计算方法

计算机科学与技术系

诚信声明

- 本课件中大量采用网络及其他渠道搜集的相关文字信息和图片信息，这些信息因数量较大，无法一一列明出处，本人在此郑重声明：这些相关资料的版权归原作者所有，本文引用仅仅用于教学目的。如有不妥，请与本人联系，联系方式：frshen@nju.edu.cn
- 在此对相关资料的作者所付出的辛勤劳动表示衷心的感谢，并对作者表示诚挚敬意！
- 本人郑重承诺：尊重知识，尊重劳动，尊重版权，学术诚信。

本课程成绩的组成

- 平时成绩（占20％）：包括出勤、课堂提问、讨论情况、课后作业等。
- 实验成绩（占20％）：实验报告。
- 期末成绩（占60％）。

- 总成绩：100％

课程网站：http://cs.nju.edu.cn/rinc/→内部版块→课程相关

教材和参考书目

教材

- 《数值分析》（第4版）李庆扬 王能超 易大义编， 华中科技大学出版社

参考书目

- 《数值计算方法》林成森 科学出版社
- 《科学和工程计算基础》施妙根等，清华大学出版社
- 《数值分析 学习辅导·习题解析》 李红，华中科技大学出版社

先行课程

- 微积分 (Calculus)
- 线性代数 (Linear Algebra)
- 常微分方程 (ODE, Original Differential Equation)
- 计算机基础及计算机语言

任课教师介绍

- **申富饶老师**，教授、博导
  - 毕业于南京大学数学系计算数学专业（本科、硕士）
  - 东京工业大学智能系统科学专业（博士）
  - 主要研究领域神经计算、机器人智能
  - 自主设计的SOINN神经网络具有广泛国际影响
- 联系方式：frshen@nju.edu.cn
- 实验室主页：http://cs.nju.edu.cn/rinc/

第一章　　绪　论

- 计算方法国内发展简史
- 计算方法研究对象与特点
- 误差来源与误差分析重要性
- 误差的基本概念
- 数值运算中误差分析的方法与原则

一、计算方法国内发展简史

- 1955 周恩来领导10年科技规划，提出发展几个新技术，包括计算技术（计算机，程序设计，计算数学），半导体技术，自动化技术。
- 1956 成立计算技术研究所筹备处，主任华罗庚，手下有两个组（计算机与计算数学）。在其领导下于数学所成立计算方法讨论班。
- 1958 计算所成立，带半军事性质，并且与苏联合作在中科院计算研究所造出104机。北大、吉大、复旦、南大相继成立计算数学专业。

- 1958年 计算数学 专业
- 1984年 “计算数学及其应用软件”

  加强计算机课程的分量
- 1998年 “信息与计算科学”

  加强信息课程的分量

- 信息与计算科学，就其范畴与研究内容而言，是数学、计算机科学、信息工程等广泛学科的交叉，远超出数学学科的范围。

- 作为数学学科下的一个理科专业，信息与计算科学专业应该主要研究"**信息技术的核心基础与运用现代计算工具高效求解科学与工程问题的数学理论与方法**"（或更简明地说，研究定向于信息技术、计算技术的数学基础）。

- 冯 康 (1920—1993)
- 有限元方法
- 辛几何算法

- 中国近代数学能超越西方或与之并驾齐驱的主要原因有三个，主要是讲能够在数学历史上很出名的有三个：

  一个是陈省身在示性类方面的工作，

  一个是华罗庚在多复变函数方面的工作，

  一个是冯康在有限元计算方面的工作。

--- 丘成桐，中国数学发展之我见

1998,3,11，中国科学报

(丘成桐,哈佛大学教授，Fields 奖获得者)

- “在当代世界科技发展的史册上，我国科技工作者也书写了光辉的篇章。在数学领域创立的多复变函数的调和分析，有限元方法和辛几何算法，示性类及示嵌类的研究，数学机械化与证明理论，关于哥德巴赫猜想的研究，在国际上都引起了强烈反响。”

---江泽民, 在两院院士大会上的讲话, 2002,5,28.

