计算方法

主讲：张晓丹

学习方法

- 1.注意掌握各种方法的基本原理
- 2.注意各种方法的构造手法与程序实现
- 3.重视各种方法的误差分析
- 4.做一定量的习题及上机实践
- 5.注意与实际问题相结合

参材

- <应用计算方法教程>, 张晓丹等编,机械出版社 。（第2版）

- 考试方法
- 1.开卷笔试占60%

  考试只可带：教材，计算器。

  不能带其它资料及复印件进考场。
- 2. 上机作业占40%

计算方法

什么是计算方法 ？

它的任务、内容与特点？

应用计算机解决数学问题的数值方法

计算方法是一门与计算机紧密结合的数学课程

计算机解决实际问题的步骤

建立数学模型

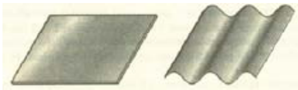
构造数值方法

编写程序

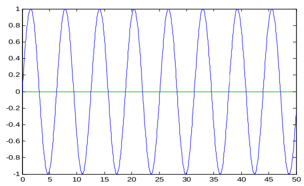
上机计算

结果分析

例1



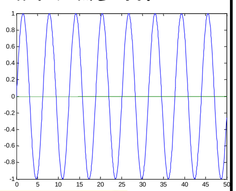
一个波浪形屋顶板是由一块铝板压制成横截面呈正弦波的波浪板构成.



现订购一块长4 ft 的波浪板.波形高(距中线)是1 in, 一个波浪的周期近似2π in. 问原始平板需多长?

现订购一块长4 ft 的波浪板.波形高(距中线)是1 in, 一个波浪的周期近似2π in. 问原始平板需多长?

数学问题：求曲线 $f(x) = \sin x$ 从 $x = 0$ in. 到 $x = 48$ in. 的长度.



$$L = \int_0^{48} \sqrt{1+(f'(x))^2}\, dx = \int_0^{48} \sqrt{1+(\cos x)^2}\, dx,$$

一个定积分的计算问题

第二类椭圆积分不能用常规方法计算

二. 构造数值方法

三. 编写程序

用高级编程语言:

FORTRAN, C , Matlab

四. 上机计算

五. 结果分析

计算方法的任务与内容

- 任务：对于来自工程实际中的数学问题，进行数值处理，提供在计算机上实际可行的方法。
- 内容：介绍各种数学问题的数值解法；研究数值方法的性态、可靠性、效率与软件实现。

计算方法的特点

较强理论性与实用性，

其理论性强体现在构造算法与分析算法需要坚实的数学理论；

其实用性强体现在构造的算法要在计算机上实际可行.

一个面向计算机，计算复杂性好,又有可靠精度的算法就是一个好算法.

学习方法

1.注意掌握各种方法的基本原理

2.注意各种方法的构造手法与程序实现

3.重视各种方法的误差分析

4.做一定量的习题

5.注意与实际问题相联系

1 概论

计算方法中几个基本概念

- 算法与计算量
- 计算机数系
- 误差
- 问题的性态与数值稳定性

什么是算法和计算量？

算法 从给定的已知量出发，按照规定的运算顺序经过有限次运算，最后求出未知量的数值解，这样构成的完整计算步骤称为算法。P3

计算量 一个算法所需四则运算总次数. P5

一个算法所需的乘除运算总次数，单位是flop.

计算量是衡量一个算法好坏的重要标准。

例3 计算 $x^{255}, \forall x \in R.$

$A: x^{255}=\overbrace{x \cdot x \cdots x}^{254}$

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

Algorithm B(Matlab)　(input x, output y)

```
s = x;
y = x;
for i = 1:7
  s = s*s;
  y = y*s;
end
```

计算量 $N = 14\ flop$

Algorithm C

```
s = x;
y = x;
for i = 1:8
  s = s*s;
end
y = s / y
```

$C: x^{255}=\overbrace{(\ldots((x^2)^2)^2\ldots)^2}^{8}/x$

计算量 $N = 9\ flop$

例 4 计算多项式

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

算法1

```
t = 1
u = a_0
for i = 1:n
 t = x*t
 u = u + a_i*t
end
y = u
```

计算量

$N=2n\ flop$

算法2　(秦九韶算法)

```
p = a(n)
for k = n-1:-1:0
  p = x*p + a(k)
end
y = p
```

计算量

$N=n\ flop$

其原理为:

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

矩阵乘积AB的计算量分析

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \ldots & a_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & & \\ a_{m1} & a_{m2} & a_{mm-1} & \ldots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & \ldots & b_{1s} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & \ldots & b_{2s} \\ \ldots & \ldots & \ldots & & \\ b_{n1} & b_{n2} & b_{nn-1} & \ldots & b_{ns} \end{pmatrix} = [c_{ij}]_{m\times s}$$

A　　　B

$$C_{ij}=\sum_{k=1}^{n} a_{ik}b_{kj} \quad i=1,\cdots,m;\ j=1,\cdots,s$$

A B 的计算量为N= (m ×n ×s)flop

矩阵乘积 $A_{m\times s}B_{s\times l}C_{l\times n}$ 的计算量

(1)　$(AB)C$　　(2)　$A(BC)$

$A_{100\times 10}B_{10\times 1}C_{1\times 100}$

N1=11000

N2=101000

(1)的计算量为

N1= (m ×s ×*l*+m ×*l* ×*n*)flop

(2)的计算量为

N1≠ N2

N2= (*s* ×*l* ×*n*+*m* ×*s*×*n*)flop

计算机数系　P_{6-10}

在实数系中，每一个实数可以有无穷位，不同的实数代表数轴上不同的点；

$$\sqrt{3} = 1.732050808 \quad \cdots$$

在计算机数系中，每一个数只有有限位，只有部分有理数能被计算机数系中的数精确表示。

$\sqrt{3}$不能被计算机数系精确表示。

浮点数： 这种允许小数点位置浮动的表示法称为数的浮点形式。

$36.83=0.3683\times 10^2=0.03683\times 10^3$

实数x的十进制浮点形式为

尾数 阶码 基数

$x = \pm\ 0.a_1a_2 \ldots a_k \ldots \times 10^c,$ (1)

$a_i \in \{0, 1, 2, \ldots, 9\}$, $c \in Z$

$a_1 \neq 0$, (1)称为x 的规格化的浮点形式

---

x 的k位规格化十进制机器数

$y = \pm\ 0.a_1a_2 \ldots a_k \times 10^c$, $y = fl(x)$

$a_i \in \{0, 1, 2, \ldots, 9\}$, $a_1 \neq 0$, $L \le c \le U$,

k是机器数的字长； L、U 是常数。

x 的k位十进制机器数$fl(x)$可用两种方法获取：

（1） **截断式** $x = \pm\ 0.a_1a_2 \ldots a_ka_{k+1} \ldots \times 10^c$

$fl(x) = \pm\ 0.a_1a_2 \ldots a_k \times 10^c$

(2) **四舍五入式**

$$fl(x) = \begin{cases} \pm 0.a_1a_2 \cdots a_k \times 10^c & a_{k+1} < 5 \\ \pm(0.a_1a_2 \cdots a_k + 10^{-k}) \times 10^c & a_{k+1} \ge 5 \end{cases}$$

一般数制情况： k位规格化机器数

$y = \pm\ 0.a_1a_2 \ldots a_k \times \beta^c$, $\beta = 2, 8, 10, 16$,

$a_i \in \{0, 1, 2, \ldots, \beta-1\}$, $L \le c \le U$, $a_1 \neq 0$

例如： $y = 0.1001 \times 2^3$

F(β, k. L, U) **表示以上数集全体加数0， 它是计算机中使用的有限离散数集（机器数系）**。

F(β, k, L, U) **中的数称为机器数。**

F(10,4,-33,33)， $y = \pm\ 0.a_1a_2a_3a_4 \times 10^c$

二进制机器数系 F(2, 52, −1024, 1024)

例 在机器数系 F(10,4,-33,33)中表示 $fl(\pi)$.

