计算方法

华中科技大学数学系

教材

张诚坚, 高健, 何南忠 . 计算方法. 北京：高等教育出版社,1999年

参考书

- 李庆扬, 易大义, 王能超. 现代数值分析, 北京：高等教育出版社
- *Richard L. Burden & J. Douglas Faires* . **Numerical Analysis(Seventh Edition)**, 北京：高等教育出版社, 2001
- 徐士良. C常用算法程序集(第二版). 北京： 清华大学出版社，1996

期末考试试题

期末考试的试卷有填空题和解答题。

解答题共7个题，分数约占70％。

期末考试主要考核：

基本概念；

基本原理；

基本运算。

必须带简易计算器。

总成绩=平时成绩*20%+期末成绩*80%

§1 绪论

第1节 数值算法概论

第2节 预备知识与误差

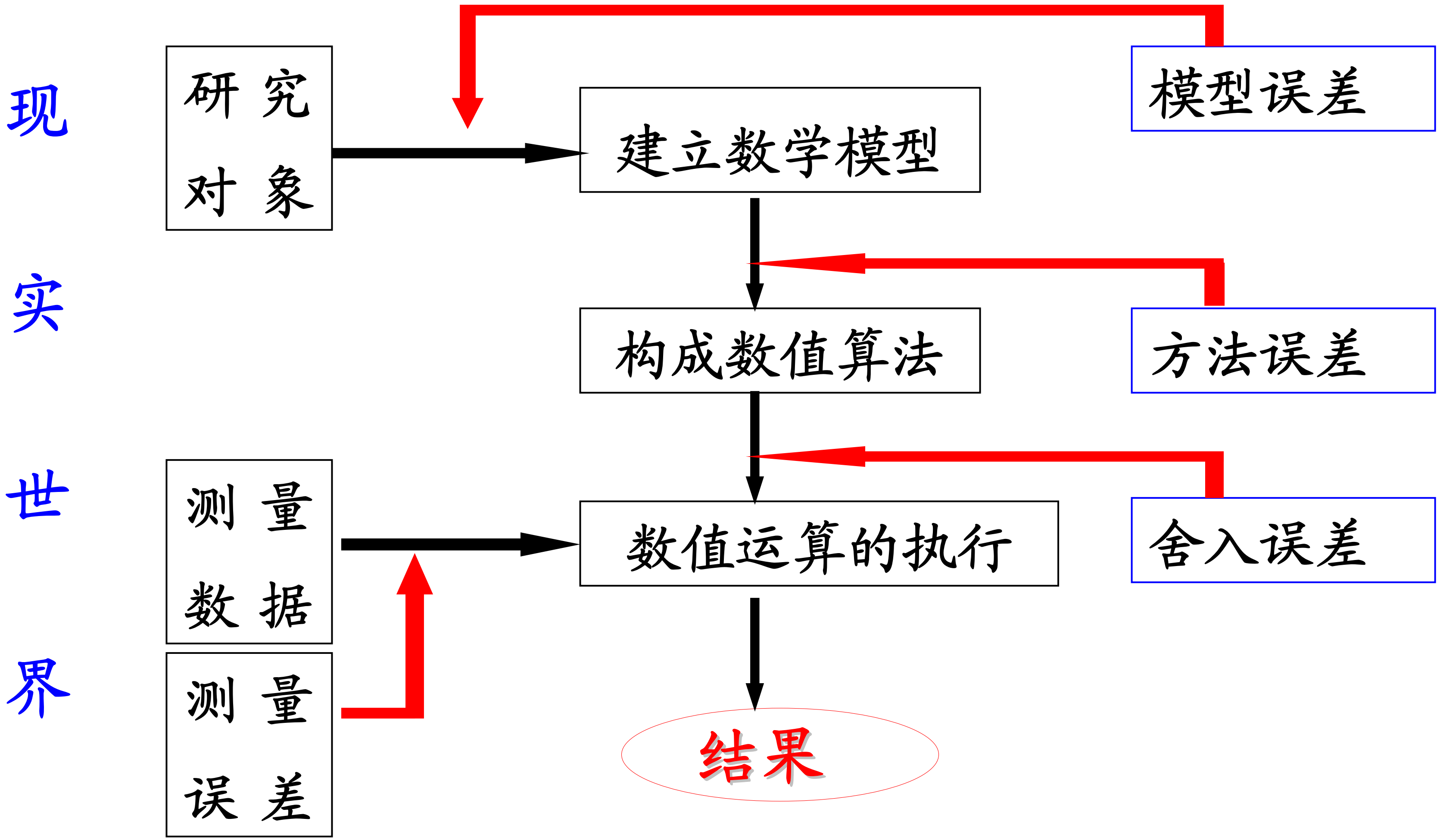
第1节　数值算法概论

1. 引言

数值计算已经是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。

2. 计算机数值方法的研究对象与特点

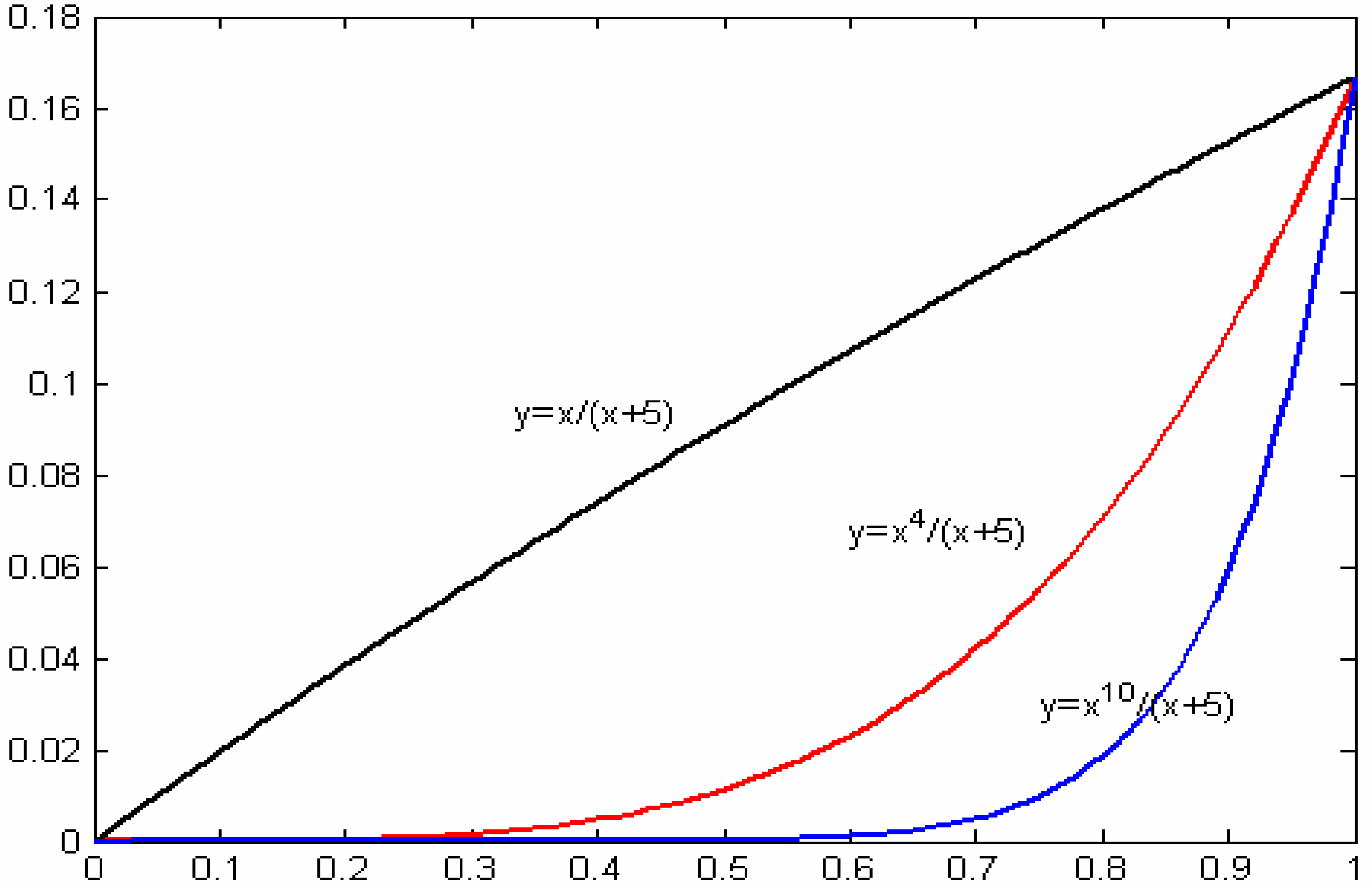


计算问题

例

1. 求方程 $3x^2+8x-3=0$ 在 $[0,1]$上的根 x^* ；
2. 求解线性方程组 $Ax=b$ ，其中 A 为3阶可逆方阵， $x=(x_1,x_2,x_3)^T$ ；
3. 已知 $y=P(x)$ 为 $[x_0,x_1]$ 上的直线，满足 $P(x_0)=y_0$ ， $P(x_1)=y_1$ ， $\overline{x}\in(x_0,x_1)$, 求 $P(\overline{x})$ ；
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 $\begin{cases} y'=x+y \\ y(x_0)=y_0 \end{cases}$

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



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

构造算法如下:

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

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

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

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

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

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

n	I_n	$\tilde{I}_n$	$\bar{I}_n$
0	0.182	0.182	0.182
1	0.088	0.090	0.088
2	0.058	0.050	0.058
3	0.0431	0.083	0.0431
4	0.0343	-0.165	0.0343
5	0.0284	1.025	0.0284
6	0.024	-4.958	0.024
7	0.021	24.933	0.021
8	0.019	-124.540	0.019