当今主流研究分支

1.微分方程数值解是信息与计算数学的主要分支（气象、物理、力学等诸多领域）

2.数值代数和最优化是科学计算、运筹学的基础学科。（在材料科学, 生命科学, 信息科学,交通, 通讯以及金融中的计算问题）

3.反问题无疑是最热门的方向之一。（图像处理，信号处理）

4.计算数学的应用型分支：与具体的应用结合形成新的学科，比如说计算流体力学、计算空气动力学、计算力学、计算物理。

二、计算方法研究对象与特点

《计算方法》学什么？

- 数值计算中的误差
- 插值法
- 曲线拟合的最小二乘法
- 数值积分
- 非线性方程的数值解法
- 方程组的数值解法
- 常微分方程数值解法

《计算方法》课程体系

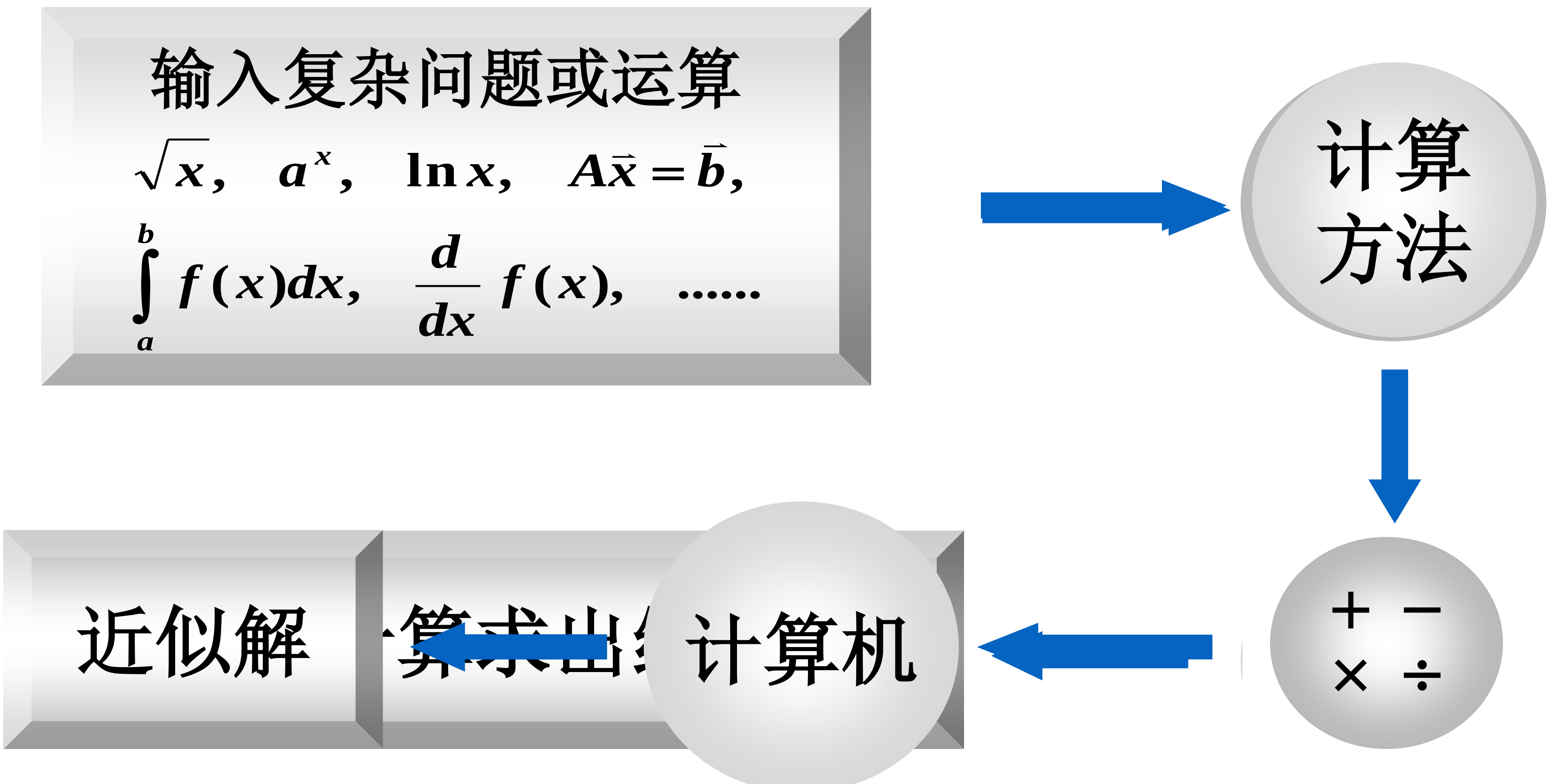
本课程的内容

- 数值逼近
  - 插值法
  - 数据拟合的最小二乘法
  - 数值积分和数值微分*
- 数值代数
  - 线性方程组的求解
  - 非线性方程组的求解
  - 矩阵特征值*
- 常微分方程的数值方法

如何学习这门课？

- 教学过程：“传道、授业、解惑”
  - 目标：**会学习**、**会思考**、**会研究**、**会创造**、**会应用**
  - 讲授重点：在**思路**、**方法**与培养能力
  - 希望同学以积极、主动姿态**参与**到教学活动中,将教学过程变成**研究**、**创造与培养能力**的过程
  - 不迷信，**敢于怀疑**、**研究**、**创造**

计算方法是做什么用的？



输入复杂问题或运算
$\sqrt{x}$, a^x, $\ln x$, $A\vec{x}=\vec{b}$,
$\int_a^b f(x)dx$, $\frac{d}{dx}f(x)$, ……
计算方法
$+$ $-$
$\times$ $\div$
计算机
近似解

- 研究对象：用计算机求解各种数学问题的数值计算方法及其理论与软件实现。
- 计算机解决科学计算的过程
  - 实际问题→数学模型→数值计算方法→程序设计→结果
    - 1.由实际问题应用有关知识和数学理论建立模型，
      -----应用数学任务
    - 2.由数学模型提出求解的数值计算方法直到编程出结果，
      -----计算数学任务

数值分析是计算数学的一个主要部分，研究的即是后半部分，将理论与计算相结合。

数值分析研究对象与特点

- “数值计算方法”是计算数学的一个重要部分。它研究在计算机上求解数学问题的理论、方法及其软件实现.
- 数值计算已经成为计算机处理实际问题的一种关键手段，它使各科学领域从定性分析阶段走向定量分析阶段，从粗糙走向精密。
- 科学理论、科学试验和科学计算(计算的方法)是现代科学的三个组成部分。

数值计算方法算法流程图

现实科学与工程问题的解决步骤：

实际问题

↓

建立数学模型

↓

构造数值算法

↓

编程上机

↓

获取近似结果

随着计算机的飞速发展，数值分析方法已深入到计算物理、计算力学、计算化学、计算生物学、计算经济学等各个领域。本课仅介绍最常用的数学模型的最基本的数值分析方法。

计算方法是一种研究并解决数学问题的数值近似解方法

任务1：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。*
  - 算法：指把对数学问题的解法归结为只有加、减、乘、除等基本运算，并确定运算次序的完整而准确的描述。

- 算法分类:
  - 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

任务2：算法可靠性

- 算法的可靠性：*数值分析研究的第二个任务*
  - 收敛性
  - 稳定性
  - 误差估计

- 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。

任务3：算法的优劣评价

- 算法的优劣评价：*数值分析研究的第三个任务*
- 可靠算法的优劣，应该考虑其
  - 算法效果
  - 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）
  - 逻辑复杂度（影响程序开发的周期以及维护）

数值计算方法研究内容

- 方程求解
  - 非线性方程或方程组、常微分方程、偏微分方程数值解法
- 数值代数
  - 求解线性方程组的解法（直接方法和迭代方法），求矩阵的特征值与特征向量
- 数值逼近
  - 插值和数值逼近，数值微分和数值积分

例如：

1. 求方程 $3x^2+8x-4=0$在 $[0,1]$上的根 x^* ;

2. 求解线性方程组 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}$ ，其中A为3阶可逆方阵,

$\boldsymbol{X}=(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_3)^T$;

3. 已知 $y=P(x)$为$[x_0,x_1]$上的直线，满足 $P(x_0)=y_0$,

$P(x_1)=y_1$ ， $\bar{x}\in(x_0,x_1)$，求 $P(\bar{x})$;

