计算方法

胡 敏
合肥工业大学 计算机与信息学院
jsjxhumin@hfut.edu.cn
uhnim@163.com

A 算法

- 计算方法（数值分析）：计算机求解数学问题，理论+计算根据计算机的特点提供数学问题的切实可行算法；
- 算法——对操作的描述，即解决问题的操作步骤。

这里所说的算法：

1、必须是构造性的数值方法

2、构造是通过数值演算过程来完成的

3、是解题方案的准确和完整的描述

$$\text{计算机算法}\begin{cases}\text{数值运算算法}\\\text{非数值运算算法}\end{cases}$$

如何评价不同算法的好坏呢？

一个好的算法应具有如下特点：

A 算法

（1）结构简单，易于计算机实现；
（2）理论上要保证方法的收敛性和数值稳定性；
（3）计算效率高：计算速度快，节省存储量；
（4）经过数值实验检验，证明行之有效。

我们在学习的过程中，要注意掌握数值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、收敛性和稳定性的基本理论。

例1:证明二次方程

$$x^2+2bx+c=0 \qquad (1)$$

至多有两个不同的实根。

1、反证法:

假设方程有三个互异的实根x_1、x_2、x_3, 则有

$x_1^2+2bx_1+c=0$

$x_2^2+2bx_2+c=0$

$x_3^2+2bx_3+c=0$

两两相减得

$x_2+x_1+2b=0$

$x_3+x_2+2b=0$

从而有$x_1=x_3$,与假设矛盾,

故原方程至多有两个不相等的实根。

2、图解法

配方得:

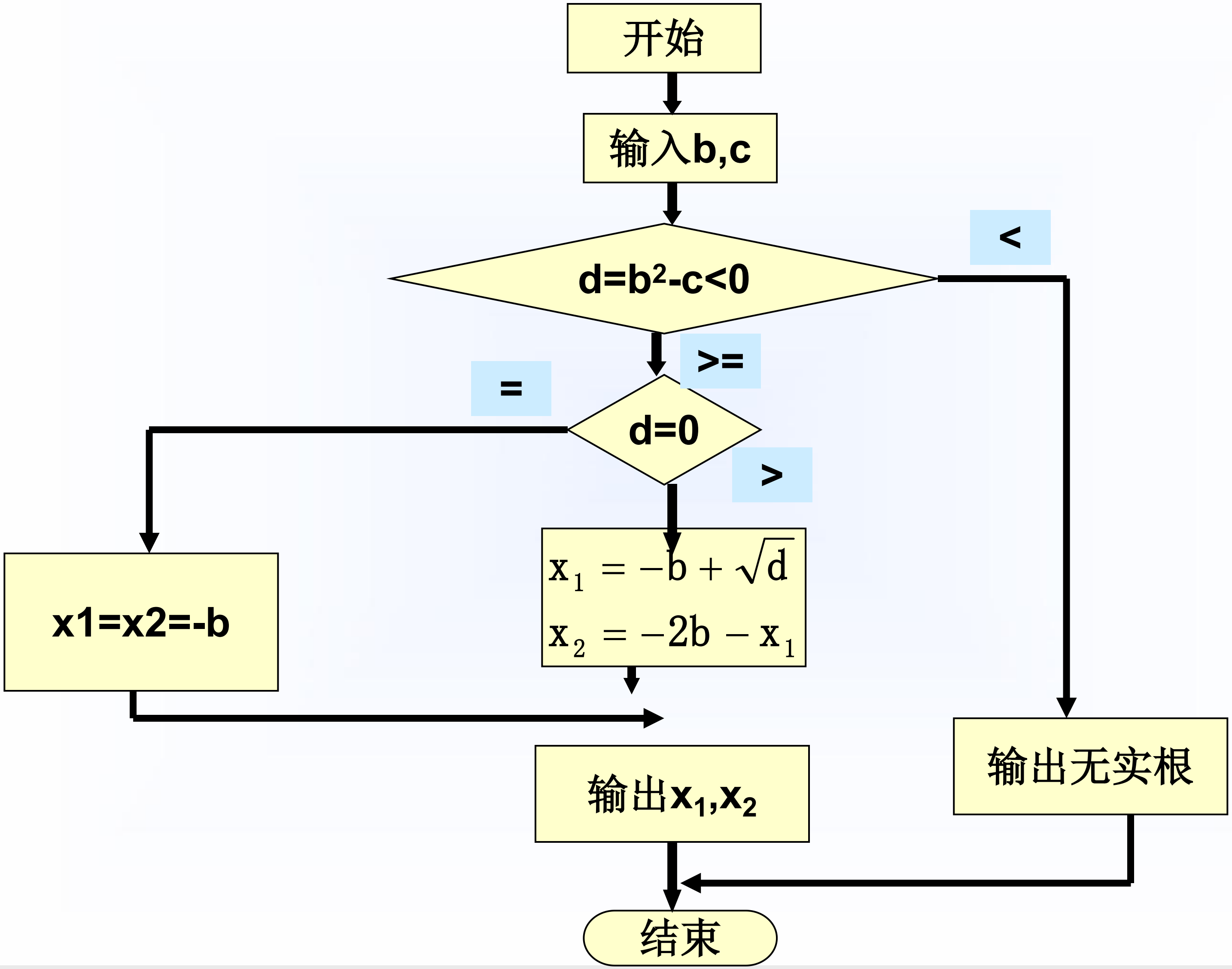
$$(x+b)^2+c-b^2=0 \qquad (2)$$

由此知,它与x轴至多有两个交点。

3、公式法

$$x_{1,2}=-b\pm\sqrt{b^2-c} \qquad (3)$$

算法的描述：



算法的基本特征：

1、以计算公式为核心
2、递推

两个常用算法：

- 多项式求值的秦九韶方法
- 方程求根的二分法

多项式求值:

- 对给定x求下列多项式的值
  $p(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\ldots+a_nx^n$
- 方法一：逐项求和

依次求出$x,x^2,\ldots x^n$,再依次求和

令$t_k=x^k,u_k= a_0+a_1x+a_2x^2+\ldots+a_kx^k$，则有

则有$\begin{cases} t_k = x \bullet t_{k-1} \\ u_k = u_{k-1} + a_k t_k \end{cases}$

取初值$\begin{cases} t_0 = 1 \\ u_0 = a_0 \end{cases}$带入上式反复执行，所得结果就是$p(x)$的值。

- 计算量：2n次乘法,n次加法

方法二：秦九韶算法

- 方法二：秦九韶算法

从 $p(x)= a_nx^n +\ldots+a_2x^2+a_1x+ a_0$ 的前两项中提出 x^{n-1}，得到：

$p(x) = (a_nx+a_{n-1})x^{n-1} +\ldots+a_2x^2+a_1x+ a_0$

依此类推， p(x)可化为：

$p(x) = ((a_nx+a_{n-1}) x+\ldots+ a_1)x+ a_0$

设用v_k表示第k层的值，则

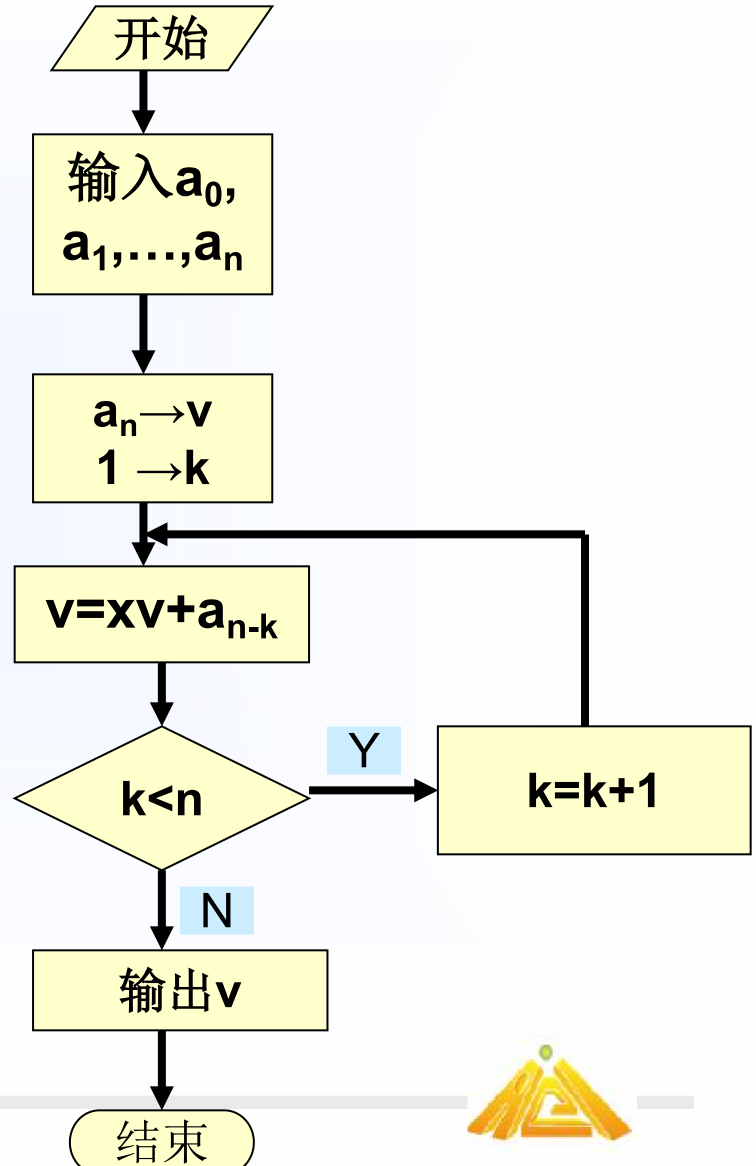
$v_k= xv_{k-1} +a_{n-k}$

取初值$v_0=a_n$

- 计算量：n次乘法，n次加法

秦九韶算法流程：

1. 输入$a_{1,\ldots,}a_n,v_0,k$的初值
2. 循环计算v_k的值
3. 当k=n时，循环结束，此时v中的值就是多项式$p(x)=a_nx^n+\ldots+a_2x^2+a_1x+a_0$的值



