂度（影响程序开发的周期以及维护）。这是计算方法研究的第三个任务。

算法应用状态

由于计算方法研究对象以及解决问题方法的广泛适用性，著名流行软件如Maple、Matlab、Mathematica等已将其绝大多数内容设计成函数，简单调用之后便可以得到运行结果。

但由于实际问题的具体特征、复杂性，以及算法自身的适用范围决定了应用中必须选择、设计适合于自己特定问题的算法，因而掌握数值方法的思想和内容是至关重要的。

科学与工程计算过程小结

- 提出实际问题
- 建立数学模型
- 提出数值问题
- 设计可靠、高效的算法
- 程序设计、上机实践计算结果
- 计算结果的可视化

在具体问题的求解过程中，上述步骤形成一个循环。

科学计算（数值模拟）已经被公认为与理论分析、实验分析并列的科学研究三大基本手段之一。

本课程主要内容

鉴于实际问题的复杂性，通常将其具体地分解为一系列子问题进行研究，本课程主要涉及如下几个方面问题的求解算法：

- 非线性方程的近似求解方法
- 线性代数方程组的求解方法
- 函数的插值近似和数据的拟合近似
- 积分和微分的近似计算
- 常微分方程初值问题的数值解法
- 代数特征值问题

本课程的学习方法

- 尽管本课程所讲算法是很有限的，但许多初学者可能仍会觉得公式多，理论分析复杂。在此，我们提出如下的几点学习方法，仅供初学者参考。
- 1、认识建立算法和对每个算法进行理论分析是基本任务，主动适应公式多和讲究理论分析的特点。
- 2、注重各章节所研究算法的提出，搞清楚问题的基本提法、逐步深入的层次及提法的正确性。
- 3、理解每个算法建立的数学背景、数学原理和基本线索，而且对一些最基本的算法要非常熟悉。
- 4、从各种算法的理论分析中学习推理证明方法，提高推理证明能力。
- 5、认真进行数值计算的训练，并注意与实践相结合。

§1.2 误差的度量与传播

内容提要：

1. 误差的来源及分类
2. 误差的度量
3. 误差的传播

一、误差来源及分类

重点精讲1.2
误差来源与度量

1)模型误差（描述误差）

2)观测误差

$$F = G\frac{m_1 m_2}{r^2}$$

在计算方法中不研究这两类误差，总是假定数学模型是正确合理的反映了客观实际问题。

3）截断误差（方法误差）

数值方法精确解与待求解模型的理论分析解之间的差异。

它是由于算法必须在有限步内执行结束而导致的，它需要将无穷过程截断为有限过程。

例如：

$$e=1+\frac{1}{1!}+\frac{1}{2!}+\cdots,\quad e_{\text{n}}=1+\frac{1}{1!}+\frac{1}{2!}+\cdots+\frac{1}{\text{n}!},\quad e-e_n$$

4）舍入误差

在实现数值方法的过程中，由于计算机表示浮点数采用的是有限字长，因而仅能够区分有限个信息，准确表示某些数，不能准确表示所有实数，这样在计算机中表示的原始输入数据、中间计算数据、以及最终输出结果必然产生误差，称此类误差为**舍入误差**。

如利用计算机计算e的近似值e_n时，实际上得不到e_n的精确值，只能得到e_n的近似e^*；这样e^*作为e的近似包含有舍入误差和截断误差两部分：

$$e^* - e = (e^* - e_n) + (e_n - e)$$

二、误差的度量

1) 绝对误差
2) 相对误差
3) 有效数字

1. 绝对误差

- 绝对误差定义： 近似值---真值，用符号记为

$$x^* - x \triangleq e(x^*)$$

在不引起混淆时，简记 $e(x^*)$ 为 e^* 。

•绝对误差限：

如果存在正数 $\varepsilon^* = \varepsilon(x^*)$， 使得有绝对误差

$$|e^*| = |x^* - x| \le \varepsilon^*,$$

则称 ε^* 为 x^* 近似 x 的一个**绝对误差限**。

$$x \in [x^* - \varepsilon^*, x^* + \varepsilon^*], \quad x = x^* \pm \varepsilon^*。$$

● Remark: 通常计算中所要求的误差，是指估计一个尽可能小的绝对误差限。

2.相对误差

- Remark: 绝对误差限虽然能够刻划对同一真值不同近似的好坏，但它不能刻划对不同真值近似程度的好坏 。

●**定义**　设 x^*是对准确值 x（$\neq 0$）的一个近似，称

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

为 x^* 近似 x 的**相对误差**。不引起混淆时，简记 $e_r(x^*)$ 为 e_r^*.

