计算方法

北京师范大学数学科学学院
主讲人：纪光华
Email：ghji@bnu.edu.cn

课程评分方法

- 作业 50%
- 期末考试 50%

参考资料

1. 孙志忠、袁慰平、闻振初：数值分析(第三版) 东南大学出版社2011。
2. 张平文、李铁军：数值分析北京大学出版社。

常用软件（包）

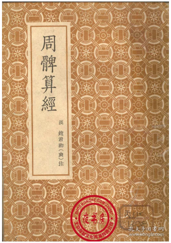
1. LAPACK: Fortran子程序库，求解线性方程组及最小二乘问题
2. netlib(https://netlib.org/)
3. IMSL(International Mathematical and Statistical Libraries): 数值数学（MATH）、统计学（STAT）和特殊函数库（SFUN）
4. NAG(Numerical Algorithms Group)
5. Matlab, Maple, Mathematica, Gauss, 北太天元

计算–第三种科学方法

1. 科学计算的兴起（20世纪）；
2. 计算性科学分支（计算力学、计算物理、计算化学、计算生物、计算地震学、计算流体力学等等）；
3. 计算在各种科学与工程领域作用日益增大（生命科学、天文学、医学、系统科学、经济学、社会科学、工程仿真等）；
4. 在国民经济与国防建设中，计算已经成为必不可少的手段（气象、核技术、石油勘探、航空航天、装备制造研发、交通运输、密码破译等）；
5. 著名物理学家、诺贝尔奖获得者Wilson教授指出，当今科学活动可分为三种：实验、理论和计算；
    - 实验–伽利略；
    - 理论分析–牛顿：三大定律、微积分；
    - 科学计算–冯.诺伊曼：电子计算机；

中国古代算术成就

算术成果：



算术大家：

1. 刘辉（三国）：《九章算术注》、《海岛算经》；
2. 祖冲之（南北朝）：圆周率（精确到小数点后7位）；
3. 杨辉（南宋）；杨辉三角；
4. 秦九韶（南宋）：《数书九章》–大衍求一术（中国剩余定理）、正负开方术（任意高次方程的数值解法）。

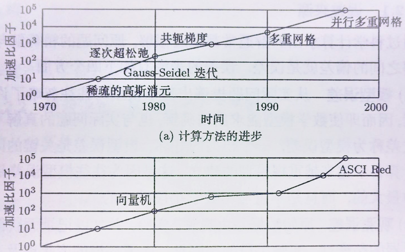
科学计算的重要地位

张平文：“计算无边界。现在什么都可以做计算，而你不知不觉中就在做计算。”（2019世界计算机大会）；

鄂维南：“大数据和人工智能为算法的研究和应用，包括为数值分析提供了无穷的空间。”

计算数学是科学计算的核心

- 人类的计算能力=计算工具的性能X计算方法的效能。



(a) 计算方法的进步

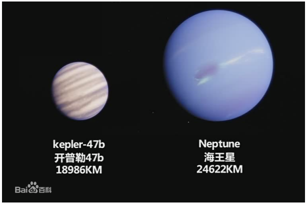
(b) 计算机的发展

- Babuska: “没有好的计算方法，超级计算机就是超级废铁”。

一个好的算法的评价标准

- 运算次数少；
- 运算过程具有规律性，便于编程；
- 要记录的中间结果少；（存储小）
- 能控制误差的传播和积累，以保证精度；

科学计算实例：海王星的发现



- 威廉.赫歇尔（1781）发现天王星；
- 天文学家发现，天王星经常“出轨”？
- 勒威耶（法国天文学家，1845）建立了9个条件方程；
- 勒威耶（1846）、亚当斯（英国，1845）计算出一个未知行星的轨道参数、质量和出现的位置；
- 伽勒（柏林天文台副台长）发现了海王星。

课程内容

1. 绪论
2. 非线性方程求根
3. 线性代数方程组的数值解法
4. 多项式插值与函数最佳逼近
5. 数值积分与数值微分
6. 快速Fourier变换
7. 常微分方程数值解法
8. Monte Carlo方法*
9. 神经网络与机器学习*