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

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

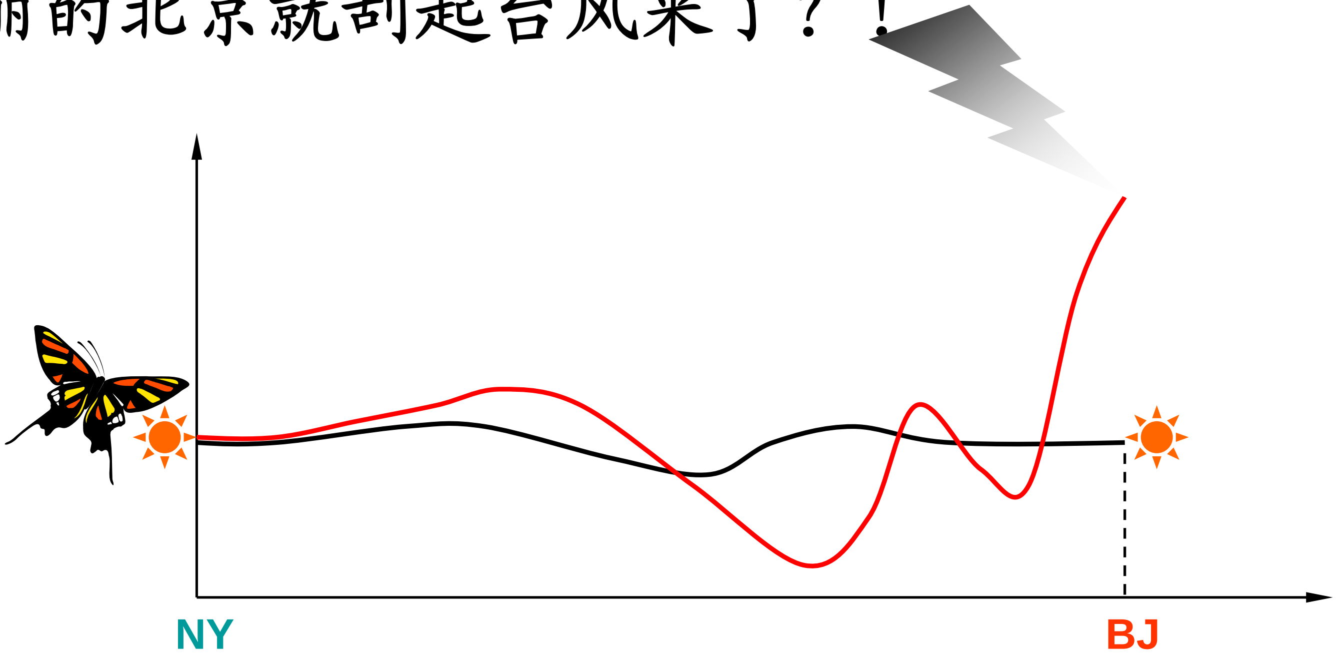
原因：对格式1，如果前一步有误差，则被放大5倍加到这一步

称为不稳定格式

对格式2，为稳定格式，对舍入误差有抑制作用

误差的传播与积累

例：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？！



以上是一个病态问题

3　数值算法

针对输入与输出的都是数值的数学问题.

例:求解微分方程: $\begin{cases} y' = 2x + 3 \\ y(0) = 0 \end{cases}$　其解: $y = x^2 + 3x$

将其变成数值问题，即将其“离散化”

$$x_1 < x_2 < \cdots < x_n, x_i = x_{i-1} + h$$

$$y(x_1), y(x_2), \cdots, y(x_n)$$

$$y'(x) \approx \frac{y(x+h) - y(x)}{h}$$

“离散化”是将非数值问题的数学模型化为数值问题的主要方法，这也是计算方法的任务之一.

计算方法的主要任务:

1. 将计算机上不能执行的运算化为在计算机上可执行的运算

2. 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

3. 因为可能采用了近似等价运算，故要进行误差分析，即数值问题的性态及数值方法的稳定性

数值算法是指有步骤地完成解数值问题的过程.

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

例如　给出等差数列1, 2, 3, …, 10000的求和算法

算法构造如下:

1. 取$N=0, S=0$

记数器置零

2. $N+1 \Rightarrow N, S+N \Rightarrow S$

3. 若$N<10000$,转2，否则

4. 输出N, S

例如 计算X^{255}

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