$$\pi = 3.1415926 \cdots \notin F(10, 4, -33, 33),$$

但是 $0.1000 \times 10^{-33} < \pi < 0.9999 \times 10^{33}$

采用截断式 $fl(\pi)$=0.3141×10

采用四舍五入式 $fl(\pi)$=0.3142×10

若浮点数的阶码不在[L,U]内， 则出现上溢(overflow)或下溢(underflow)。

例如 在4位机器数系 **F(10,4,-33,33)**中输入 $\mathbf{2.8 \times 10^{-34}}$ 出现下溢， 输入 $\mathbf{1.99 \times 10^{34}}$ 出现上溢。

下溢：对应的机器数取作零；

上溢：对应的机器数取作无穷大.

二进制数系： F(2, 52, −1024, 1024)

机器数为64位二进制数——s c f，双精度数。

符号位s占1位=1, 0； （0正1负）

指数c占11位， 底为2； c的最大值为$2^{11}-1=2047$

尾数f，分数占52位.

- **机器数转化为十进制浮点数的形式**

$(-1)^s\ 2^{c-1023}(1+f)$， **具有16位精度.**

例 设有二进制机器数 ***(64 bit)***

$\underline{0}\ \underline{10000000011}\ 1011100100\overbrace{0 \cdots 00}^{40}$

S=0

$\mathbf{C = 1 \cdot 2^{10} + 0 \cdot 2^9 + \cdots + 0 \cdot 2^2 + 1 \cdot 2^1 + 1 \cdot 2^0 = 1027}$

$$f = 1 \cdot (\frac{1}{2})^1 + 1 \cdot (\frac{1}{2})^3 + 1 \cdot (\frac{1}{2})^4 + 1 \cdot (\frac{1}{2})^5 + 1 \cdot (\frac{1}{2})^8 + 1 \cdot (\frac{1}{2})^{12}$$

$$(-1)^s 2^{c-1023}(1+f)$$

$$= (-1)^0 \cdot 2^{1027-1023}(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{8} + \frac{1}{16} + \frac{1}{32} + \frac{1}{256} + \frac{1}{4096})$$

$$= 27.56640625$$

机器数的四则运算：

1. 加减法先对阶,后运算,再舍入

fl(x) ± fl(y)=fl(fl(x) ± fl(y))

例如 在F(10,4,-33,33)的计算机上计算$1+10^4$

解: $1+10^4=0.1000\times10^1+0.1000\times10^5$

$=0.00001\times10^5+0.1000\times10^5$ (对阶，靠高阶)

$=0.10001\times10^5=0.1000\times10^5=10^4$

2. 乘除法先运算,再舍入

fl(x) × fl(y)=fl(fl(x) × fl(y)),

fl(x) ÷ fl(y)=fl(fl(x) ÷ fl(y))

3. 不在计算机数系中的数做四舍五入处理

▲ 误差

误差的来源

1、模型误差	问题固有误差	
2、观测误差	仪器误差	
3、截断误差	方法误差	重点
4、舍入误差	四则运算的误差	

例5：截断误差

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

求 e^{-1} 的近似值，并估计误差。

当$x=-1$时， $e^{-1}=1+(-1)+\frac{1}{2!}-\frac{1}{3!}+\cdots+\frac{(-1)^n}{n!}+\cdots$

解：利用展开式的前三项，取 $n=2$

$$e^{-1}\approx1+(-1)+\frac{1}{2}(-1)^2=0.5$$

截断误差 $|R_2|=|e^{-1}-0.5|\leqslant\frac{1}{3!}<1.7\times10^{-1}$

$$R_n(x)=\frac{x^{n+1}}{(n+1)!}e^{\theta x},\qquad 0<\theta<1$$

例6：舍入误差

$$1.492\times1.066=1.590472$$

设在一台4位数字的计算机上计算

$$1.492\times1.066\approx1.590$$

舍入误差为 0.000472

▲ 误差定义 P9

近似值x的绝对误差(absolute error)

e = x*−x, x是近似数, x*是准确数 。

绝对误差限ε: | e | = | x*−x |≤ ε, x − ε ≤x* ≤x + ε

近似值x的相对误差(relative error)

e_r =(x*−x)/ x* = e/x* 或 e_r = (x*−x)/x = e/x

相对误差限ε_r: | e_r | = | x*−x |/|x*| ≤ ε_r

绝对误差及误差限是有量纲的，而相对误差及误差限是没有量纲的.