第一章、绪 论

本章主要内容

(1) **误差的概念**
绝对误差(限)、相对误差(限)、有效数字及它们之间的关系

(2) **数据误差对函数值的影响**
讨论函数的误差与自变量误差之间的关系

(3) **算法的数值稳定性**
讨论初始数据的误差对计算结果的影响

(4) **实际计算中应注意的一些问题**

1.1 误差的基本概念

1. 模型误差:
   英国统计学家George E.O.Box:"All models are wrong, but some are useful."
2. 观测误差:
   使用计量器具的过程中，由于观测者主观所引起的误差;
3. 截断误差:
   无限的计算过程用有限的计算过程来代替;
4. 舍入误差:
   运算得到的近似值和精确值之间的差异。比如当用有限位数的浮点数来表示实数时就会产生舍入误差;

★绝对误差

定义1.1

设x^*为准确值, x是x^*的一个近似值. 记

$$e(x) = x^* - x,$$

称$e(x)$为近似值x的绝对误差.

注1

这里定义的绝对误差不是误差的绝对值. 在参看其它资料时要注意.

在实际计算中,绝对误差一般无法求出(因为精确值x^*未知). 绝大多数情况下,只需知道误差的一个范围. 如果$\exists\ \varepsilon > 0$, 使得

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

则ε称为近似值x的绝对误差限, 有时也可以表示成$x^* = x \pm \varepsilon$.

★<u>相对误差</u>

定义1.2

设x^*为准确值, x是x^*的一个近似值. 记

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

则称$e_r(x)$为近似值x的相对误差.

由于精确值x^*难以求得, 通常以

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

作为x的相对误差.

如果$\exists\ \varepsilon_r$, 使得

$$|e_r(x)| \le \varepsilon_r \qquad \text{或} \qquad |\bar{e}_r(x)| \le \varepsilon_r,$$

则ε_r称为x的相对误差限.

★有效数

定义1.3

如果近似值x用科学计数法表示为$x = 0.\alpha_1\alpha_2 \cdots \times 10^m$其中$\alpha_1 \neq 0, m$为整数,并且误差满足$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$,其中$n$为使不等式成立的最大的整数，则称$x$具有$n$位有效数字. 如果近似值直到末位都是有效数字,则其为有效数.

如π的近似值取$x_1 = 3.14$, 则

$$|\pi - x_1| = 0.00159 \cdots < 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2},$$

所以x_1有3位有效数字; 如取$x_2 = 3.1416$, 则

$$|\pi - x_2| < 0.00005 = \frac{1}{2} \times 10^{-4},$$

所以x_2有5位有效数字; 如取$x_3 = 3.1415$, 则

$$|\pi - x_3| = 0.00009 \cdots < 0.0005 = \frac{1}{2} \times 10^{-3},$$

所以x_3只有4位有效数字.

1.2 数据误差对函数值的影响

一元函数$y=f(x)$的情况：设x^*为准确值，$y^*=f(x^*)$，x为对应的近似值，$y=f(x)$. 由函数Taylor展开式得

$$\begin{aligned} e(y) \quad &= y^*-y=f(x^*)-f(x) \\ &\approx \frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}(x^*-x) \end{aligned}$$

即

$$e(y)\approx \frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}e(x) \tag{1}$$

从而可以得到

$$e_r(y)=\frac{e(y)}{y} \qquad \approx \frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}\frac{x}{f(x)}e_r(x). \tag{2}$$

二元函数$y=f(x_1,x_2)$的情况:
设x_1^*,x_2^*为准确值, $y^*=f(x_1^*,x_2^*)$, x_1,x_2为对应的近似值, $y=f(x_1,x_2)$. 由二元函数Taylor展开得

$$\begin{aligned} e(y) &= y^*-y=f(x_1^*,x_2^*)-f(x_1,x_2) \\ &\approx \frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1}(x_1^*-x_1)+\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2}(x_2^*-x_2), \end{aligned}$$

