数值计算方法

理学院计算科学系

李腊全

E-mail: lilq@cqupt.edu.cn

2023.07

目录：

一、绪 论

内容提要：

1.1 数值分析研究对象

1.2 数值计算的误差

1.1 数值分析研究对象

计算机解决科学计算问题时经历的过程

实际问题 → 模型设计 → 算法设计 → 程序设计 → 上机计算 → 问题的解

实例

求 $\sqrt{2}$ → 方程求根 $x^2 = 2$ → 牛顿法 $x_{k+1} = \frac{1}{2}(x_K + \frac{2}{x_K})$ → 程序设计 → 上机计算 → 解 $x_0 = 1$， $x_1 = 1.5$， $x_3 = 1.417$， $\cdots$

1.2 数值计算的误差

一、误差的来源

在运用数学方法解决实际问题的过程中，每一步都可能带来误差。

1、**模型误差** 在建立数学模型时，往往要忽视很多次要因素，把模型“简单化”，“理想化”，这时模型就与真实背景有了差距，即带入了误差。

2、**测量误差** 数学模型中的已知参数，多数是通过测量得到。而测量过程受工具、方法、观察者的主观因素、不可预料的随机干扰等影响必然带入误差。

3、**截断误差** 数学模型常难于直接求解，往往要近似替代，简化为易于求解的问题，这种简化带入误差称为方法误差或截断误差。

例如：函数 $f(x)$ 用泰勒 (Taylor) 多项式

$$P_n(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n$$

近似代替，则数值方法的截断误差是泰勒余项。

4、**舍入误差** 计算机只能处理有限数位的小数运算，初始参数或中间结果都必须进行四舍五入运算，这必然产生舍入误差。

例如：用3.14159近似代替π，产生的误差

$$R = \pi - 3.14159 = 0.0000026\cdots$$

二、避免误差危害的若干原则

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 x/y，若$0<|y|<<|x|$，则可能对计算结果带来严重影响，应尽量避免。

2、要避免两相近数相减

在数值计算中两相近数相减有效数字会严重损失。例如，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。通过改变算法可以避免两相近数相减。

例如 $\sqrt{x+1}-\sqrt{x}$ $(x>>1)$ 可改为 $\dfrac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$,

$1-\cos x$ $(|x|<<1)$ 可改为 $2\sin^2\left(\dfrac{x}{2}\right)$

例1-8

(1) $\ln(x-\sqrt{x^2-1})$ (x 很大) (2) $\dfrac{\sin x}{x-\sqrt{x^2-1}}$ (x 很大)

(3) $\lg x_1-\lg x_2$ x_1 与 x_2 接近 (4) $\arctan(x+1)-\arctan x$ (x 很大)

等等，都可以得到比直接计算好的结果。

答案

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

(3) $\lg\dfrac{x_1}{x_2}$ (4) $\arctan(\dfrac{1}{1+(x+1)x})$

3、要防止“大数”吃掉小数

数值运算中参加运算的数有时数量级相差很大，而计算机位数有限，如不注意运算次序就可能出现大数“吃掉”小数的现象，影响计算结果的可靠性。

如用六位浮点数计算某市的工业总产值，原始数据是各企业的工业产值，当加法进行到一定程度，部分和超过100亿元 （0.1×1011），再加产值不足10万元的小企业产值，将再也加不进去。而这部分企业可能为数不少，合计产值相当大.这种情况应将小数先分别加成大数，然后相加，结果才比较正确。**这个例子告诉我们，在计算机数系中，加法的交换律和结合律可能不成立，这是在大规模数据处理时应注意的问题。**

4、注意简化计算步骤，减少运算次数

减少算术运算的次数不但可减少计算机的计算时间，还能减少误差的积累效应。使参加运算的数字精度应尽量保持一致，否则那些较高精度的量的精度没有太大意义。

例如　计算多项式值

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

解：法一：直接计算 $a_k x^k$ 再逐项相加，一共需要做

$n + (n-1) + \cdots + 2 + 1 = \dfrac{n(n+1)}{2}$ 次乘法和 n 次加法。

法二：采用秦九韶算法

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

即　$P_n(x) = ((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x \cdots + a_1)x + a_0$

只要计算 n 次乘法和 n 次加法就可算出 $P_n(x)$ 的值。

中国大学生在线——数学建模：（历年赛题讲评）

https://dxs.moe.gov.cn/zx/hd/sxjm/sxjmstjp/

全国大学生数学建模竞赛：

http://www.mcm.edu.cn/

谢谢聆听

THANK YOU FOR YOUR ATTENTION