例： 利用秦九韶算法求多项式$p(x)=x^5-3x^4+4x^2-x+1$,在$x=3$ 时的值。（课本11页习题3）

解：$p(x)=(x-3)x^4+4x^2-x+1$

$=((x-3)x^2+4)x^2-x+1$

$=(((x-3)x^2+4)x-1)x+1$

$=((0*x^2+4)x-1)x+1$

$=(4x-1)x+1$

$=(4*3-1)*3+1$

$=34$

练习. $x=3,\ f=2x^5-5x^4-4x^3+3x^2-6x+7$

- 解：$f=(2x-5)x^4-4x^3+3x^2-6x+7$

$=((2x-5)x-4)x^3+3x^2-6x+7$

$=(((2x-5)x-4)x+3)x^2-6x+7$

$=((((2x-5)x-4)x+3)x-6)x+7$

$=((((2*3-5)*3-4)*3+3)*3-6)*3+7$

$=-11$

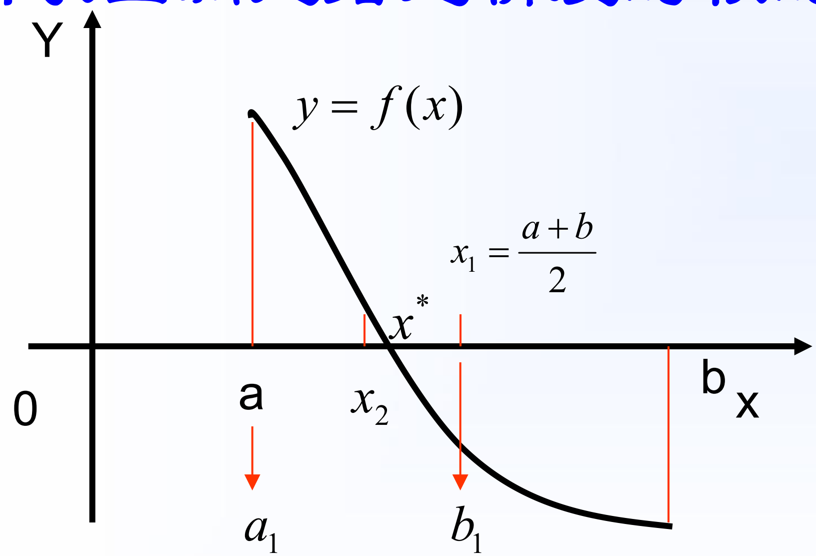
- 练习.

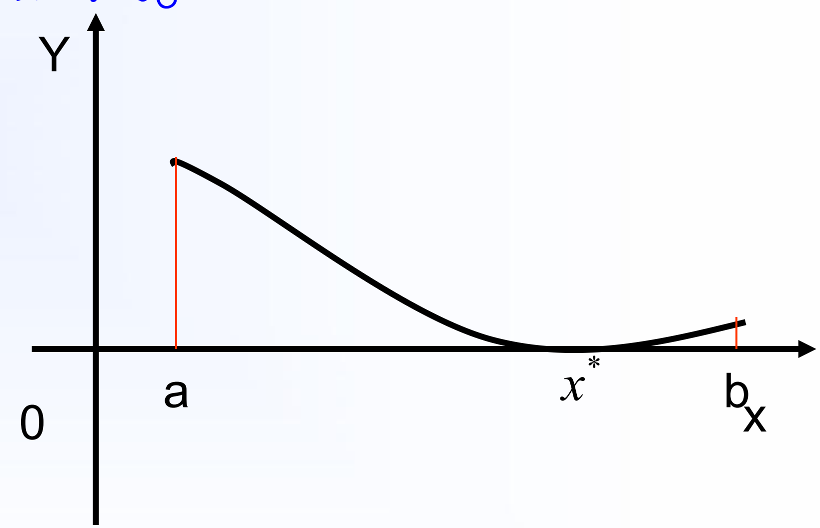
  有理函数是多项式的比值。对分子分母都采用嵌套式（秦九韶）形式计算会比逐项计算需要的运算量少，当分子和分母多项式的次数为n和d时，运算次数少多少？