相对误差（续）

- **相对误差限：** 数值 $\left|e_r^*\right|$ 的上界，记为 $\varepsilon_r(x^*)$ 。

相对误差限也可以通过 $\varepsilon_r^* = \dfrac{\varepsilon^*}{\left|x^*\right|}$ 来计算。

Remark1: 当要求计算相对误差，是指估计一个尽可能小的相对误差限。

Remark2: 相对误差及相对误差限是无量纲的，但绝对误差以及绝对误差限是有量纲的。

3.有效数字

为规定一种近似数的表示法，使得用它表示的近似数自身就直接指示出其误差的大小。为此需要引出有效数字和有效数的概念。

- **定义** 设 x 的近似值 x^* 有如下标准形式

$$x^* = \pm 10^m \times \underline{0.x_1 x_2 \cdots x_n x_{n+1} \cdots x_p},$$

其中 m 为整数，$\{x_i\} \subset \{0,1,2,\cdots,9\}$ 且 $x_1 \neq 0$， $p \geq n$. 如果有

$$\left|e^*\right| = \left|x^* - x\right| \leq \tfrac{1}{2} \times 10^{m-n},$$

则称 x^* 为 x 的具有 n **位有效数字**的近似数，或称 x^* 准确到10^{m-n} 位，

其中数字 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 分别被称为 x^*的第一、二、…、n 个有效数字。

有效数字（续）

- **有效数**：当x^*准确到末位，即$n=p$，则称x^*为**有效数**。

- 举例：$x=\pi$，　$x_1^*=3.141$，　$x_2^*=3.142$

$$\left| x_1^* - x \right| = 0.00059\cdots \le 0.005 = \frac{1}{2}\cdot 10^{1-3}$$

3位有效数字，非有效数

$$\left| x_2^* - x \right| = 0.00040\cdots \le 0.0005 = \frac{1}{2}\cdot 10^{1-4}$$

4位有效数字，有效数

有效数字（续）

- Remark1：有效数的误差限是末位数单位的一半，可见有效数本身就体现了误差界。
- Remark2: 对真值进行四舍五入得到有效数。
- Remark3:准确数字有无穷多位有效数字。
- Remark4: 从实验仪器所读的近似数（最后一为是估计位）不是有效数，估计最后一位是为了确保对最后一位进行四舍五入得到有效数。
  - 例　从最小刻度为厘米的标尺读得的数据123.4cm是为了得到有效数123.cm,读得数据156.7cm是为了得到有效数157.cm。

三、误差传播

重点精讲1.3
初值误差传播

- 概念：近似数参加运算后所得之值一般也是近似值，含有误差，将这一现象称为**误差传播**。
- 误差传播的表现：
  - 算法本身可能有截断误差；
  - 初始数据在计算机内的浮点表示一般有舍入误差；
  - 每次运算一般又会产生新的舍入误差，并传播以前各步已经引入的误差；
  - 误差有正有负，误差积累的过程一般包含有误差增长和误差相消的过程，并非简单的单调增长；
  - 运算次数非常之多，不可能人为地跟踪每一步运算。

数值运算的误差估计（续）

- 初值误差传播：假设每一步都是准确计算，即不考虑截断误差和由运算进一步引入的舍入误差，仅介绍初始数据的误差传播规律。
  - 研究方法：
    - 泰勒（Taylor）方法
      - n元函数