4. 计算定积分 $I=\int_a^b \frac{1}{x}dx \quad (1<a<b)$

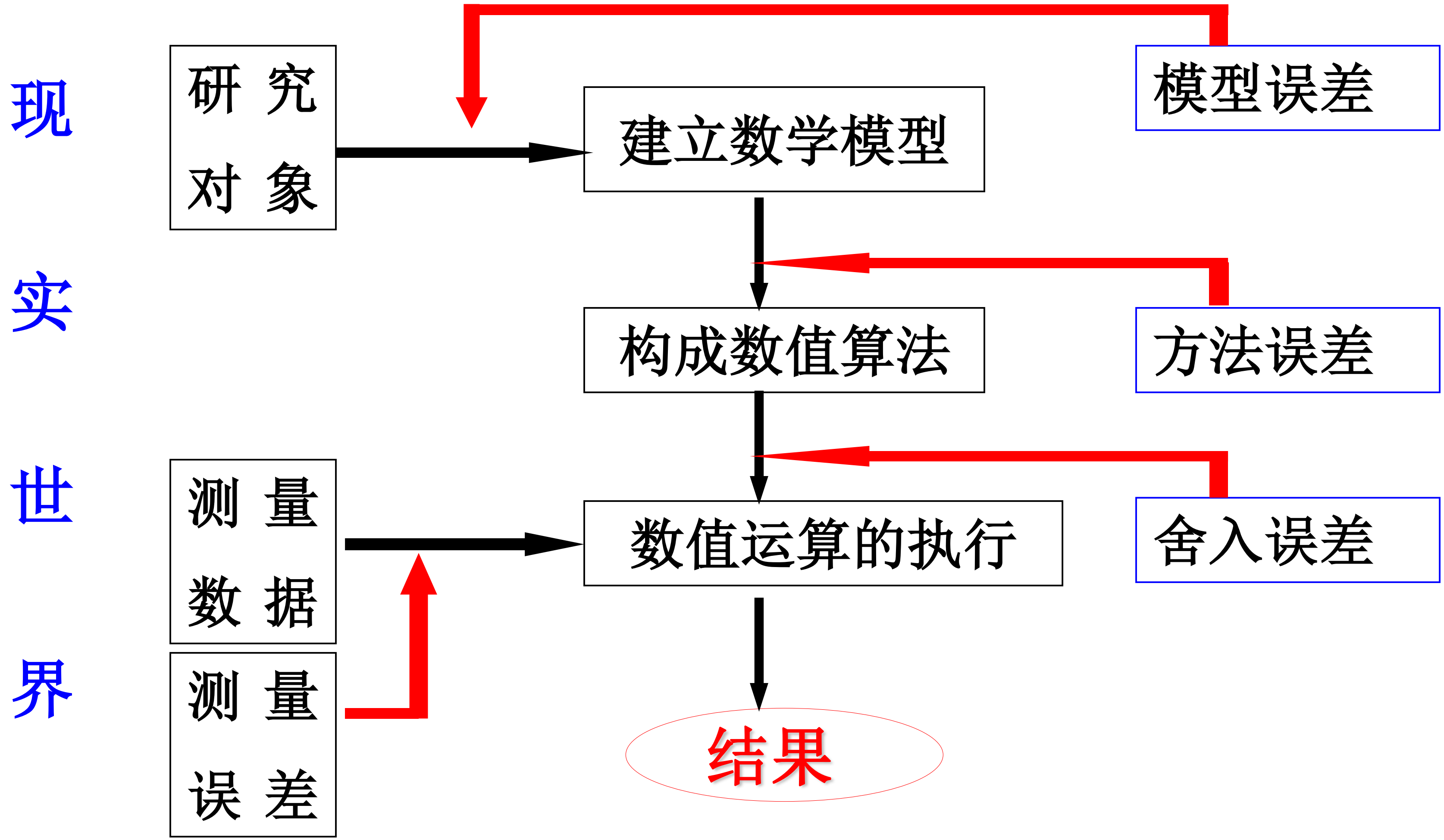
5. 解常微分方程初值问题 $\begin{cases} y'=x+y \\ y(x_0)=y_0 \end{cases}$

数值计算方法特点

- 面向计算机
  - 将各种数学问题化为在计算机上可执行的运算
- 有可靠的理论分析（收敛性、稳定性、误差分析）
  - 因为是在“支离破碎”的计算机数系上进行运算，原始数据也有误差，因而要进行“误差分析”估计解的精确度，故要关注数值的性态及数值方法的稳定性。
- 要有好的算法，并考虑计算复杂性（时间、空间）
  - 针对所求解的数值问题研究在计算机上可执行的且有效的计算公式。节省时间及存储量
- 要有数值试验, 证明算法有效

三、误差来源与误差分析重要性

误差来源与误差分析的重要性



(1) 模型误差

在建立数学模型过程中，要将复杂的现象抽象归结为数学模型，往往要忽略一些次要因素的影响，而对问题作一些简化，因此和实际问题有一定的区别。

(2) 观测误差

在建模和具体运算过程中所用的数据往往是通过观察和测量得到的，由于精度的限制，这些数据一般是近似的，即有误差。

“模型误差”和“观察误差”在这里不作详细分析

(3) 截断误差

由于计算机只能完成有限次算术运算和逻辑运算,因此要将有些需用极限或无穷过程进行的运算有限化,对无穷过程进行截断,这就带来误差。

(4) 舍入误差

在数值计算过程中还会遇到无穷小数, 因计算机受到机器字长的限制, 它所能表示的数据只能有一定的有限位数, 如按四舍五入规则取有限位数, 由此引起的误差。

截断误差

如:

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

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots$$

Taylor展开

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} - \frac{x^4}{4!} + \cdots$$

若将前若干项的部分和作为函数值的近似公式,由于以后各项都舍弃了,自然产生了误差。

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \ldots + \frac{x^n}{n!} + \ldots$$

$$S_n(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \ldots + \frac{x^n}{n!}$$