相对误差比绝对误差更能反映准确数与近似数的差异。

例:考虑 1. x =10, x*=11 , e=1 e_r=0.1

2. x =1000, x*=1001, e=1 e_r=0.001

有效数字(significant digits)

设：$X=\pm 10^{n}\times 0.a_1a_2\cdots a_k$,

如果 $|e| = |x-x^*| \le 0.5\times 10^{n-k}$

称近似数X准确到小数点后第k位,从小数点后第k位数字直到最左边非零数字之间的所有数字都称为有效数字.

用四舍五入得到的规范化浮点数,每一位都是有效数字。有效数字越多,误差越小,计算结果越精确。

例：设 $x=\sqrt{3}=1.7320508..$

$x_1=1.73$, $x_2=1.7321$, $x_3=1.7320$是其近似值,问它们分别有几位有效数字?

$$|x-x_1|=|\sqrt{3}-1.73|<0.0021<0.5\times 10^{1-3}$$

故x_1有三位有效数字。

$$|x-x_2|=|\sqrt{3}-1.7321|<0.0000491 \ \ldots <0.5\times 10^{1-5}$$

故x_2有五位有效数字。

$$|x-x_3|=|\sqrt{3}-1.7320|<0.0000508 \ \ldots <0.5\times 10^{1-4}$$

故x_3有四位有效数字。

例 计算 $e^{0.5}$ 的近似值，使相对误差不超过0.5×10^{-3}.

解： e^x 的 Maclaurin 级数：

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

当 $x=0.5$时， $e^{0.5}=1+0.5+\frac{0.5^2}{2!}+\cdots+\frac{0.5^n}{n!}+\cdots$

令 $S_n = 1+0.5+\frac{0.5^2}{2!}+\cdots+\frac{0.5^n}{n!}$, $n=0,1\cdots$；则 $\lim_{n\to\infty} S_n = e^{0.5}$

迭代法的相对误差为 $e_n = \frac{S_n - S_{n-1}}{S_n}$

$S_0=1$,
$S_1=1+0.5=1.5$

$$|e_1| = \left|\frac{S_1-S_0}{S_1}\right| = \frac{1.5-1}{1.5} = 0.333$$

计算结果如表所示

n	S_n	e_n
0	1	
1	1.5	0.333
2	1.625	0.0769
3	1.645833	0.0175
4	1.6484375	0.00158
5	1.648698	0.000158

$e^{0.5}\approx S_5=1.648698$,

$|e_5| = 0.000158 < 0.5\times 10^{-3}$

例 计算ln1.7的近似值，使绝对误差不超过 10^{-5}.

lnx 在 $x_0=1$的泰勒级数

$$\ln x = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k+1}}{k}(x-1)^k,\quad 0<x\le 2$$

$$P_n(x)=\sum_{k=1}^{n}\frac{(-1)^{k+1}}{k}(x-1)^k \qquad \ln 1.7 = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k+1}}{k}(0.7)^k = \sum_{k=1}^{\infty} a_k$$

交错级数

$$P_n(1.7)=\sum_{k=1}^{n}\frac{(-1)^{k+1}}{k}(0.7)^k \qquad |\ln 1.7 - P_n(1.7)| < 10^{-5}$$

$$|\ln 1.7 - P_n(1.7)| < |a_{n+1}| = \frac{(0.7)^{n+1}}{n+1} < 10^{-5}$$

$$\ln x = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k+1}}{k}(x-1)^k,\quad 0<x\le 2$$

$$\ln 1.7 = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k+1}}{k}(0.7)^k = \sum_{k=1}^{\infty} a_k$$