复习泰勒公式

记点$(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$为$p^*$，点$(x_1,x_2,\cdots,x_n)$为$p$，$n$元泰勒公式：

$$f(p)=f(p^*)+\frac{1}{1!}\left[f_1'(p^*)(x_1-x_1^*)+\cdots+f_n'(p^*)(x_n-x_n^*)\right]+$$

$$\frac{1}{2!}\Big[f_{11}'(p^*)(x_1-x_1^*)^2+\cdots+f_{1n}'(p^*)(x_1-x_1^*)(x_n-x_n^*)+$$

$$+f_{21}''(p^*)(x_2-x_2^*)(x_1-x_1^*)+\cdots+f_{2n}''(p^*)(x_2-x_2^*)(x_n-x_n^*)+$$

$$+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$+f_{n1}''(p^*)(x_n-x_n^*)(x_1-x_1^*)+\cdots+f_{nn}''(p^*)(x_n-x_n^*)^2\Big]$$

$$+\cdots$$

泰勒公式分析初值误差传播

设 n 元可微函数 $y=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 中的自变量 x_1、x_2、…、x_n 是相互独立的。

用自变量的近似值进行准确计算，得 $y^*=f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$。当 x_1^*、x_2^*、…、x_n^* 很好地近似了相应真值时，利用多元函数一阶 Taylor 公式求得 y^* 的绝对误差：

$$e(y^*)=y^*-y\approx\sum_{i=1}^{n}f_i'(x_1^*,\cdots,x_n^*)(x_i^*-x_i)$$

$$=\sum_{i=1}^{n}f_i'(x_1^*,\cdots,x_n^*)e(x_i^*)$$

泰勒公式分析初值误差传播（续）

以及相对误差

$$e_r(y^*)=\frac{e(y^*)}{y^*}\approx\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i^*}{y^*}f_i'(x_1^*,\cdots,x_n^*)\frac{e(x_i^*)}{x_i^*}$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i^*}{y^*}f_i'(x_1^*,\cdots,x_n^*)e_r(x_i^*)$$

进而得到如下绝对误差限和相对误差限传播关系：

$$\varepsilon(y^*)\lessapprox\sum_{i=1}^{n}\left|f_i'(x_1^*,\cdots,x_n^*)\right|\varepsilon(x_i^*)$$

$$\varepsilon_r(y^*)\lessapprox\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{x_i^*}{y^*}f_i'(x_1^*,\cdots,x_n^*)\right|\varepsilon_r(x_i^*)$$

泰勒公式分析初值误差传播（续）

- 二元函数算术运算误差传播规律

➢绝对误差限

$$\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) \approx \varepsilon(x_1^*) + \varepsilon(x_2^*)$$

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

$$\varepsilon\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) \approx \frac{|x_2^*|\varepsilon(x_1^*) + |x_1^*|\varepsilon(x_2^*)}{|x_2^*|^2}$$

$$(x_2^* \neq 0)$$

➢相对误差限

$$\varepsilon_r(x_1^* + x_2^*) \approx \max\{\varepsilon_r(x_1^*), \varepsilon_r(x_2^*)\}$$

$$(x_1^* x_2^* > 0)$$

$$\varepsilon_r(x_1^* x_2^*) \approx \varepsilon_r(x_1^*) + \varepsilon_r(x_2^*)$$

$$(x_1^* x_2^* \neq 0)$$

$$\varepsilon_r\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) \approx \varepsilon_r(x_1^*) + \varepsilon_r(x_2^*)$$

$$(x_1^* x_2^* \neq 0)$$

§1.3 数值实验与算法性能比较

重点精讲1.4
算法性能比较

❖简化计算步骤以减少运算次数。

➢例1

$$3^{16}=3^{8}*3^{8}=3^{4}*3^{4}*3^{8}=3^{2}*3^{2}*3^{4}*3^{8}$$
$$=3*3*3^{2}*3^{4}*3^{8}$$