由泰勒余项定理得其截断误差为：

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

舍入误差:

$$\pi = 3.14159265\cdots$$

$$\pi \approx 3.1415927$$

$$\sqrt{2} = 1.414213562\cdots$$

$$\sqrt{2} \approx 1.4142136$$

$$\frac{1}{3!} = \frac{1}{6} = 0.166666666\cdots$$

$$\frac{1}{3!} \approx 0.16666667$$

例：近似计算 $\int_0^1 e^{-x^2}\,dx$ （$= 0.747\ldots$）

解： 将 e^{-x^2} 作Taylor展开后再积分

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

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

取 $\int_0^1 e^{-x^2}\,dx \approx S_4$ ， 则 $R_4 = \frac{1}{4!} \times \frac{1}{9} - \frac{1}{5!} \times \frac{1}{11} + \ldots$ 称为截断误差

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

$$S_4 = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{10} - \frac{1}{42} \approx 1 - 0.333 + 0.1 - 0.024 = 0.743$$

舍入误差 $< 0.0005 \times 2 = 0.001$

$\int_0^1 e^{-x^2}\,dx$ 的总体误差 $< 0.005 + 0.001 = 0.006$

误差分析的重要性：病态问题

定义：初始数据的的微小变化(扰动)，导致计算结果产生很大影响，这样的问题称为病态的（ill-conditioned)，相反称为良态的。

因为在算法的实现中总有舍入误差，所以对于病态的数学问题，从理论上来讲，用任何算法求解都可能难以得到“好”的解。

例1　$f(x)=x^2+x-1150$ 在$x^*=100/3$的值?

解： $f(100/3)=-\dfrac{50}{9}\approx-5.6$,

$f(33)=-28$,

该函数是病态的.

良态与病态问题

例1　$f(x)=x^2+x-1150$　在x*＝100 /3的值

解：f（100/3）＝$-\dfrac{50}{9}\approx-5.6$,

f（33）＝−28 ,

该函数是病态的.

初始数据相对变化1%，计算结果相对变化400%！病态！

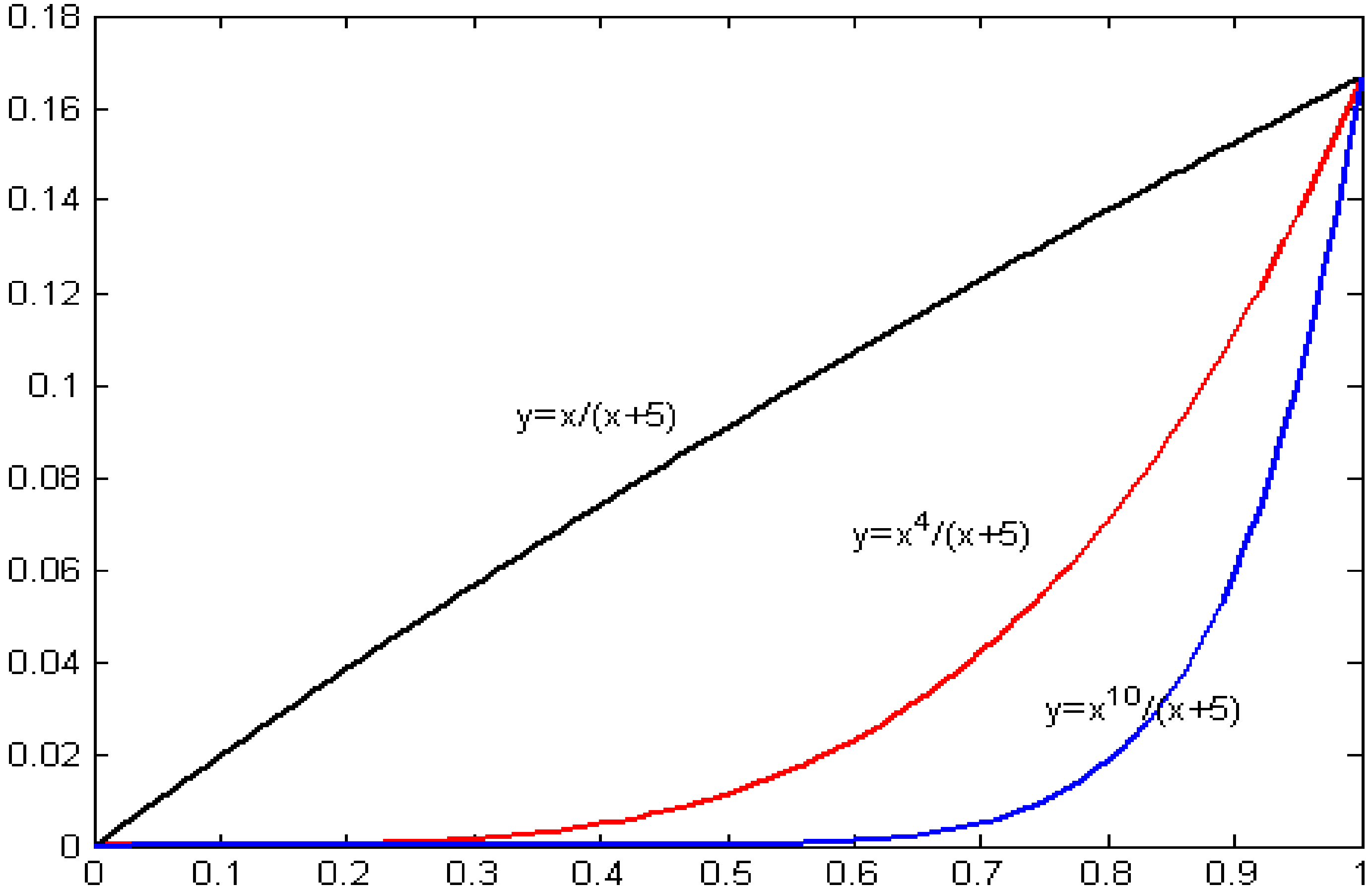
分析:

$$\left|x^* - x\right| = \frac{1}{3} < 0.34 \ , \left|f(x^*) - f(x)\right| \approx 22.4,$$