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

第2节　预备知识与误差

一、误差的种类及来源

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.

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.

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。

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

$$\pi = 3.14159265\cdots \qquad \pi \approx 3.1415927$$

$$\sqrt{2} = 1.414213562\ \cdots \qquad \sqrt{2} \approx 1.4142136$$

$$\frac{1}{3!} = \frac{1}{6} = 0.166666666\ \cdots \qquad \frac{1}{3!} \approx 0.16666667$$

数学模型一旦建立，进入具体计算时所考虑和分析的就是截断误差和舍入误差。

误差与有效数字

◆ 绝对误差

$e^* = x - x^*$　其中 x^*为精确值，x为x^*的近似值。

$|e^*|$的上限记为 ε^*，称为**绝对误差限**，

工程上常记为 $x^* = x \pm \varepsilon^*$

例如: $\int_0^1 e^{-x^2} dx = 0.743 \pm 0.006$

◆ 相对误差　　$e_r^* = \dfrac{e^*}{x^*}$

x 的**相对误差上限**定义为 $\varepsilon_r^* = \dfrac{\varepsilon^*}{|x|}$

◆有效数字

用科学计数法，记 $x=\pm 0.a_1a_2\cdots a_n\times 10^m$ (其中 $\boldsymbol{a_1\neq 0}$)
若 $|\boldsymbol{x-x^*}|\leq \mathbf{0.5\times 10^{m-n}}$ （即 $\boldsymbol{a_n}$ 的截取按四舍五入规则），则称 $\boldsymbol{x}$ 为有 $\boldsymbol{n}$ 位有效数字，精确到 $\mathbf{10^{m-n}}$。