即

$$e(y)\approx \frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1}e(x_1)+\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2}e(x_2). \tag{3}$$

从而可以得到

$$\begin{aligned} e_r(y)=\frac{e(y)}{y} &\approx \frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1}\frac{x_1}{f(x_1,x_2)}e_r(x_1) \\ &+\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2}\frac{x_2}{f(x_1,x_2)}e_r(x_2). \end{aligned} \tag{4}$$

利用(3)和(4)可以得到

$$e(x_1 + x_2) = e(x_1) + e(x_2), \tag{5}$$

$$e(x_1 - x_2) = e(x_1) - e(x_2), \tag{6}$$

$$e(x_1 x_2) \approx x_2 e(x_1) + x_1 e(x_2), \tag{7}$$

$$e\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \frac{1}{x_2} e(x_1) - \frac{x_1}{x_2^2} e(x_2), \tag{8}$$

$$e_r(x_1 + x_2) = \frac{x_1}{x_1 + x_2} e_r(x_1) + \frac{x_2}{x_1 + x_2} e_r(x_2), \tag{9}$$

$$e_r(x_1 - x_2) = \frac{x_1}{x_1 - x_2} e_r(x_1) - \frac{x_2}{x_1 - x_2} e_r(x_2), \tag{10}$$

$$e_r(x_1 x_2) \approx e_r(x_1) + e_r(x_2), \tag{11}$$

$$e_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx e_r(x_1) - e_r(x_2). \tag{12}$$

例1.1

已知$x_1 = 1.021$, $x_2 = 2.134$是具有4位有效数字的近似值,
求$x_1 - x_2$, $x_1^2 - x_2^2$及$x_1^2 x_2$的绝对误差限和相对误差限.

解

$$|e(x_1)| \le \frac{1}{2} \times 10^{-3}, \quad |e(x_2)| \le \frac{1}{2} \times 10^{-3},$$

$$|e(x_1 - x_2)| \le |e(x_1)| + |e(x_2)| \le 10^{-3}.$$

$$|e_r(x_1 - x_2)| = \left| \frac{e(x_1 - x_2)}{x_1 - x_2} \right| \le \frac{10^{-3}}{1.113} = 8.9847 \times 10^{-4}.$$

$$e(x_1^2 - x_2^2) \approx 2(x_1 e(x_1) - x_2 e(x_2))$$

$$|e(x_1^2 - x_2^2)| \approx |2(x_1 e(x_1) - x_2 e(x_2))| \le 2(x_1 |e(x_1)| + x_2 |e(x_2)|)$$

$$\le 3.155 \times 10^{-3}.$$

$$e_r(x_1^2 - x_2^2) = \frac{e(x_1^2 - x_2^2)}{x_1^2 - x_2^2}.$$

$$|e_r(x_1^2 - x_2^2)| = \left| \frac{e(x_1^2 - x_2^2)}{x_1^2 - x_2^2} \right| \le 8.985 \times 10^{-4}.$$

$$|e(x_1^2 x_2)| \approx |2x_1 x_2 e(x_1) + x_1^2 e(x_2)| \le 2x_1 x_2 |e(x_1)| + x_1^2 |e(x_2)|$$

$$\le 2.7 \times 10^{-3}.$$

$$|e_r(x_1^2 x_2)| = \left| \frac{e(x_1^2 x_2)}{x_1^2 x_2} \right| \le 1.2134 \times 10^{-3}$$

有效数字缺失

对近似相等的两个数字相减造成有效数字位数的减少。例如，两个具有7位有效数位的数，现在需要对它们进行相减：

$$
\begin{array}{rl}
 & 123.4567 \\
- & 123.4566 \\
 & -------- \\
 & 000.001
\end{array}
$$