方程求根的二分法

二分法的基本思想是：

逐步将有根区间分半，通过判别函数值的符号，进一步搜索有根区间，将有根区间缩小到充分小，从而求出满足给定精度的根的近似值。





$$b_k-a_k\le\frac{1}{2^k}(b-a)$$

$$x_{k+1}=\frac{1}{2}(a_k+b_k)$$

执行步骤

1．计算$f(x)$在有解区间[a, b]端点处的值，$f(a)$，$f(b)$。

2．计算$f(x)$在区间中点处的值$f(x_1)$。

3．判断若$f(x_1)=0$，则x_1即是根，否则检验：

（1）若$f(x_1)$与$f(a)$异号，则知解位于区间$[a, x_1]$，

$b_1=x_1,\ a_1=a;$

（2）若$f(x_1)$与$f(a)$同号，则知解位于区间$[x_1, b]$，

$a_1=x_1,\ b_1=b$。

反复执行步骤2、3，便可得到一系列有根区间：

$(a, b), (a_1, b_1), \ldots, (a_k, b_k), \ldots$

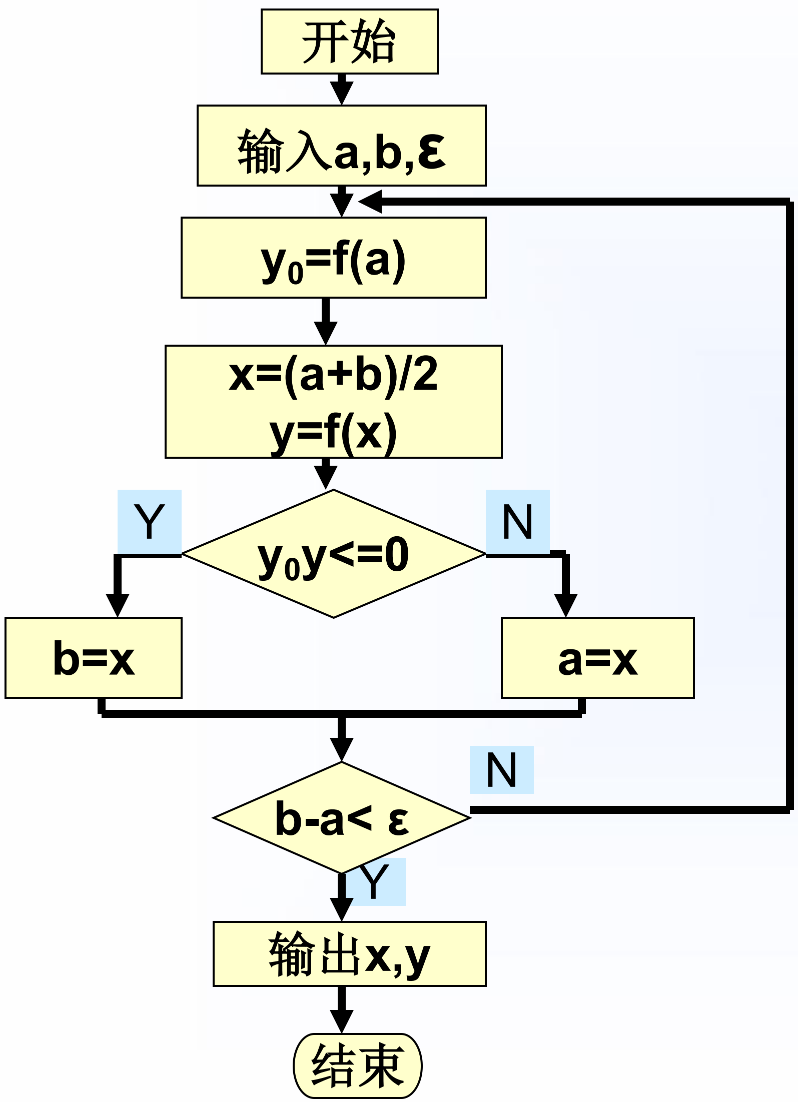
4、当 $\left|b_{k+1}-a_{k+1}\right|<\varepsilon$ 时

5、则 $x_{k+1}=\frac{1}{2}(a_k+b_k)$ 即为根的近似

①简单;
② 对 $f(x)$ 要求不高(只要连续即可) .

①无法求复根及偶重根
② 收敛慢

方程求根的二分法：



例：用二分法求方程$x^3-x-1=0$在区间[1，1.5]内的一个实根。要求误差不超过0.005.

误差估计式：

二分K次后的有根区间为：

$$b_k - a_k \le \frac{1}{2^k}(b-a)$$

$$|x^* - x_k| \le \frac{1}{2^{k+1}}(b-a)$$

$$0.005 = \frac{5}{1000} = \frac{1}{200}$$

$$\frac{1}{2^{6+1}}(1.5-1) = \frac{1}{2^{6+1}} \times \frac{1}{2} = \frac{1}{2^8}$$

$$= \frac{1}{256} < \frac{1}{200}$$

故需分6次

二分法的计算结果

k	a_k	b_k	x_k	$f(a_k)^* f(x_k)$
0	1.0000	1.5000	1.2500	>0
1	1.2500		1.3750	<0
2		1.3750	1.3125	>0
3	1.3125		1.3438	<0
4		1.3438	1.3281	<0
5		1.3281	1.3203	>0
6	1.3203		1.3242	

练习：用二分法求方程$e^x+10x-2=0$在[0,1]内的近似根，要求误差不超过$1/2*10^{-2}$.(课本11页，习题2)

根据误差分析式$|x-x^*|\le \dfrac{1}{2^{k+1}}(b-a)<\dfrac{1}{2}\times 10^{-2}=\dfrac{1}{200}$,可得

$\dfrac{1}{2^{7+1}}\times(1-0)=\dfrac{1}{256}<\dfrac{1}{200}$,故需做7次二分

k	a_k	b_k	x_k	$f(a_k)*f(x_k)$
0	0	1	0.5000	<0
1		0.5000	0.2500	<0
2		0.2500	0.1250	<0
3		0.1250	0.0625	>0
4	0.0625		0.0937	<0
5		0.0937	0.0781	>0
6	0.0781		0.0859	>0
7	0.0859		0.0898	