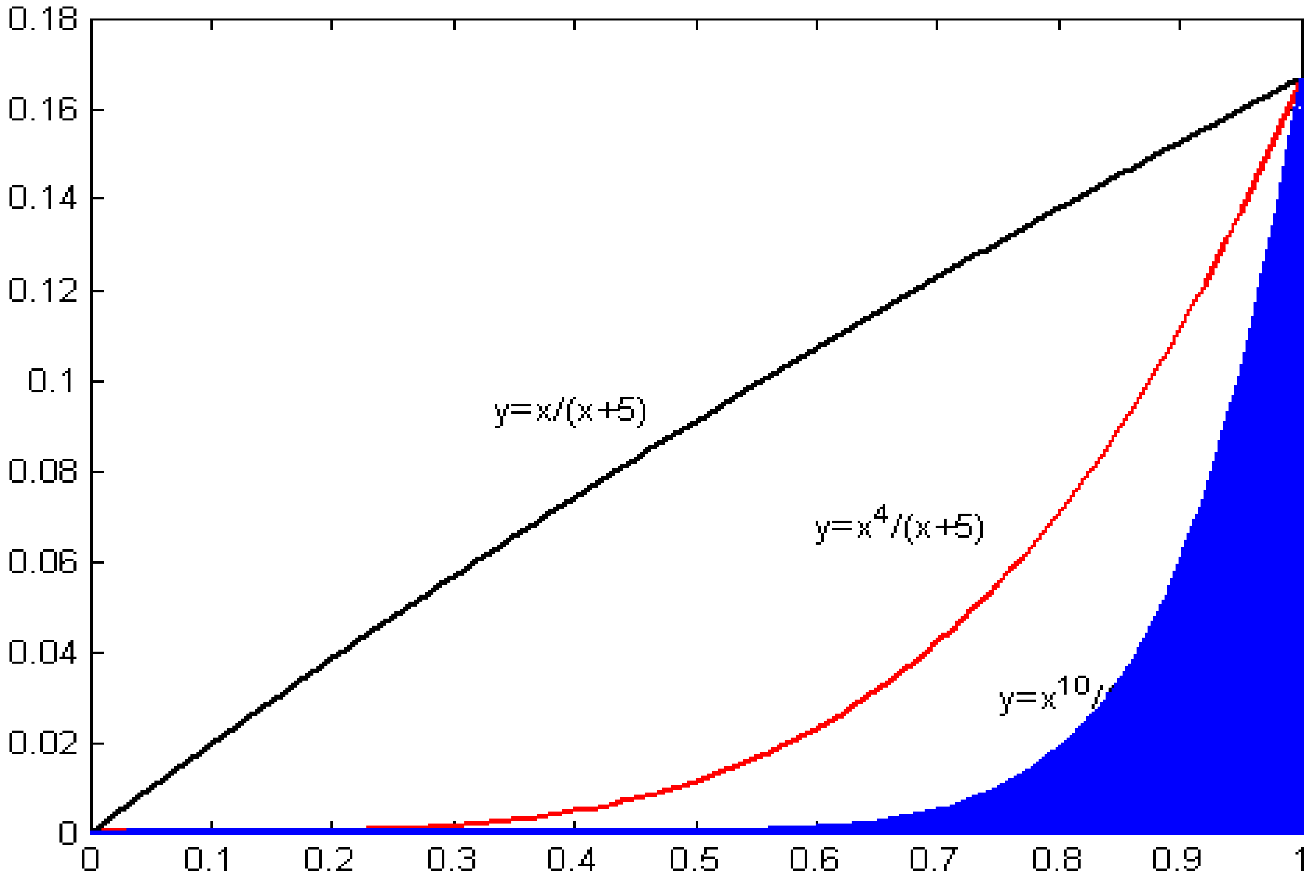
$$\left|\frac{x^* - x}{x^*}\right| = \frac{\frac{1}{3}}{\frac{100}{3}} = 1\% \ , \left|\frac{f(x^*) - f(x)}{f(x^*)}\right| = \left|\frac{\frac{-50}{9} + 28}{\frac{-50}{9}}\right| \approx 400\%.$$

误差分析的重要性：算法的数值稳定性

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



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



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

构造算法如下：

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

算法1. $I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1}$ ，$I_0 = \ln\frac{6}{5}$ $\tilde{I}_n$

算法2. $I_{n-1} = \frac{1}{5}\left(\frac{1}{n} - I_n\right)$ ，$I_8 = 0.019$ $\bar{I}_n$

1 $I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1}$, $I_0 = \ln\frac{6}{5}$ $\tilde{I}_n$

2 $I_{n-1} = \frac{1}{5}\left(\frac{1}{n} - I_n\right)$, $I_8 = 0.019$ $\bar{I}_n$

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

n	I_n	$\tilde{I}_n$	$\bar{I}_n$
0	0.1820	0.1820	0.1820
1	0.0880	0.0900	0.0880
2	0.0580	0.0500	0.0580
3	0.0431	0.0830	0.0431
4	0.0343	-0.165	0.0343
5	0.0284	1.0250	0.0284
6	0.0240	-4.958	0.0240
7	0.0210	24.933	0.0210
8	0.0190	-124.540	0.0190

容易知道，对于任何自然数n，都有
$0 < I_n < 1$,并且I_n单调减，可见算法1
是不稳定的，算法2是稳定的.
对于算法1有

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

得知误差$\varepsilon_i^{(1)} = I_i - \tilde{I}_i^{(1)}$

$$\varepsilon_n^{(1)} = -5\varepsilon_{n-1}^{(1)} = (-5)^n \varepsilon_0^{(1)}, n = 1, 2, \cdots$$

误差随着运行过程传播并积累

因此算法1是不稳定的. 同理对于算法2

知误差$\varepsilon_i^{(2)} = I_i - \tilde{I}_i^{(2)}$满足$\varepsilon_{i-1}^{(2)} = -\frac{1}{5}\varepsilon_i^{(2)}$,