例1.2

设$x_1^* = \sqrt{2001}$, $x_2^* = \sqrt{1999}$, $x_1 = 44.7325$, $x_2 = 44.7102$, 已知x_1, x_2分别是x_1^*, x_2^*的具有6位有效数字的近似值. 计算$\sqrt{2001} - \sqrt{1999}$, 现有下面两种算法:

1)
$$x_1^* - x_2^* \approx x_1 - x_2 = 44.7325 - 44.7102 = 0.0223.$$

2)
$$\begin{aligned} x_1^* - x_2^* &= \frac{2}{x_1^* + x_2^*} \approx \frac{2}{x_1 + x_2} = \frac{2}{44.7325 + 44.7102} \\ &= 0.0223606845 \cdots . \end{aligned}$$

试分析上述两种算法所得结果的有效数字.

解 由条件得

$$|e(x_1)| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}, \quad |e(x_2)| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}.$$

$$\begin{aligned} |e(x_1 - x_2)| &= |e(x_1) - e(x_2)| \leq |e(x_1)| + |e(x_2)| \\ &\leq \frac{1}{2} \times 10^{-4} + \frac{1}{2} \times 10^{-4} = 10^{-4} < \frac{1}{2} \times 10^{-3}. \end{aligned}$$

因此方法(1)所得结果至少具有2位有效数.

$$
\begin{aligned}
\left|e\left(\frac{2}{x_1+x_2}\right)\right| &\approx \left|-\frac{2}{(x_1+x_2)^2}[e(x_1)+e(x_2)]\right| \\
&\le \frac{2}{(x_1+x_2)^2}[|e(x_1)|+|e(x_2)|] \\
&\le \frac{2}{(44.7325+44.7102)^2}\left(\frac{1}{2}\times 10^{-4}+\frac{1}{2}\times 10^{-4}\right) \\
&= 0.25\times 10^{-7} < \frac{1}{2}\times 10^{-7}
\end{aligned}
$$

按方法(2)得到的结果至少具有6位有效数字.

例1.3

求二次多项式$x^2+9^{12}x=3$的两个根。

解： $$x_{1,2}=\frac{-9^{12}\pm\sqrt{9^{24}+12}}{2},$$

取负号：$x_1\approx-2.824\times10^{11}$;

取正号：$x_2=\dfrac{-9^{12}+\sqrt{9^{24}+12}}{2}$ 在零附近

$$x_2=\frac{6}{9^{12}+\sqrt{9^{24}+12}}\approx1.062\times10^{-11}.$$

1.3 机器数系

1) 数的浮点表示:$x = \pm(0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n)\beta^p$;
其中$0 \leq \alpha_i < \beta$ $(1 \leq i \leq n)$, $L \leq p \leq U$.

2) 机器中的数集是有限的:

$$F(\beta, n, L, U)$$
$$= \{0\} \bigcup \left\{ x \,\middle|\, \begin{array}{l} x = \pm(0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n)\beta^p, 1 \leq \alpha_1 \leq \beta - 1, \\ 0 \leq \alpha_i \leq \beta - 1, i = 2, 3, \cdots, n, L \leq p \leq U \end{array} \right\}$$

例:假设$n = 2, \beta = 2, U = 2, L = -1$

3) 实数$x \xrightarrow{\text{舍入误差}} fl(x)$(机器数).

4) 其中的四则运算并不满足实数系中的运算规律.

运算举例

例：设有舍入机，已知
$n=3, L=-5, U=5, x=1.623, y=0.184, z=0.00362$，
求$u=(x+y)+z, v=x+(y+z)$。
解：$fl(x)=0.162x10^1, fl(y)=0.184x10^0, fl(z)=0.362x10^{-2}$

$fl(x)+fl(y)=0.162x10^1+0.0184x10^1=0.180x10^1$

$u=0.180x10^1+0.362x10^{-2}=0.180x10^1+0.000x10^1=0$

$fl(y)+fl(z)=0.184x10^0+0.04x10^0=0.188x10^0$

$v=0.162x10^1+0.019x10^1=0.181x10^1$

1.4 算法的数值稳定性

★<u>数值稳定性</u>

定义1.4

对于某一种算法，如果初始数据有小的误差仅使最终结果产生较小的误差，则称该算法是数值稳定的，否则称为不稳定的.

