计算方法

哈尔滨工业大学（深圳）理学院数学学科
杨云云
http://faculty.hitsz.edu.cn/yangyunyun

计算方法的研究对象

- 计算数学是数学的一个重要分支.计算方法是计算数学的一个主要部分,它着重研究用计算机求解数学问题的数值计算方法及其理论.
- 实际问题→数学问题→数值计算方法（算法）→软件实现→程序执行→数字结果分析
- 数值方法研究用算术运算求解数学问题的方法;

数值方法研究的是近似计算的规律;

计算方法的研究对象

- 计算方法不仅要建立数值方法,还要从理论上研究其有效性.
- 数值方法的有效性研究主要有

  1.误差分析

  2.收敛性

  3.稳定性

  4.计算速度

  5.储存量

计算方法的应用

- 计算方法这门课程既带有纯数学高度抽象性和严密性，又具有应用的广泛性. 是一门与计算机科学密切相连的实用性很强的计算数学课程.它实现了利用计算机来求解数学问题，完成科学计算，应用到各个科学领域.

成绩设置

- 平时成绩（出勤 & 作业 ）20%
- 上机实验报告 20%
- 期末考试 60%

课程内容

- 绪论

误差理论、有效数字、数值计算中应注意的一些问题

- 第一章 非线性方程的数值解法

基本问题、迭代法、单点迭代法（牛顿法）、多点迭代法（割线法）、重根上的迭代法

- 第二章 线性代数方程组数值解法

向量范数与矩阵范数、Gauss消元法、三角分解法（Doolittle分解，Crout分解，Cholesky分解）、矩阵的条件数与误差分析、线性方程组的迭代方法（Jacobi方法，Gauss-Seidel方法，SOR方法）

课程内容

- 第三章 插值法与数值逼近

多项式插值（Lagrange插值、Newton插值、差分与等距节点的插值）、最佳平方逼近（最佳平方逼近、最小二乘法)

- 第四章 数值积分

数值积分的一般问题、等距节点的Newton-Cotes公式、Romberg积分法、Gauss求积公式

- 第六章 常微分方程数值解法

初值问题数值解法的一般概念、线性单步法（Euler法，梯形法，改进Euler法，Runge-Kutta法）、线性多步法

误差理论

误差的来源

- 固有误差

1.模型误差：建立数学模型时产生的误差

2.观测误差：参与计算的数是近似的

- 计算误差

1. 舍入误差 例如计算机上表示π,e…等无理数时产生的误差.

2. 截断误差

很多情况下不是对得到的数学问题进行求解，而是对它的某一近似问题求解. 例计算

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

用 $S_n(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!}$ 近似e^x

- 对于一个算法，误差分析十分重要，它是衡量一个算法是否有效的关键. 一个算法只有误差在所允许范围内，才是有效的，否则毫无意义.

误差的概念

- 绝对误差

假设某一量的准确值为x，其近似值为x^*，则称x-x^*为近似数x^*的绝对误差或简称误差.

- 绝对误差界

如果$|x-x^*|\leq\eta$，则称η为近似值x^*的绝对误差界或简称误差界.

- 相对误差

称$\dfrac{x-x^*}{x}$为近似值x^*的相对误差.

在实际问题中常取$\dfrac{x-x^*}{x^*}$为近似值x^*的相对误差.

- 相对误差界

如果$\left|\dfrac{x-x^*}{x}\right| \le \delta$，则称$\delta$为近似值$x^*$的相对误差界.

定义：若x的某一近似值x^*的绝对误差界是某一位的半个单位，则从这一位起直到左边第一个非零数字为止的所有数字都称为x^*的有效数字。

- 有效数字

设准确值x的近似值x^*可表示为

$x^*=\pm 0.\, a_1\, a_2 \ldots a_n \ldots \times 10^m$

其中m是整数，a_i是0到9之间的一个数字且$a_1 \neq 0$，如果$|x - x^*| \le \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$，则称近似值$x^*$具有$n$位有效数字，也可以说它精确到第$n$位。其中$a_1, a_2, \ldots, a_n$都是$x^*$的有效数字。如果表示一个数的数字全部是有效数字，则称此数为有效数。

有效数字越多，绝对误差界越小.