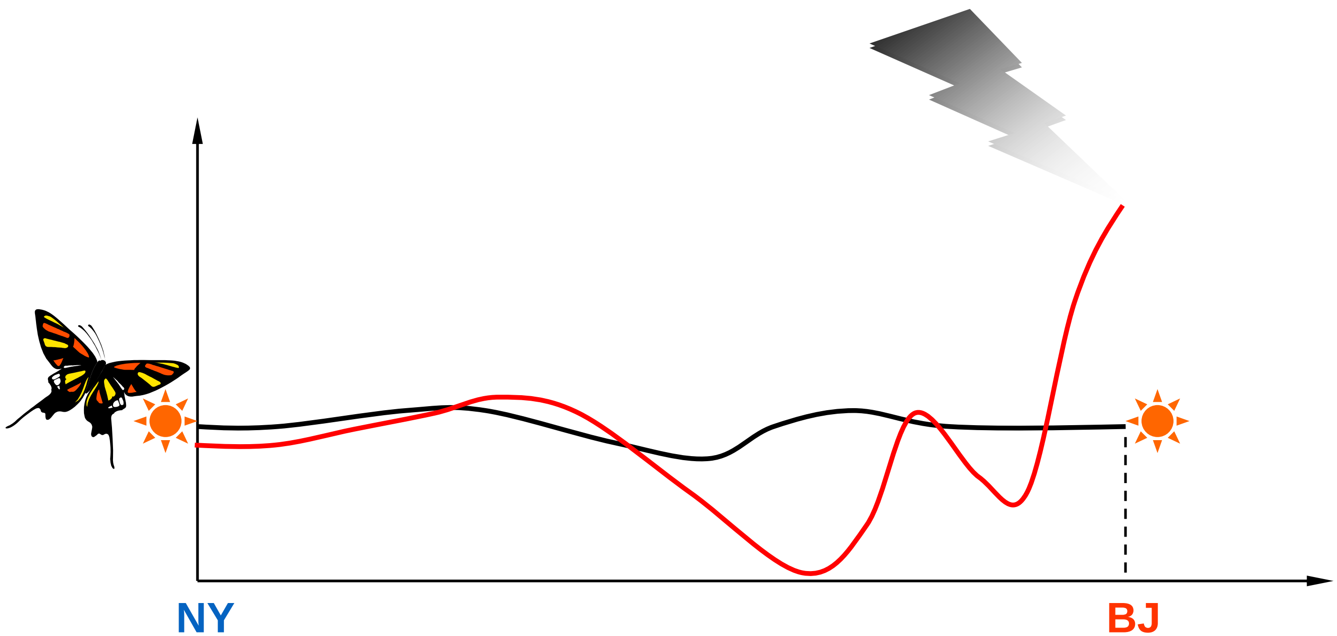
从而$\varepsilon_0^{(2)} = (-\frac{1}{5})^n \varepsilon_n^{(2)}$,故算法2是稳定的.

因此，我们在实际计算的过程中，要充分重视构造数值稳定性好的算法，就是误差能得到控制算法，避免在算法实现的过程中误差影响逐次放大。

避免蝴蝶效应

误差的传播与积累

蝴蝶效应 —— 纽约的一只蝴蝶翅膀一拍，风和日丽的北京就刮起台风来了？！



误差的传播与积累导致产生非常大的影响。

四、误差的基本概念

1. 绝对误差与相对误差:

◆定义1.1 设x^*为某一数据的准确值，x为x^*的一个近似值，称$e(x)=x-x^*$(近似值－准确值)为近似值x的绝对误差，简称误差。

$e(x)$ 可正可负，当$e(x)>0$时近似值偏大，叫强近似值；当$e(x)<0$时近似值偏小，叫弱近似值。

由于x^*通常无法确定，只能估计其绝对误差值不超过某整数 $\varepsilon(x)$，即

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

则称 $\varepsilon(x)$ 为绝对误差限。

由上式得 $$x-\varepsilon(x)\le x^*\le x+\varepsilon(x)$$

可知*x**的范围。或记为 $$x^* = x\pm\varepsilon(x)$$

但误差*e*(*x*)并不足以刻划*x*的精度。

如：

$x^*=15\pm2$, $x=15$, $\varepsilon(x)=2$;

$y^*=1000\pm5$, $y=1000$, $\varepsilon(y)=5$

因此考虑精度时除看误差大小外，还应考虑精确值本身的大小，故引入相对误差概念。

定义1.2 设x^*为某一数据的准确值，x为x^*的一个近似值，称

$$e_r(x)=\frac{e(x)}{x^*}=\frac{x-x^*}{x^*}, \qquad (x^*\neq 0)$$

为近似值x的相对误差。

实际计算时，由于x^*不知，通常取

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

- 如果存在一适当小的正数 ε_r ，使得

$$\left|e_r(x)\right| = \left|\frac{e(x)}{x^*}\right| = \left|\frac{x - x^*}{x^*}\right| \le \varepsilon_r$$

则称 ε_r为相对误差限。

例：$x=15$, $\varepsilon(x)=2$， $\varepsilon_r(x)=2/15=13.33\%$;

$y=1000$, $\varepsilon(y)=5$, $\varepsilon_r(y)=5/1000=0.5\%$

2. 有效数字：

定义1.3　若近似值x的误差限是某一位的半个单位，该位到x的第一位非零数字共有n位，就说x有n位有效数字，x可表示为

$$x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$$

其中，$a_1, a_2, \ldots, a_n$ 都是 0 ～ 9 中的任一整数，但 $a_1 \neq 0$。

其绝对误差限满足：

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

如：$x^{*}= \pi = 3.14159265……$

（1）取$x=3.14$，则$m=1$，

$$\left|x-x^{*}\right|\le 0.002\le 0.005=\frac{1}{2}\times 10^{1-3}$$

即$n=3$，有三位有效数字；

（2）取$x=3.1416$，则$m=1$，

$$\left|x-x^{*}\right|\le 0.000008\le 0.00005=\frac{1}{2}\times 10^{1-5}$$

即$n=5$，有5位有效数字。

有效数字：如果近似值的误差限是某一位上的半个单位，且该位置到x的第一位非零数字一共n位，则称近似值x有n位有效数字。

例1：

$X^*=\sqrt{3}=1.732050808$

数值	有效位数	原因
1.73	3	$\lvert\sqrt{3}-1.73\rvert<0.5*10^{-2}$
1.7321	5	$\lvert\sqrt{3}-1.7321\rvert<0.5*10^{-4}$
1.7320	4	$\lvert\sqrt{3}-1.7320\rvert>0.5*10^{-4}$

取有效数字方法：取n位：先对n+1位四舍五入。

例2：

原数据	取 6 位有效位
3.1415926535	3.14159
1.41421356237	1.41421

例3：

数字	有效位数
2.0004	5
-0.00200	3
$2*10^{-3}$	1
$2.00*10^{-3}$	3

判断规则：由最右位数字到不为零的最左位数字的的个数

■**定理1：**设近似数x表示为

$$x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$$

若x具有n位有效数字，则其相对误差限为

$$\left|\varepsilon_r(x)\right| \le \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