B 误差

解决科学技术和工程问题的步骤：

实际问题→数学模型→数值计算方法

→程序设计→上机计算求出结果

用计算机求解数学问题的数值计算方法、理论及软件实现

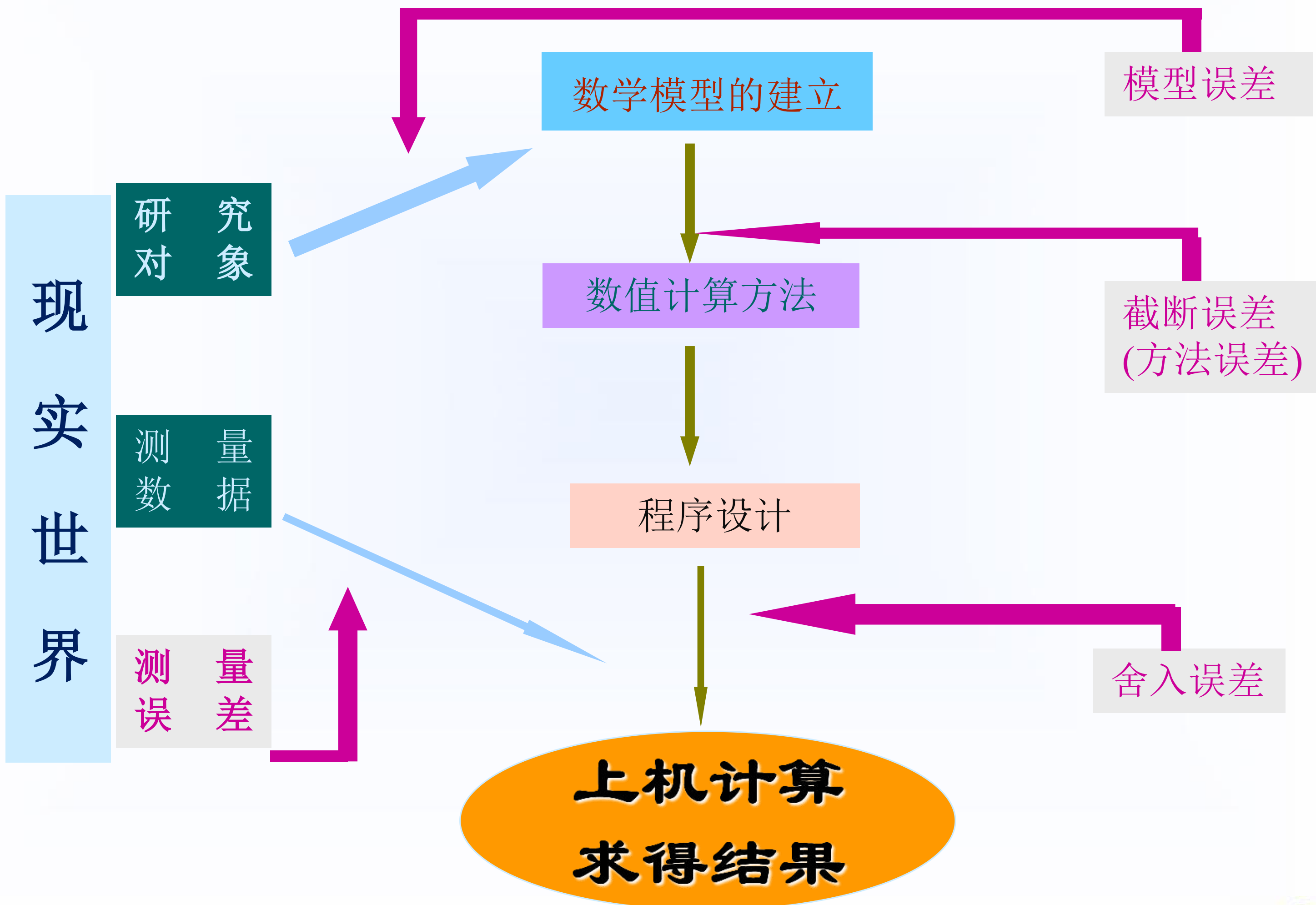
例 考虑线性方程组数值解问题 $Ax=b$

相关理论与精确解法 纯数学

根据方程的特点研究算法及相关理论 计算数学

面向计算机提供有效算法；

•误差的来源



现实世界
研究对象
测量数据
测量误差
数学模型的建立
数值计算方法
程序设计
上机计算
求得结果
模型误差
截断误差
(方法误差)
舍入误差

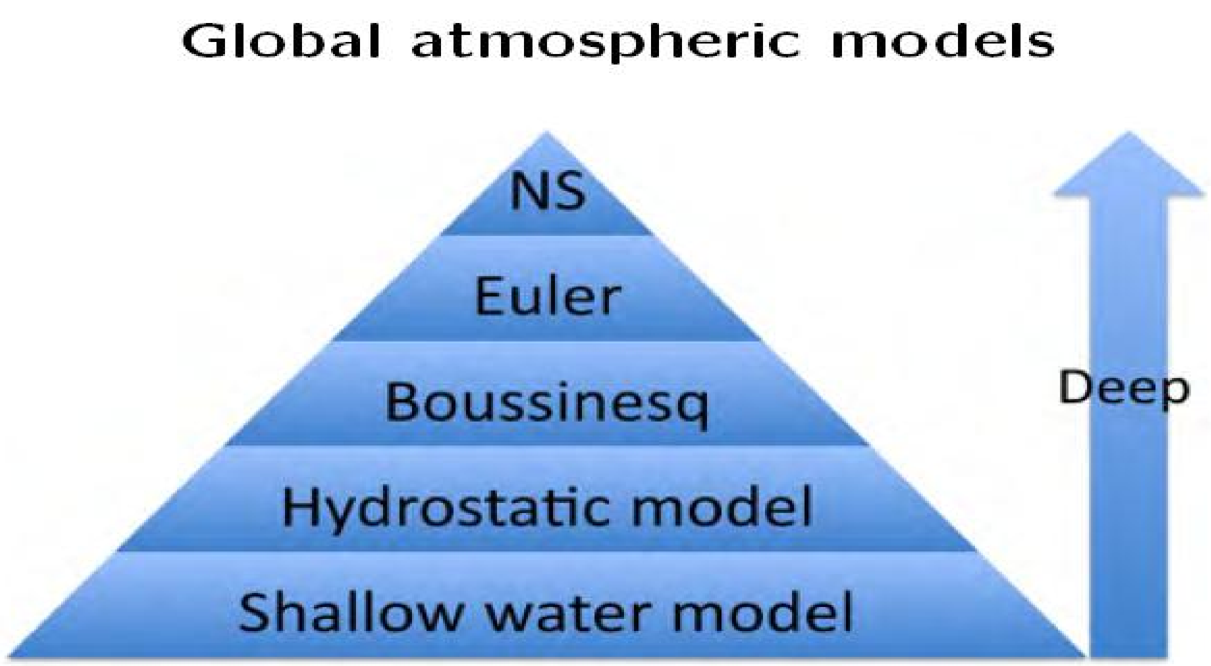
2.误差的来源：

- 误差来源
  - 固有误差
    - 测量误差
    - 模型误差
  - 计算误差
    - 截断误差
    - 舍入误差

本课程主要考虑数值计算产生的误差