$$P_n(1.7)=\sum_{k=1}^{n}\frac{(-1)^{k+1}}{k}(0.7)^k$$

$$|\ln 1.7 - P_n(1.7)| < |a_{n+1}| = \frac{(0.7)^{n+1}}{n+1} < 10^{-5}$$

当n=23时，

$$|\ln 1.7 - P_{23}(1.7)| < |a_{24}| = 7.9826\text{e-}006 < 10^{-5}$$

$$\ln 1.7 \approx P_{23}(1.7) = 0.530633$$

▲ 四则运算的误差　　**P12-14**

x 的绝对误差： $e(x)=x^*-x=\Delta x\approx dx$

x 的相对误差： $e_r(x)=(x^*-x)/x\approx dx/x=d\ln x$

利用这个关系可以讨论四则运算的误差和误差限。

设x, y同号，其四则运算的绝对误差

$|e(x\pm y)|\approx|d(x\pm y)|=|dx\pm dy|<|dx|+|dy|$

$|e(xy)|\approx|d(xy)|=|ydx+xdy|$

$|e(x/y)|\approx|d(x/y)|=|(ydx-xdy)/y^2|,\quad y\neq 0$

相对误差的运算　　x, y同号

$$|e_r(x\pm y)|\approx\left|\frac{d(x\pm y)}{x\pm y}\right|=\left|\frac{dx\pm dy}{x\pm y}\right|\le\left|\frac{dx}{x\pm y}\right|+\left|\frac{dy}{x\pm y}\right|=\left|\frac{dx}{x}\right|\left|\frac{x}{x\pm y}\right|+\left|\frac{dy}{y}\right|\left|\frac{y}{x\pm y}\right|$$

$$|e_r(x+y)|\approx\left|\frac{d(x+y)}{x+y}\right|\le\left|\frac{dx}{x}\right|\left|\frac{x}{x+y}\right|+\left|\frac{dy}{y}\right|\left|\frac{y}{x+y}\right|\le\max\left\{\left|\frac{dx}{x}\right|,\left|\frac{dy}{y}\right|\right\}$$

$$|e_r(x-y)|\approx\left|\frac{d(x-y)}{x-y}\right|\le\left|\frac{dx}{x}\right|\left|\frac{x}{x-y}\right|+\left|\frac{dy}{y}\right|\left|\frac{y}{x-y}\right|$$

$$|e_r(xy)|\approx\left|\frac{d(xy)}{xy}\right|=\left|\frac{dx}{x}+\frac{dy}{y}\right|\le\left|\frac{dx}{x}\right|+\left|\frac{dy}{y}\right|$$

$$|e_r(x/y)|\approx\left|\frac{d(x/y)}{x/y}\right|=\left|\frac{dx}{x}-\frac{dy}{y}\right|\le\left|\frac{dx}{x}\right|+\left|\frac{dy}{y}\right|$$

一般的　　若 $u=f(x,y)$，则

$$e(u)\approx df(x,y)=\frac{\partial f}{\partial x}dx+\frac{\partial f}{\partial y}dy,$$

$$e_r(u)\approx\frac{df(x,y)}{f}=\frac{\frac{\partial f}{\partial x}dx+\frac{\partial f}{\partial y}dy}{f}.$$

例如, u=xy, $e(u)\approx d(xy)=ydx+xdy$;　$e_r(u)\approx\frac{ydx+xdy}{xy}=\frac{dx}{x}+\frac{dy}{y}$

若 $u=f(x,y)$，则　$e(u)\approx df(x,y)=\frac{\partial f}{\partial x}dx+\frac{\partial f}{\partial y}dy,$

$$e_r(u)\approx\frac{df(x,y)}{f}=\frac{\frac{\partial f}{\partial x}dx+\frac{\partial f}{\partial y}dy}{f}.$$

特别地,若 $y=f(x)$, 则

$$e(y)\approx df=f'(x)dx,\quad e_r(y)\approx\frac{df}{f}=\frac{f'(x)dx}{f}.$$

例如，　$f(x)=x^n$,

$$e(f)\approx df=f'(x)dx=nx^{n-1}dx$$

$$e_r(f)\approx\frac{df}{f}=\frac{nx^{n-1}dx}{x^n}=n\frac{dx}{x}$$

特别关注：

1. $|e(x/y)|\approx|d(x/y)|=\left|\frac{ydx-xdy}{y^2}\right|$

分母接近零会产生较大的**绝对误差**。

2. $|e_r(x-y)|\approx\left|\frac{d(x-y)}{x-y}\right|\le\left|\frac{dx}{x}\right|\left|\frac{x}{x-y}\right|+\left|\frac{dy}{y}\right|\left|\frac{y}{x-y}\right|$