反之，若x的相对误差限为

$$\left|\varepsilon_r(x)\right| \le \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

则x至少具有n位有效数字。

例1.　某零件质量取决于零件某参数x，设参数标定值为1个单位，在生产过程中允许参数与标定值间有一定误差，据此将零件分成A、B、C三等，等级由相对误差限决定，A：1%，B：5 %，C：10 %，试确定三个等级的零件参数允许变化的范围。

解　$x^*=1$，　由 $\left|\frac{x-x^*}{x^*}\right| \le \varepsilon_r$　得 $-\varepsilon_r \le \frac{x}{x^*} - 1 \le \varepsilon_r$

故 $x^*(1-\varepsilon_r) \le x \le x^*(1+\varepsilon_r)$

将三个相对误差限分别带入，得范围如下：

A：$x \in [0.99,1.01]$

B：$x \in [0.95,0.99) \cup (1.01,1.05]$

C：$x \in [0.9,0.95) \cup (1.05,1.1]$

例2. 测量一物体的长度为954cm，问测量数据的相对误差限多大？

解 因实际问题所截取的近似数，其绝对误差限一般不超过最小刻度的半个单位，

故当x=954cm时，有 $\varepsilon(x) = 0.5\text{cm}$，

而x的相对误差

$$er(x) \le 0.5/954 = 0.0005241\ldots < 0.00053 = 0.053\ \%$$

故 $\varepsilon_r(x) = 0.053\ \%$.

例3. 要使$\sqrt{20}$的相对误差不超过0.1%，应取几位有效数字？

解: $\sqrt{20}$的首位数是$a_1 = 4.$

设$\sqrt{20}$的近似值x有n位有效数字.

则由定理1，相对误差满足

$$|e_r(x)| = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \le \frac{1}{2 \times a_1} \times 10^{1-n}$$

$$\frac{1}{2 \times 4} \times 10^{1-n} \le 0.001 \qquad n \ge 3.097$$

即应取4位有效数字，近似值的误差不超过0.1%.

注：关于有效数字有以下几点说明

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、有效数字位数相同的两个近似数，绝对误差限不一定相同；

3、将任何数乘以10^m(m为整数)，等于移动该数的小数点，并不影响它的有效数字的位数；

4、准确值被认为具有无穷位有效数字.

数值运算的误差估计

函数运算的误差估计：

设 y=f(x) 为一元函数，自变量准确值 x*，对应函数准确值 y*=f(x*)，x误差为e(x)，误差限为ε(x)，函数近似值误差e(y)，误差限为ε(y)。则（可由Taylor公式推得）

$$\varepsilon(y) \approx |f'(x)|\,\varepsilon(x)$$

$$\varepsilon_r(y) \approx \frac{|xf'(x)|}{|f(x)|}\varepsilon_r(x)$$

对于多元函数 $z = f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$

设准确值 $z^* = f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$

由多元函数**Taylor**公式，可得误差估计：

$$\varepsilon(z) \approx \sum_{k=0}^{n} \left| \frac{\partial f}{\partial x_k} \right| \varepsilon(x_k)$$

相对误差限为：

$$\varepsilon_r(z) \approx \sum_{k=0}^{n} \left| x_k \cdot \frac{\partial f}{\partial x_k} \right| \frac{\varepsilon_r(x_k)}{|z|}$$

算术运算的误差估计：

两个近似数x_1，x_2，其误差限分别为 $\varepsilon(x_1)$， $\varepsilon(x_2)$，它们进行加、减、乘、除运算得到的误差限分别为：

$$\varepsilon(x_1 \pm x_2) = \varepsilon(x_1) + \varepsilon(x_2)$$

$$\varepsilon(x_1 \cdot x_2) = |x_1|\varepsilon(x_2) + |x_2|\varepsilon(x_1)$$

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

例4:数值运算导致有效数字的减少

设a=2.31,b=1.93,c=2.24都是三位有效数字的近似数，令$p=a+bc$，求 ε (p)和 $\varepsilon_r(p)$，并判断p有几位有效数字。

解 由题知， $\varepsilon(a) = \varepsilon(b) = \varepsilon(c)=0.005$

$$\varepsilon(p)= \varepsilon(a)+ \varepsilon(bc)\approx \varepsilon(a)+|b| \varepsilon(c)+|c| \varepsilon(b)$$

$$=0.005+1.93\times0.005+2.24\times0.005=0.02585$$

又 $p=a+bc=2.31+1.93\times2.24=6.6332$

故 $\varepsilon_r(p)= \varepsilon(p)/|p| \approx 0.02585/6.6332 \approx 0.0039=0.39\%$

因为 $\varepsilon(p) \approx 0.02585<0.05=1/2\times10^{1-2}$

所以p=6.6332中只有两位有效数字。

五、数值运算中误差分析的方法与原则

避免误差危害的若干原则

- 使用数值稳定的算法
- 尽量避免两个相近的数相减
- 尽量避免两个绝对值很大的数相乘
- 避免用绝对值很小的数做除数
- 防止大数“吃掉”小数
- 简化计算步骤，减少运算次数

1. 避免除数的绝对值远小于被除数的绝对值；

设 $z = \dfrac{y}{x}(x \neq 0)$ 若 $|x| << |y|$，

因 $$\varepsilon\left(\frac{y}{x}\right) \approx \frac{|x|\varepsilon(y) + |y|\varepsilon(x)}{|x|^2} = \frac{\varepsilon(y)}{|x|} + \frac{|y|}{|x|^2}\varepsilon(x)$$

表明当 $|x|$ 相对太小时，商的绝对误差可能很大。

2. 避免两个相近的数相减；

若$y \approx x$，设$z=y-x$，则 $\varepsilon(z)= \varepsilon(y)+ \varepsilon(x)$，

$$\varepsilon_r(z) \le \frac{|y|}{|z|}\varepsilon_r(y) + \frac{|x|}{|z|}\varepsilon_r(x)$$

当$y \approx x$时，$z \approx 0$，相对误差限会很大，导致结果有效数字位数减少。

避免两个相近的数相减方法：常用一些恒等变形实现。

如当x充分大时，$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$$

当x绝对值很小时，$$1-\cos x = 2\sin^2(\frac{x}{2})$$

$$e^x - 1 \approx x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \cdots + \frac{1}{n!}x_n$$

例：避免两个相近的数相减

在3位十进制数字计算机上求$\sqrt{9.01}-3$.