例：$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{3.1415926535\ \ 897932}\ \cdots\cdots;\quad \boldsymbol{\pi^*} = \mathbf{3.1415}$
问: $\boldsymbol{\pi^*}$ 有几位有效数字？请证明你的结论。

证明: $\because \pi^* = 0.31415\times 10^1$,

and $|\pi^*-\pi| < 0.5\times 10^{-3} = 0.5\times 10^{1-4}$

$\therefore \pi^*$ 有**4** 位有效数字，精确到小数点后第 **3** 位。

例如 已知$e = 2.718\,281\,82\cdots$，其近似值为 $e^* = 2.718\,28$，求e^*的绝对误差限 ε和相对误差限 ε_r^*.

解: 绝对误差 $E = e^* - e$

$$= -0.000\,001\,82\cdots$$

$$|E| = 0.000\,001\,82\cdots \le 0.000\,002 = 2\times 10^{-6}$$

$$\varepsilon = 2\times 10^{-6}$$

$$\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon}{|e^*|} = \frac{2\times 10^{-6}}{2.718\,28}$$

ε和ε_r^*并不是唯一的

$$= \frac{2\times 10^{-6}}{2.718\,28} \approx 0.71\times 10^{-6}$$

例如 若π经四舍五入取小数点后 3,5,7位数的近似值，求绝对误差限 ε.

解: $\pi = 3.141\,592\,65\cdots$ $|\pi - \pi^*| \le \varepsilon$

$\pi^* = 3.142$ $0.000\,407\cdots$ $\le 0.5\times 10^{-3}$

$\pi^* = 3.141\,59$ $0.000\,002\,65\cdots$ $\le 0.5\times 10^{-5}$

$\pi^* = 3.141\,592\,7$ $0.000\,000\,04\cdots$ $\le 0.5\times 10^{-7}$

可见,经四舍五入取近似值,其绝对误差限将不超过其末位数字的半个单位

定理1. 若x^*作为x的近似值满足

$$x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_m \times 10^k$$

$$|E| = |x^* - x| \le 0.5 \times 10^{k-n}$$

则$m \ge n$时，x^*至少有n位有效数字

而$m \le n$时，x^*恰好有m位有效数字

例如 求下列四舍五入近似值的有效数字个数.

$x_1^* = 0.218$ 3个 $x_4^* = -218.0$ 4个

$x_2^* = 0.00218$ 3个 $x_5^* = 2.18 \times 10^2$ 3个

$x_3^* = 2.180$ 4个 $x_5^* = 0.21800 \times 10^{-6}$ 5个

例如 设$x = 3.95$有3个近似值

$$x_1^* = 4.0 \qquad x_2^* = 3.9 \qquad x_3^* = 4$$

$$|x_1^* - x| = |4.0 - 3.95| = 0.05 \le 0.5 \times 10^{1-2}$$

$$|x_2^* - x| = |3.9 - 3.95| = 0.05 \le 0.5 \times 10^{1-2}$$

$$|x_3^* - x| = |4 - 3.95| = 0.05 \le 0.5 \times 10^{1-2}$$

根据定理1,知x_1^*, x_2^*都至少有两个有效数字

即x_1^*, x_2^*都具有两个有效数字

x_3^*也至少具有两个有效数字吗? 实际上只有1位

例：为使 π^*的相对误差小于0.001%，至少应取几位有效数字？

解：假设 π^* 取到 n 位有效数字，则其相对误差上限为

$$\varepsilon_r^* \le \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$$

要保证其相对误差小于0.001%，只要保证其上限满足

$$\varepsilon_r^* \le \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1} < 0.001\,\%$$

已知 $a_1 = 3$，则从以上不等式可解得 $n > 6 - \log 6$，即 $n \ge 6$，应取 $\pi^* = 3.14159$。

∎