相近的两数相减会产生较大的**相对误差**。

数值计算中值得注意的问题　P21

一、防止相近的两数相减

例1:当x>>1时,计算　$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}$

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

例2 计算　$\frac{1-\cos x}{\sin x},\quad x=2^\circ$

当x很小时，分子出现相近数相减，将以上算式变形

$$\frac{(1-\cos x)(1+\cos x)}{\sin x(1+\cos x)}=\frac{1-\cos^2 x}{\sin x(1+\cos x)}=\frac{\sin x}{1+\cos x}$$

二、防止大数吃小数

当两个绝对值相差很大的数进行加法或减法运算时,绝对值小的数有可能被绝对值大的数"吃掉"从而引起计算结果很不可靠.

例:在F(10,5,-19,19)中，计算 23456+0.2+0.4+0.4

上式=$0.23456\times 10^5+0.000002\times 10^5+0.000004\times 10^5+0.000004\times 10^5=23456$

P9

在上式中，重新排序计算

上式= $0.2+0.4+0.4+23456=1+23456=0.00001\times 10^5+0.23456\times 10^5=23457$

在计算机数系中，加减法的交换律与结合律不成立

三、防止接近零的数做除数

分母接近零的数会产生溢出错误,因而产生大的误差,此时可以用数学公式化简后再做.

四、注意计算步骤的简化,减小运算次数

简化计算步骤是提高程序执行速度的关键，它不仅可以节省时间，还能减少舍入误差。

数值计算中值得注意的问题

一、防止相近的两数相减

二、防止大数吃小数

三、防止接近零的数做除数

四、注意计算步骤的简化,减小运算次数

问题的性态与数值稳定性 P15

• **良态与病态**：在一个数学问题中，若初始数据的微小变化，只引起计算结果的微小变化，则称问题是良态的；反之，若初始数据的微小变化引起计算结果的较大变化，则称问题是病态的。

例 7 求 $p(x)=x^2+x-1150$ 在 $x=100/3$ 与 $x=33$ 处的值。

解：$p(100/3)=-(50/9)\approx -5.6$, 而 $p(33)=-28$

初始数据的微小变化 $|(100/3)-33|<0.34$,就引起计算结果的较大变化 $|-5.6+28|=22.4$,问题是病态的。

计算$p(x)$在$x=1, x=1.1$处的值。

解：$p(1)=-1148$, $p(1.1)=-1147.7$

初始数据的微小变化,只引起计算结果的微小变化，问题是良态。

▲ 在计算机上是否根据数学公式编程就能得到正确结果?

研究例子:求解线性方程组

$$\begin{cases} x_1+\frac{1}{2}x_2+\frac{1}{3}x_3=\frac{11}{6} \\ \frac{1}{2}x_1+\frac{1}{3}x_2+\frac{1}{4}x_3=\frac{13}{12} \\ \frac{1}{3}x_1+\frac{1}{4}x_2+\frac{1}{5}x_3=\frac{47}{60} \end{cases}$$

如把方程组的系数舍入成两位有效数字

$$\begin{cases} x_1+0.50x_2+0.33x_3=1.8 \\ 0.50x_1+0.33x_2+0.25x_3=1.1 \\ 0.33x_1+0.25x_2+0.20x_3=0.78 \end{cases}$$

它的解为x_1=-6.222…

x_2=38.25…

x_3=-33.65…

其准确解为$x_1=x_2=x_3=1$

此问题是病态的

P16

• 设R为计算结果的相对误差，e为初始数据的相对误差，若能找到一个正数m,使得 $|R|\le m|e|$，则m是计算结果的相对误差对初始数据的相对误差的放大倍数。

• 显然若问题是病态的，则m大，若问题是良态的，m就小。m称为问题的条件数(condition number)