误差的来源（1/4）

通过对实际问题进行抽象、简化得到的数学模型，与实际现象之间必然存在误差，这种误差称之为模型误差。



误差的来源（2/4）

一般数学问题包含若干参量，他们的值往往通过观测得到，而观测难免不带误差，这种误差称之为观测误差。

4、已经测得在某处海洋不同深度处的水温如下：

深度（M）	466	741	950	1422	1634
水温（^{o}C）	7.04	4.28	3.40	2.54	2.13

根据这些数据，希望合理地估计出其它深度（如500米，600米，1000米…）处的水温

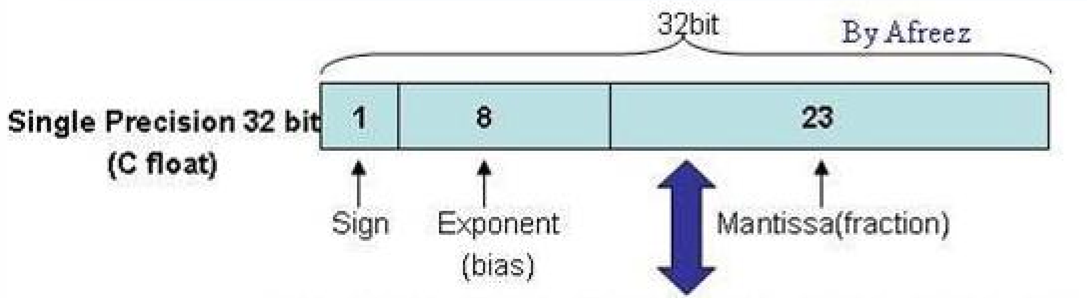
误差的来源（3/4）

由于计算机的字长有限，参加运算的数据及其运算结果在计算机上存放会产生误差，这种误差称之为**舍入误差。**

例如：在十位十进制下，会出现：

$$1/3=0.333\ 333\ 333\ 3$$

舍入误差与机器字长紧密相关!