例1.4

建立计算积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx, \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots, 10.) \tag{13}$$

的递推公式，并研究其误差传播.

解

$$
\begin{aligned}
I_n &= \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1} - 5x^{n-1}}{x+5} dx \\
&= \int_0^1 x^{n-1} dx - 5\int_0^1 \frac{x^{n-1}}{x+5} dx \\
&= \frac{1}{n} - 5I_{n-1}, \qquad (n = 1, 2, \cdots, 10.) \\
I_0 &= \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln(6/5).
\end{aligned}
$$

从而得到计算I_n的递推关系

$$
\begin{aligned}
I_n &= \frac{1}{n} - 5I_{n-1}, \qquad (n = 1, 2, \cdots, 10.) \qquad (14) \\
I_0 &= \ln(6/5). \qquad (15)
\end{aligned}
$$

计算时, 取I_0的具有6位有效数的近似值$\tilde{I}_0 = 0.182322$, 设$\tilde{I}_i$表示I_i的近似值, 则实际计算公式为

$$
\begin{aligned}
\tilde{I}_n &= \frac{1}{n} - 5\tilde{I}_{n-1}, \qquad (n = 1, 2, \cdots, 10.) \\
\tilde{I}_0 &= 0.182322.
\end{aligned}
$$

由上式计算可得到下列结果

$$
\begin{aligned}
\tilde{I}_1 &= 1 - 5\tilde{I}_0 = 0.0883900, & \tilde{I}_2 = \frac{1}{2} - 5\tilde{I}_1 = 0.0580500, \\
\tilde{I}_3 &= \frac{1}{3} - 5\tilde{I}_2 = 0.0430833, & \tilde{I}_4 = \frac{1}{4} - 5\tilde{I}_3 = 0.0345835, \\
\tilde{I}_5 &= \frac{1}{5} - 5\tilde{I}_4 = 0.0270825, & \tilde{I}_6 = \frac{1}{6} - 5\tilde{I}_6 = 0.0312542, \\
\tilde{I}_7 &= \frac{1}{7} - 5\tilde{I}_6 = -0.0134139, & \tilde{I}_8 = \frac{1}{8} - 5\tilde{I}_7 = 0.192070, \\
\tilde{I}_9 &= \frac{1}{9} - 5\tilde{I}_8 = -0.849239, & \tilde{I}_{10} = \frac{1}{10} - 5\tilde{I}_9 = 4.34620.
\end{aligned}
$$

由于$I_n > 0$且单调减，显然计算有误差．事实上，记$e_n = I_n - \tilde{I}_n$ $(n = 0, 1, 2, \cdots, 10)$，则

$$I_n - \tilde{I}_n = (-5)(I_{n-1} - \tilde{I}_{n-1})$$

即

$$|e_n| = 5|e_{n-1}| = 5^n|e_0|.$$

用另一种方法计算.

$$I_{n-1} = \frac{1}{5}(\frac{1}{n} - I_n), \quad (n = 10, 9, \cdots, 2, 1.) \tag{16}$$

只要计算出I_{10}的近似值$\tilde{I}_{10}$, 就可以算出其它的值. 同样有

$$|e_{n-1}| = \frac{1}{5}|e_n|, \quad (n = 10, 9, \cdots, 2, 1,)$$

或

$$|e_{10-k}| = (\frac{1}{5})^k |e_{10}|, \quad (k = 1, 2, \cdots, 10.)$$

所以递推(16)是稳定的. 由积分中值定理

$$I_n = \frac{1}{\xi_n + 5}\int_0^1 x^n dx = \frac{1}{\xi_n + 5} \cdot \frac{1}{n+1}, \quad (0 < \xi_n < 1).$$