有效数字与相对误差的联系

- 定理　若准确值x的近似值

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

具有n位有效数字，则其相对误差满足

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

反之，若x^*满足 $\left|\frac{x-x^*}{x^*}\right|\le\frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-n+1}$

则x^*至少具有n位有效数字。

有效数字越多，相对误差界越小.

数值计算中应注意的一些问题

- 防止有效数字损失（要避免两个相近的数相减， 要避免大数“吃掉”小数，要避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法）；
- 注意简化运算步骤，减少运算次数.
- 要使用数值稳定的算法;

1.防止有效数字损失：避免两个相近的数相减

例0.2 用中心差商公式

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \quad , \qquad (0.3.1)$$

求$\mathrm{f(x)} = \sqrt{\mathrm{x}}$在$\mathrm{x} = 2$的导数近似值。

解：根据所给公式

$$\frac{\mathrm{d}\sqrt{\mathrm{x}}}{\mathrm{dx}} \approx \frac{\sqrt{\mathrm{x+h}}-\sqrt{\mathrm{x-h}}}{\mathrm{2h}}, \qquad (0.3.2)$$

用5位字长的数字计算，取$\mathrm{h} = 0.1$得

$$\left.\frac{\mathrm{d}\sqrt{\mathrm{x}}}{\mathrm{dx}}\right|_{\mathrm{x}=2} \approx \frac{1.4491-1.3784}{0.2} = 0.35350。$$

1.防止有效数字损失：避免两个相近的数相减

与导数精确值$\frac{1}{2\sqrt{2}} = 0.353553$...比较，计算结果是可接受的。

然而，若取$h = 0.0001$，则由

$$\left.\frac{\mathrm{d}\sqrt{\mathrm{x}}}{\mathrm{dx}}\right|_{\mathrm{x}=2} \approx \frac{1.4142-1.4142}{0.0002} = 0,$$

计算结果完全失真。由于计算机保留有效数字的限制，当h很小时，两个相近的数相减，损失了有效数字。为了避免损失有效数字，将（0.3.2）改成

$$\frac{\mathrm{d}\sqrt{\mathrm{x}}}{\mathrm{dx}} \approx \frac{1}{\sqrt{\mathrm{x+h}}+\sqrt{\mathrm{x-h}}}。$$

若仍取$h = 0.0001$，上式计算出的值是0.35356，这一结果保留了4位有效数字。

1.防止有效数字损失：避免两个相近的数相减

在数学的角度，表达式$\frac{\sqrt{x+h}-\sqrt{x-h}}{2h}$与$\frac{1}{\sqrt{x+h}+\sqrt{x-h}}$完全相等。数值计算中的舍入误差造成计算效果的不同。下面我们分析Taylor公式

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}+\frac{h^2}{6}f''(\zeta),\qquad x-h<\zeta<x+h,$$

即用式（0.3.1）近似$f'(x)$，其截断误差为$\frac{h^2}{6}f''(\zeta)$，当h不太小时，近似计算的误差主要取决于截断误差；当h很小时，截断误差变得微乎其微，对结果的影响占主要地位的是舍入误差，而不是截断误差。

在一般的数值计算中，截断误差与舍入误差之间常常处于这种矛盾之中，要解决这种矛盾，通常的做法是，在满足给定的截断误差范围内，尽量选取大的步长h。

1.防止有效数字损失：避免大数“吃掉”小数

【例 0.3】 在计算机上求二次方程 $ax^2+bx+c=0$ 的根
【解】 由求根公式，得

$$x_1=\frac{-b+\sqrt{b^2-4ac}}{2a},\qquad x_2=\frac{-b-\sqrt{b^2-4ac}}{2a},$$

如果 $b^2 \gg |ac|$，则 $\sqrt{b^2-4ac}\approx|b|$，若用上面公式计算 x_1 和 x_2，其中之一将会损失有效数字.原因就是由于在 b^2-4ac 中，大数 b^2 “吃掉了”小数 $4ac$，并且公式之一中出现两个值相近的数相减。如果改用公式

$$x_1=\frac{-b-sign(b)\sqrt{b^2-4ac}}{2a},\qquad x_2=\frac{c}{ax_1}$$

就可以得到好的结果。其中 $sign(b)$ 是 b 的符号函数。

2. 简化运算步骤，减少运算次数

对于 n 次多项式 $P_n = a_n x^n + \cdots + a_1 x + a_0$ ，要计算在某一点 x_0 的值 $P_n(x_0)$.如果直接计算需要计算 $n + n - 1 + \cdots + 1 = \frac{n(n+1)}{2}$ 次乘法和 n 次加法. 如果把它写成

$$P_n(x_0) = ((\cdots(a_n x_0 + a_{n-1})x_0 + a_{n-2})x_0 + \cdots + a_1)x_0 + a_0,$$