因为$\sqrt{9.01}\approx 3.0016662$取成3. 00，再减去3，就得到最后结果0. 00。事实上:

$$\sqrt{9.01}-3=\frac{(\sqrt{9.01}-3)(\sqrt{9.01}+3)}{\sqrt{9.01}+3}=\frac{9.01-3^2}{\sqrt{9.01}+3}$$

$$=\frac{0.01}{3.00+3}=\frac{0.01}{6}\approx 0.00167=1.67\times 10^{-3}$$

就避免了这个问题。

3. 防止大数“吃掉”小数现象；

原因：计算机表示的数位数有限，很大的数和很小的数相加减时，很小的数会被“吃掉”（舍去）。

方法：当绝对值悬殊的一系列数相加时，若有

$|x_1|>|x_2|>\ldots>|x_n|$，

应按绝对值由小到大的顺序累加。

例：避免大数“吃”小数

在7位字长的计算机上求：

$$S = 123456.0 + 0.0200 - 123454.0$$

用两种计算顺序计算；

$$S_1 = \underline{123456.0 + 0.0200}$$

$$123456.02 \Rightarrow 123456.0$$

$$123456.0 - 123454.0 = 2.0$$

$$S_2 = \underline{123456.0 - 123454.0} + 0.0200$$

$$2.0 \Rightarrow 2.0 + 0.0200 = 2.0200$$

显然S_2精度要高一些，而S_1中0. 02被大数“吃”掉了。

4. 简化计算步骤，减少运算次数；

（即减少计算工作量）

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

若直接求和，计算第***k***项时需***n-k*+1**次乘法，故共需***n*(*n*+1)/2**次“×”和***n***次“＋”。

若将公式改写为：

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

则只需***n***次“×”，***n***次“＋”，即秦九韶算法。

秦九韶算法**(1247)** **(**又称为**Horner**算法**(1819))**

计算量： 一个算法所需的乘除运算总次数，单位是flop.

计算量是衡量算法好坏的一个重要标准。

例1 求 $Ax=b$， $Det(A)\neq 0$，$A=(a_{ij})_{20\times 20}$的计算量。

解： 1. 用Cramar法则求解，总的计算量

$$N = ((n+1)(n-1)n!+n) \text{ 次}$$

当$n=20$，$N\approx 9.7\times 10^{20}$ 次.

以一台10亿/秒的计算机需约3万年.

解： 2. 使用Gauss消去法，

$n=20$， $N\approx 3060$次$= O(n^3/3)$次.

结论： 分析算法的效率，选择算法非常重要。

例 计算x^{255}的复杂度

1. 计算 $$X^{255} = X \times \underbrace{X \times X \times X \times \ldots X}_{254个乘法}$$

工作量：N＝254 flop

2. 计算 $X^{255} = X \times X^2 \times X^4 \times X^8 \times X^{16} \times X^{32} \times X^{64} \times X^{128}$

工作量：N＝14 flop， 8个储存空间

5. 选用数值稳定性好的算法。

将输入数据有误差，但在运算过程中舍入误差不增长的算法称数值稳定的，否则是数值不稳定的。

只有数值稳定的数值方法才能给出可靠的计算结果。

例： 设有递推关系： $y_n = 10y_{n-1} - 1$ **(n=1,2,…)**

若取 $y_0 = \sqrt{2} \approx 1.41$ （三位有效数字）

试问计算到y_{10}时误差有多大?

解： **因** $y_0^* = \sqrt{2}, y_0 = 1.41$

而 $\left| y_0 - y_0^* \right| \le \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \delta$

于是有

$$\left|y_1 - y_1^*\right| = \left|10y_0 - 1 - 10y_0^* + 1\right| = 10\left|y_0 - y_0^*\right| \le 10\delta$$

$$\left|y_2 - y_2^*\right| = \left|10y_1 - 1 - 10y_1^* + 1\right| = 10\left|y_1 - y_1^*\right| \le 10^2\delta$$

类推，有

$$\left|y_{10} - y_{10}^*\right| \le 10^{10}\delta$$

即计算到y_{10}，其误差限为$10^{10}\delta$，亦即若在y_0处有误差限为δ，则y_{10}的误差限将扩大10^{10}倍，可见这个计算过程是不稳定的。

例：求解 ¥^{2}$(-10^9-1)\,x+10^9=0$

解: $x_1=10^9$, $x_2=1$.

算法A: $x_{1,2}=(-b\pm \mathrm{sqrt}(b^2-4ac))/2a$, **出现小误差时有,**

$$-b=10^9+1=0.10000000\times10^{10}+0.000000001\times10^{10}$$

$$=0.10000000\times10^{10}$$

大数”吃掉”小数

而 $b^2-4ac\approx b^2$, $\mathrm{sqrt}(b^2-4ac)\approx|b|$

于是 $x_1=(-b+|b|)/2=0.10000000\times10^{10}$,

$x_2=(-b-|b|)/2=0$

算法B: $x_1=(-b-\mathrm{sign}(b)\times\mathrm{sqrt}(b^2-4ac))/2a$

$x_2=c/ax_1$

则 $x_1=0.10000000\times10^{10}=10^9$

$x_2=0.10000000\times10^{1}=1$

算法A不稳定;算法B稳定,算法B准确.

结论:良态问题选择稳定算法,才能得到满意解

小结

数值算法是从给定的已知量出发，经过有限次四则运算及规定的运算顺序，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。

数值算法有四个特点：

(1) 目的明确　算法必须有明确的目的，其条件和结论均应有清楚的规定

(2) 定义精确　对算法的每一步都必须有精确的定义

(3) 算法可执行　算法中的每一步操作都是可执行的

(4) 步骤有限　算法必须在有限步内能够完成解题过程

在我们今后的讨论中，误差将不可回避，

算法的稳定性会是一个非常重要的话题。

第一章的作业

P. 12　第8题、11题、13题