



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

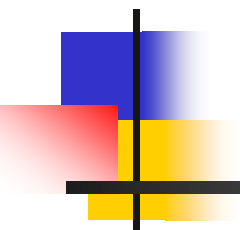
多项式插值（Lagrange插值、Newton插值、差分与等距节点的插值）、最佳平方逼近（最佳平方逼近、最小二乘法）

■ 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

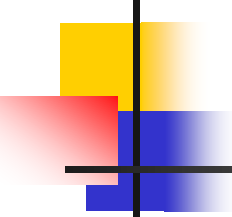
- 计算误差

1. 舍入误差 例如计算机上表示 π, e, \dots 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

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

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



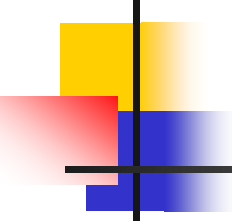
■ 相对误差

称 $\frac{x - x^*}{x}$ 为近似值 x^* 的相对误差.

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

■ 相对误差界

如果 $\left| \frac{x - x^*}{x} \right| \leq \delta$, 则称 δ 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

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

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

$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$ ，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, \dots, 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

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

具有 n 位有效数字，则其相对误差满足

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

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

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

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

求 $f(x) = \sqrt{x}$ 在 $x = 2$ 的导数近似值。

解：根据所给公式

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

用5位字长的数字计算，取 $h = 0.1$ 得

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



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 $\frac{1}{2\sqrt{2}} = 0.353553\dots$ 比较，计算结果是可接受的。

然而，若取 $h = 0.0001$ ，则由

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

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

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

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

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

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

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

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

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

就可以得到好的结果。其中 $\text{sign}(b)$ 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 $\ln 2$ ，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 $y_n = 10y_{n-1} - 1, n = 1, 2, \dots$ ，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

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

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

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



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

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

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 ($\sqrt{783} \approx 27.982$)。