记$s_n = a_n$，$s_k = s_{k+1}x_0 + a_k$，$k = n-1, n-2, \cdots, 1,0$，则只需要做 n 次乘法和 n 次加法就可计算出 $s_0 = P_n(x_0)$ ，这大大减少了计算次数.这就是计算多项式的著名的**秦九韶算法**.

2. 简化运算步骤，减少运算次数

【例 0.4】 利用$\ln(1+x)=\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\frac{x^n}{n}$计算$ln2$，要求精确到$10^{-5}$.

【解】 如果直接计算，这需要计算10万项求和，才能达到精度要求，不仅计算量很大，而且舍入误差的积累也十分严重.如果改用级数

$$ln\frac{1+x}{1-x}=2\left(x+\frac{x^3}{3}+\frac{x^5}{5}+\cdots+\frac{x^{2n+1}}{(2n+1)}+\cdots\right),$$

取$x=\frac{1}{3}$，只须计算前9项，截断误差便小于10^{-10}

3. 使用数值稳定的算法

一个数值方法如果输入数据有扰动（即误差），而在计算过程中由于舍入误差的传播，造成计算结果与真值相差甚远，则称这个数值方法是**不稳定的**或是**病态的**。反之，在计算过程中舍入误差能够得到控制，不增长，则称该数值方法是**稳定的**或**良态的**。

【例0.5】计算$y_n = 10y_{n-1} - 1, n = 1,2,\cdots,$并估计误差。其中$y_0 = \sqrt{3}$

【解】 由于$y_0 = \sqrt{3}$是无限不循环小数，计算机只能截取其前有限位数，这样得到y_0经机器舍入的近似值$\tilde{y}_0$，记$\tilde{y}_n$为利用初值$\tilde{y}_0$按所给公式计算的值，并记$e_n = y_n - \tilde{y}_n$，则

$$y_n = 10^n y_0 - 10^{n-1} - 10^{n-2} - \cdots - 1,$$

$$\tilde{y}_n = 10^n \tilde{y}_0 - 10^{n-1} - 10^{n-2} - \cdots - 1,$$

$$e_n = y_n - \tilde{y}_n = 10^n (y_0 - \tilde{y}_0) = 10^n e_0.$$

3. 使用数值稳定的算法

这个结果表明，当初始值存在误差e_0时，经n次递推计算后，误差将扩大为10^n倍，这说明计算是不稳定的。这种不稳定现象在数值分析中也经常会遇到，特别是在微分方程的差分计算中。我们在实际应用中要选择稳定的数值方法，不稳定的数值方法是不能使用的。

在实际计算中，对任何输入数据都是稳定的数值方法，称为**无条件稳定**；对某些数据稳定，而对另一些数据不稳定的数值方法，称为**条件稳定**。

习题

1. 下列各数都是经过四舍五入得到的近似数，即误差限不超过最后一位的半个单位，试指出它们是有几位有效数字：
   $x_1^* = 1.1021$，$x_2^* = 0.031$，$x_3^* = 385.6$，$x_4^* = 56.430$，$x_5^* = 7 \times 1.0$
2. 设$Y_0 = 28$，按递推公式

$$Y_n = Y_{n-1} - \frac{1}{100}\sqrt{783}, \qquad n = 1,2,\cdots$$

   计算到Y_{100}。若取$\sqrt{783} \approx 27.982$（5 位有效数字），试问计算$Y_{100}$将有多大误差？
3. 求方程$x^2 - 56x + 1 = 0$的两个根，使它至少具有 4 位有效数字（$\sqrt{783} \approx 27.982$）。