截断（方法）误差：求解数学模型所用的数值计算

方法如果是一种近似的方法，那么只能得到近似解，

由此产生的误差称为截断误差或方法误差

例：近似计算 $\int_0^1 e^{-x^2}dx$

将 e-x2 作Taylor展开后再积分

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx = \int_0^1 \left(1 - x^2 + \frac{x^4}{2!} - \frac{x^6}{3!} + \frac{x^8}{4!} - \cdots\right) dx$$

$$= \underbrace{1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{2!}\times\frac{1}{5} - \frac{1}{3!}\times\frac{1}{7}}_{S_4} + \underbrace{\frac{1}{4!}\times\frac{1}{9} - \cdots}_{R_4}$$

/* Remainder */

取 $\int_0^1 e^{-x^2}dx \approx S_4$ ，

则 $R_4 = \frac{1}{4!}\times\frac{1}{9} - \frac{1}{5!}\times\frac{1}{11} + \cdots$ 称为截断误差 /* Truncation Error */

这里 $|R_4| < \frac{1}{4!}\times\frac{1}{9} < 0.005$

3.误差限和有效数字

- 误差限：

  设以x代表x*的近似值，则

  绝对误差为：$|x-x^*|$，若有$|x-x^*| \le \varepsilon$

  则ε称为近似值x的绝对误差限，简称误差限，或称精度。

- 有效数字：

  对于x*的近似值（规格化形式）

$$x=\pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m$$

(其中a_1，a_2，…，a_n是0-9之间的自然数）

如果误差$|x-x^*| \le 1/2 \times 10^{m-1}$, $1 \le 1 \le n$

则称近似值x有1位有效数字，或称x准确到第1位。

关于有效数字的几点说明

1、用四舍五入法取准确值的前n位作为近似值，则x*必有n位有效数字

2、凡是由准确值经过四舍五入而得到的近似值，其绝对误差限等于该近似值末位的半个单位。

3、有效数字相同的两个近似数，绝对误差限不一定相同。例如，设$x_1^*=12345$及$x_2^*=0.12345$均有五位有效数字，而它们的绝对误差限分别为0.5和0.000005

4、准确值被认为具有无穷位有效数字

4.相对误差与有效数字的联系

相对误差：$\dfrac{|x-x^*|}{|x|}$；若有，$\dfrac{|x-x^*|}{|x|}\le\varepsilon$

则称ε为近似数x的相对误差限。

设x, y分别是数x*, y*的近似值，考察x−y的相对误差

$$\frac{|(x-y)-(x^*-y^*)|}{|x-y|}\le\frac{|x-x^*|+|y-y^*|}{|x-y|}$$

$$=\left|\frac{x-x^*}{x}\right|\bullet\left|\frac{x}{x-y}\right|+\left|\frac{y-y^*}{y}\right|\bullet\left|\frac{y}{x-y}\right|$$

当x与y相近时，$\left|\dfrac{x}{x-y}\right|$和$\left|\dfrac{y}{x-y}\right|$都很大，

这时，$x-y$的相对误差可能比x和y的相对误差大得多。

4.相对误差与有效数字的联系

由此可见：两个值相近的近似数相减，可能会造成有效数字的严重损失。

在实际计算时，需要加工计算公式，以避免这种情况发生。

如例3：

将 $f'(2)=\dfrac{\sqrt{2+h}-\sqrt{2-h}}{2h}$

分子分母同时乘以 $\sqrt{2+h}+\sqrt{2-h}$,

加工为： $f'(2)=\dfrac{1}{\sqrt{2+h}+\sqrt{2-h}}$

这时取h=0.0001,可得f’(2)≈0.35356

这个结果有4位有效数字

练习：习题8

8、已知$e=2.71828\ldots$,试问其近似值$x_1=2.7$,$x_2=2.71$,$x_3=2.718$各有几位有效数字？并给出它们的相对误差限。

解：$x_1=0.27\times10^1$,$x_2=0.271\times10^1$, $x_3=0.2718\times10^1$

$|x_1-e|=0.01828\ldots\le 1/2\times10^{1-2}$,有效数字2位，

$|x_2-e|=0.00828\ldots\le1/2\times10^{1-2}$有效数字2位，

$|x_3-e|=0.00028\ldots\le1/2\times10^{1-4}$,有效数字4位

误差定性分析及避免误差危害

1.误差分析不容忽视

例3：用中心差商公式求 $f(x)=\sqrt{x}$

在 $x=2$ 的导数值

$$f'(2)\approx\frac{\sqrt{2+h}-\sqrt{2-h}}{2h}$$

取5位数字计算，若令 $h=0.1$,则

$$f'(2)\approx\frac{\sqrt{2.1}-\sqrt{1.9}}{0.2}\approx\frac{1.4491-1.4142}{0.2}=0.35350$$

若令 $h=0.0001$,则

$$f'(2)\approx\frac{1.4142-1.4142}{0.0002}=0$$

两个相近的数相减，会 造成有效数字的严重损 失。

■

在数值计算中，如果遇到两个相近的数相减运算，可考虑改变一下算法以避免两数相减。

$$\text{当} x_1 \approx x_2 \text{时，有} \log x_1 - \log x_2 = \log \frac{x_1}{x_2}$$