例：函数求值问题的条件数

设f(x)在[a,b]上有连续导数，计算f(x)在 $\bar{x}\in[a,b]$ 的值。

$$e=\frac{dx}{\bar{x}},\qquad R=\frac{f(\bar{x}+dx)-f(\bar{x})}{f(\bar{x})}$$

$f(\bar{x}+dx)-f(\bar{x})=f'(\xi)dx$，$\xi$ 位于 $\bar{x},\bar{x}+dx$ 之间，

由于 $f'(x)$ 连续，故当 dx 很小时， $f'(\xi)\approx f'(\bar{x})$

从而 $f(\bar{x}+dx)-f(\bar{x})\approx f'(\bar{x})dx$

$$\frac{f(\bar{x}+dx)-f(\bar{x})}{f(\bar{x})}\approx\bar{x}\frac{f'(\bar{x})}{f(\bar{x})}\bullet\frac{dx}{\bar{x}}$$

$$\Rightarrow |R|\le\left|\bar{x}\frac{f'(\bar{x})}{f(\bar{x})}\right||e| \quad 即 \quad \boxed{cond\ (f)=\left|\bar{x}\frac{f'(\bar{x})}{f(\bar{x})}\right| \ (1)}$$

例7 中的条件数为

$$cond(p(\frac{100}{3}))=\left|\frac{100}{3}\frac{p'(\frac{100}{3})}{p(\frac{100}{3})}\right|=406$$

$$cond(p(1))=1\cdot\frac{3}{1148}\approx 2.6\times10^{-3}$$

不同的数学问题，其条件数的定义是不同的，公式（1）仅适用于函数求值，其它问题的条件数以后还会讨论。病态问题求解是一个很复杂的问题，本书基本不涉及。

数值稳定性（Numerical Stability）：一个数值算法，若输入数据的误差在计算过程不增长，并对最终结果影响不大，就称该算法是数值稳定的算法；否则是不稳定算法。P17

对某些数据算法是稳定的，称算法具有<u>条件稳定性</u>(conditionally stable)；对任何数据算法均是稳定的称算法具有<u>无 条件稳定性</u>(unconditionally stable)

例 在F(10,4,-19,19)数系中，求解二次方程：$x^2-320x+16=0$

解法1 按求根公式 $x_{1,2}=\dfrac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$

解得，$x_1=0.3199\times10^3$，$x_2=0.1000\times10$； $b^2>>4ac$

解法2 $x_1=\dfrac{-b-sgn(b)\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$ 解得 $x_1=0.3199\times10^3$，$x_2=0.5002\times10^{-1}$

$x_2=\dfrac{c}{ax_1}\quad(x_1x_2=\dfrac{c}{a})$

精确解为 $x_1=319.950$，$x_2=0.0500078$

一般的，求二次方程 $ax^2+bx+c=0$ 的根。

方法1: $x_{1,2}=\dfrac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$，

当 $b^2>>4ac$ 时算法不稳定，条件稳定。

方法2: $x_1=\dfrac{-b-\mathrm{sgn}(b)\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$，$x_2=\dfrac{c}{2x_1}$

此算法无条件稳定。

定义 $E_0>0$，是初始误差，E_n是算法n步之后的误差。若 $E_n\approx CnE_0$，C是常数；称误差的增长是线性的(linear)。若 $E_n\approx C^nE_0$ (C>1)，则称误差的增长是指数级的(exponential)。

若算法的误差增长是指数级的，则它是不稳定的。

例 计算 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}dx \quad n = 0, 1, \cdots, 23$

解

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5}dx = \ln 6 - \ln 5 = 0.182321556\cdots$$

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

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

算法A $\begin{cases} I_0 = 0.182321556\cdots \\ I_n = -5I_{n-1} + \frac{1}{n} \end{cases} \quad n = 1, 2, \cdots, 23$

$$I_1 = -5I_0 + 1, \quad I_2 = -5I_1 + \frac{1}{2}, \cdots$$

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

由A算得的结果如下：n=0-- 11

0. 1823　0. 0884　0. 0580　0. 0431　0. 0340　0. 0285
0. 0243　0. 0212　0.0188　0.0169　0.0154　0.0141

n=12-- 23

0.0130　0.0120　0.0112　0.0105　0.0099　0.0093
0.0090　0.0075　0.0127　-0.0159　0.1252　-0.5824