$\Rightarrow$

$$\frac{1}{6}\frac{1}{n+1} < I_n < \frac{1}{5}\frac{1}{n+1}.$$

可以取

$$\tilde{I}_n = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{6}\frac{1}{n+1} + \frac{1}{5}\frac{1}{n+1}\right),$$

$$\tilde{I}_{10} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{6}\frac{1}{10+1} + \frac{1}{5}\frac{1}{10+1}\right) = \frac{1}{60}.$$

有误差估计

$$|I_{10} - \tilde{I}_{10}| \leq \frac{1}{2}\left(\frac{1}{55} - \frac{1}{66}\right) = \frac{1}{660}.$$

★病态问题

例1.5

研究方程（*Wilkinson*多项式）

$$p(x) = (x-1)(x-2)\cdots(x-20) = x^{20} - 210x^{19} + \cdots = 0 \quad (17)$$

解 该方程的精确根是$x_i = i$, $i = 1, 2, \cdots, 20$. 若将系数-210作微小扰动变成$-210 + 2^{-23}$, 则方程为

$$p(x) + 2^{-23}x^{19} = 0 \qquad (18)$$

可以计算其根分别是

$$\begin{array}{ccc} 1.000000000, & 2.000000000, & 3.000000000, \\ 4.000000000, & 4.999999928, & 6.000006944, \\ 6.999697234, & 8.007267603, & 8.917250249, \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} 10.095358137 \pm 0.643500904i, & 11.793633881 \pm 1.652329728i, \\ 13.992358137 \pm 2.518830070i, & 16.730737466 \pm 2.812624894i, \\ 19.502439400 \pm 1.940330347i, & 20.846908101. \end{array}$$

其中10个根变成了复数. 这是一个病态问题.

1.5 实际计算中应注意的一些问题

1) 要尽量避免除数绝对值远远小于被除数绝对值.
$e\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \frac{1}{x_2}e(x_1) - \frac{x_1}{x_2^2}e(x_2).$

2) 要尽量避免两个相近的数相减.
$e_r(x_1 - x_2) = \frac{x_1}{x_1 - x_2}e_r(x_1) - \frac{x_2}{x_1 - x_2}e_r(x_2).$
$\sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}};$
当x很大时, $\ln(x+1) - \ln(x) = \ln(1 + 1/x);$
当$|x| << 1$时, $1 - \cos(x) = 2\sin^2(x/2).$

3) 要防止大数"吃"小数

4) 简化计算步骤, 减少运算次数

例1.6
计算$x^{31} = x \cdot x^2 \cdot x^4 \cdot x^8 \cdot x^{16}$, 进行$8$次乘法.

例1.7

计算多项式$P_n(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_{n-1}x + a_n$.

若直接计算，则需要$\frac{n(n+1)}{2}$次乘法，n次加法. 将多项式改写为

$$P_n(x) = (\cdots((a_0x + a_1)x + a_2)x + \cdots + a_{n-1})x + a_n,$$

令

$$\begin{aligned} b_0 &= a_0 \\ b_1 &= b_0x + a_1 \\ b_2 &= b_1x + a_2 \\ &\vdots \\ b_n &= b_{n-1}x + a_n = P_n(x) \end{aligned}$$

即可得到递推公式

$$\begin{aligned} b_0 &= a_0, && (19) \\ b_k &= b_{k-1}x + a_k, \quad k = 1, 2 \cdots, n. && (20) \end{aligned}$$

$P_n(x) = b_n$. 这就是**秦九韶法**. 它需要n次乘法和n次加法.

上机作业

1. 利用双精度计算如下算式的值，期中$x = 10^{-1}, \cdots, 10^{-14}$。然后使用另外一种形式的算式，避免两个近似相等的数相减的问题，重复这个计算，对结果制表。报告对于每个x在原始表达中有效数字的位数。

$$(a)\ \frac{1-\sec x}{\tan^2 x}; \qquad (b)\ \frac{1-(1-x)^2}{x};$$