➢例2　秦九韶算法

$$a_4x^4+a_3x^3+a_2x^2+a_1x+a_0$$
$$=(((a_4x+a_3)x+a_2)x+a_1)x+a_0$$

选用算法应遵循的原则（续）

❖**合理安排量级相差很大的数之间的运算次序，尽可能避免大数“吃掉”小数。**

➢例 $$987654321+\sum_{k=1}^{1000000}\delta_k \qquad (0<\delta_k\le 1)$$

❖尽量避免相近的数相减

➢例 $x=52.127$ $x^*=52.129$ 四位有效数字

$y=52.123$ $y^*=52.121$ 四位有效数字

$A=x-y=0.004$ $A^*=x^*-y^*=0.008$

零位有效数字

➢结论：避免相近数相减

选用算法应遵循的原则（续）

➢一些避免相近数相减示例

• 当|x|>>1时

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

$$\ln(x+1)-\ln x=\ln\frac{x+1}{x}$$

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

$$\ln(x-\sqrt{x^2-1})=-\ln(x+\sqrt{x^2-1})$$

• 当|x|<<1时

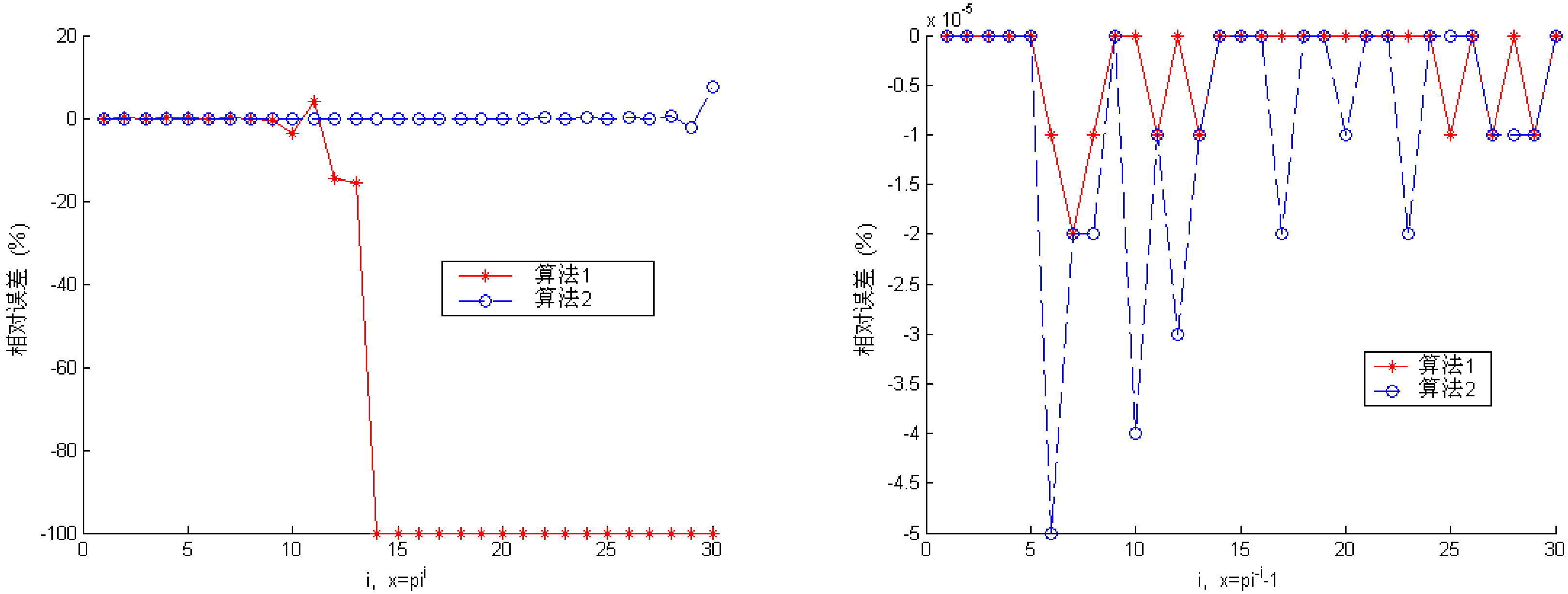
$$1-\sqrt{1-x^2}=\frac{x^2}{1+\sqrt{1-x^2}}$$

$$\arctan x-x=-\frac{x^3}{3}+\frac{x^5}{5}-\cdots$$

$$\sin x-x=-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^5}{5!}+\cdots$$