I_{21}以后正负交替，结果是错误的。

$I_0 = 0.182321556\cdots \approx \bar{I}_0 = 0.18232, \quad e_0 = I_0 - \bar{I}_0,$

$\bar{I}_1 = -5\bar{I}_0 + 1, \quad I_1 = -5I_0 + 1 \quad e_1 = I_1 - \bar{I}_1 = -5e_0$

设$\bar{I}_n$是I_n的近似，并设$e_n = I_n - \bar{I}_n$ ($n \geq 0$)

$\because I_n = -5I_{n-1} + 1/n$,

$\bar{I}_n = -5\bar{I}_{n-1} + 1/n$

则有 $e_n = -5e_{n-1} = (-5)^n e_0$

误差增长是指数的，算法A不稳定。

算法A $\begin{cases} I_0 = 0.182321556\cdots \\ I_n = -5I_{n-1} + \frac{1}{n} \end{cases}, n = 1, \cdots, 23$

算法A不稳定。

$e_0 = \frac{(-1)^n}{5^n}e_n$

算法B $\begin{cases} I_{25} \approx 0.0071 \\ I_{n-1} = -\frac{I_n}{5} + \frac{1}{5n}, n = 25, \cdots, 1 \end{cases}$

误差逐渐缩小。

n=1 -- 14

0.1823　0.0884　0.0580　0.0431　0.0343　0.0285　0.0243
0.0212　0.0188　0.0169　0.0154　0.0141　0.0130　0.0120

n=15-- 24

0.0112　0.0105　0.0099　0.0093　0.0088　0.0084　0.0080
0.0076　0.0073　0.0069

算法B是稳定的。

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

$\because 0 \leq I_n \leq I_{n-1}$, 又 $I_n + 5I_{n-1} = \frac{1}{n}$,

$\therefore 5I_{n-1} \leq \frac{1}{n} \leq 6I_{n-1}$, $\therefore \frac{1}{6n} \leq I_{n-1} \leq \frac{1}{5n}$

$e_0 = \frac{(-1)^n}{5^n}e_n$

特别有：$\frac{1}{6 \times 26} \leq I_{25} \leq \frac{1}{5 \times 26}$

误差逐渐缩小。

$$I_{25} \approx \frac{1}{2}\left(\frac{1}{6 \times 26} + \frac{1}{5 \times 26}\right) \approx 0.0071$$

n=1 -- 14

0.1823　0.0884　0.0580　0.0431　0.0343　0.0285　0.0243
0.0212　0.0188　0.0169　0.0154　0.0141　0.0130　0.0120

n=15-- 24

0.0112　0.0105　0.0099　0.0093　0.0088　0.0084　0.0080
0.0076　0.0073　0.0069

算法B是稳定的。

$B: \begin{cases} I_{25} \approx 0.0071 \\ I_{n-1} = -\frac{I_n}{5} + \frac{1}{5n}, n = 25, \cdots, 1 \end{cases}$

序言

- 算法与计算量
- 计算机数系
- 误差及其运算
- 数值计算中应注意的问题
- 问题的性态
- 方法的数值稳定性

常见的数学问题有：

1 线性方程组求解: $Ax=b$

2 非线性方程求根: $f(x)=0$

3 矩阵特征值与特征向量的计算 $Ax=\lambda x$

4 函数逼近

5 积分与微分: $\int_a^b f(x)dx, \ f'(x)$

6 常微分方程求解

$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x,y) \\ y(0) = y_0 \end{cases} \qquad \begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x,y), a \leq x \leq b \\ y(a) = \alpha, \ y(b) = \beta \end{cases}$

作业

习题 1

1, 3，4,5（2）1），7, 13, 15, 16

补充题

1 计算 sin3/3 的近似值，使相对误差不超过 0.5×10^{-3}.