对两个相近的数相减，若找不到适当方法代替，只能在计算机上采用双倍字长计算，以提高精度。

例4：求解方程$x^2-(10^5+1)x+10^5=0.$

$x^2-2bx+c=0$

取5位数字进行计算，用“$\underset{=}{\Delta}$”标记对阶舍入过程

利用公式$x_{1,2}=-b\pm\sqrt{b^2-c}$进行计算

$$b=-\frac{1}{2}\times(10^5+1)\underset{=}{\Delta}-\frac{1}{2}\times10^5, c=10^5$$

$$\sqrt{b^2-c}=\sqrt{(-\frac{1}{2}\times(10^5+1))^2-10^5}$$

$$\underset{=}{\Delta}\frac{1}{2}\times10^5$$

$$x_1=-b+\sqrt{b^2-c}=10^5$$

$$x_2=-b-\sqrt{b^2-c}=0$$

对阶舍入会造成大数“吃掉”小数的后果；实际计算时，不宜用相差悬殊的两个数做加减运算

在求和或差的过程中应采用由小到大的运算过程。

例5：考察方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11/6 \\ 13/12 \\ 47/60 \end{bmatrix}$$

尽管系数改变不大，所求出的解却有很大出入

---病态问题

其解为 $x_1 = x_2 = x_3 = 1$

如果把系数舍入成三位　小数

$$\begin{bmatrix} 1.000 & 0.500 & 0.333 \\ 0.500 & 0.333 & 0.250 \\ 0.333 & 0.250 & 0.200 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.830 \\ 1.080 \\ 0.783 \end{bmatrix}$$

则其解变为： $x_1 = 1.09$， $x_2 = 0.488$， $x_3 = 1.49$

例 6：

4.绝对值太小的数不宜作除数

由于除数很小,将导致商很大,有可能出现“溢出”现象. 另外,设x^* ,y^* 的近似值分别为x,y，则$z=x\div y$是$z^*=x^*\div y^*$的近似值.此时，z的绝对误差满足估计式

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

从以上3个例子，可以看出：

- 误差不可避免
- 不同的近似处理方法，会造成误差大小的不同
- 为了使求解的问题更精确，必须进行误差分析

算法的数值稳定性

定义3　一个算法如果输入数据有误差，而在计算过程中舍入误差不增长，则称此算法是数值稳定的，否则称此算法为不稳定的。

例：

$$I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n e^x dx \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}$$

$$e^{-1} \approx 1 + (-1) + \frac{(-1)^2}{2!} + \cdots + \frac{(-1)^7}{7!}$$

truncation error

$$R_7 = \left|e^{-1} - 0.3679\right| < 0.000025$$

$$I_0 = 1 - e^{-1}, I_n = 1 - nI_{n-1}$$

$$(A)\begin{cases}\widetilde{I}_0 = 1 - 0.3679 = 0.6321 \\ \widetilde{I}_n = 1 - n\widetilde{I}_{n-1}\end{cases} \qquad \widetilde{I}_8 = -0.7280, \widetilde{I}_9 = 7.552$$

$$\frac{e^{-1}}{n+1} < I_n < \frac{1}{n+1}, \quad \frac{e^{-1}}{10} < I_9 < \frac{1}{10}, \quad I_9 \approx \frac{1}{2}\left(\frac{e^{-1}}{10} + \frac{1}{10}\right) \approx 0.0684 = I_9^*$$

$$E_n = -nE_{n-1}$$

$$E_n = (-1)^n n! E_0$$

数值不稳定

算法的数值稳定性

定义3　一个算法如果输入数据有误差，而在计算过程中舍入误差不增长，则称此算法是数值稳定的，否则称此算法为不稳定的。

例:

$$I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n e^x dx \quad n = 0,1,2,\cdots$$

$$(B)\begin{cases} I_9^* = 0.0684 \\ I_{n-1}^* = \dfrac{1}{n}(1 - I_n^*) \end{cases}$$

$$E_n^* = I_n - I_n^*$$

$$|E_0| = \frac{1}{n!}|E_n^*|$$

数值稳定

n	法一 (A)	法二 (B)
0	0.6321	0.6321
1	0.3679	0.3679
2	0.2642	0.2643
3	0.2074	0.2073
4	0.1704	0.1708
5	0.1480	0.1455
6	0.1120	0.1268
7	0.2160	0.1121
8	-0.7280	0.1035
9	7.552	0.0684

误差危害的避免

（1）避免除数的绝对值远远小于被除数绝对值的除法；
（2）避免两相近数相减，引起有效数字严重损失；
（3） 防止大数吃小数；
（4） 简化计算 步骤，减少运算次数；秦九韶
（5） 数值稳定性。

$$\frac{123456789}{0.00000000321}$$

$$1-\cos 2^0 = 2\sin^2 1^0$$

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

$$100000+\sum_{i=1}^{100000}\delta_i \qquad (|\delta_i| << 1)$$

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

本讲重点：

- 多项式求值的秦九韶算法
- 方程求根的二分法
- 误差来源及分类

  截断误差

  舍入误差
- 误差度量

  绝对误差（限）

  相对误差（限）

  有效数字

数值计算的五项基本原则是：

- 避免除数绝对值远小于被除数绝对值的除法，否则可能会扩大舍入误差。
- 避免两相近数相减，否则会使有效数字严重损失。
- 尽可能防止大数“吃掉”小数，否则可能影响计算结果的可靠性。
- 简化计算步骤，将少运算次数。（秦九韶算法）
- 选用数值稳定的算法。

作业：

- 课本11-12页
- 习题2，8，9，10，11