选用算法应遵循的原则（续）

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



两种算法的相对误差图

左图 $x \to \infty$ **右图** $x \to -1$

选用算法应遵循的原则（续）

❖**尽可能避免绝对值很小的数做分母，防止出现溢出。**

当a,b中有近似值时，由

$$\left|e\left(\frac{a}{b}\right)\right| \le \frac{|a|\cdot|e(b)|+|b|\cdot|e(a)|}{b^2} \quad (b \ne 0)$$

若 $|b| << |a|$，则 $e\left(\frac{a}{b}\right)$ 可能很大，从而引起严重误差，或者会发生计算机“溢出”，导致计算无法进行下去。

❖选用数值稳定性好的算法。

- 定义：一个算法，如果在运算过程中舍入误差在一定条件下能够得到控制，或者舍入误差的增长不影响产生可靠的结果，则称该算法是数值稳定的, 否则称其为数值不稳定.

❖例：计算如下积分近似值的两种方案比较

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

➢方法1：

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln\frac{6}{5} \approx 0.1823$$

$$I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1} \quad (n = 1,2,\cdots)$$

方法1计算结果

n	I_n^*	$\lvert I_n^* - I_n \rvert$
0	0.1823	0.00002
1	0.0885	0.0001
2	0.0575	0.0005
3	0.0458	0.0027
4	0.0208	0.0135
5	0.0958	0.0673
6	$-$0.3125	0.3368
7	1.7054	1.6842
8	$-$8.4018	8.4206
9	42.1200	42.1031
10	$-$210.5002	210.5156

方法一结果分析

- 方法一分析：计算结果表明，舍入误差的传播近似依5的幂次进行增长，因而是一种不稳定的方法。

$$I_n^* = \frac{1}{n} - 5I_{n-1}^* \quad I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1} \quad \left|e_n^*\right| = 5\left|e_{n-1}^*\right| = 5^2\left|e_{n-2}^*\right| = 5^n\left|e_0^*\right|$$

➢方法二：

$$I_{n-1}^* = \frac{1}{5n} - \frac{I_n^*}{5} \qquad I_{n-1} = \frac{1}{5n} - \frac{I_n}{5} \qquad \left|e_{n-1}^*\right| = \tfrac{1}{5}\left|e_n^*\right|$$

由此分析知，该方法是稳定的。关于初值的近似可由下面式子得到：

$$\frac{1}{6(n+1)} = \int_0^1 \frac{x^n}{6}dx \le I_n \le \int_0^1 \frac{x^n}{5}dx = \frac{1}{5(n+1)}$$

方法2计算结果

n	I_n^*	$\left\|I_n^* - I_n\right\|$
0	**0.1823**	**0.2156**×**10**$^{-6}$
1	**0.0884**	**0.7784**×**10**$^{-7}$
2	**0.0580**	**0.3892**×**10**$^{-6}$
3	**0.0431**	**0.3873**×**10**$^{-6}$
4	**0.0343**	**0.6330**×**10**$^{-7}$
5	**0.0285**	**0.3165**×**10**$^{-6}$
6	**0.0243**	**0.2491**×**10**$^{-6}$
7	**0.0212**	**0.3262**×**10**$^{-6}$
8	**0.0189**	**0.6308**×**10**$^{-6}$
9	**0.0167**	**0.2265**×**10**$^{-5}$
10	**0.0167**	**0.1332**×**10**$^{-4}$

$$I_{10}^* = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{55} + \frac{1}{66}\right) \approx 0.0167$$

#

选用算法应遵循的原则（续）

总之, 除了算法的正确性之外, 在算法设计中至少还应注意如下几个方面的问题:

1 简化计算步骤以减少运算次数;
2 合理安排量级相差很大的数之间的运算次序, 防止大数"吃掉"小数;
3 尽量避免两个相近的近似数相减;
4 尽可能避免绝对值很小的数做分母,防止出现溢出;
5 选用数值稳定性好的算法.

Remark:数学上等价的算法在数值计算中并不总是等价的！！！