数值分析

Computational Methods / Numerical Analysis

华中科技大学计算机科学与技术学院
HUST

School of Computer Science & Technology

2022

Version 6.3

HUST

主讲教师

许贵平

Email: gpxu@hust.edu.cn

助　教：王佳璇

学习群：HUST_CS_NA_XU
（QQ 1148930924）

群名称:HUST_CS_NA_XU
群　号:1148930924

头歌平台：https://www.educoder.net
（数值分析 课堂—邀请码：Q4MF2Z）

HUST

首次课主要内容:

1. 课程简介

2. 数值分析/计算方法导引

Computational Methods(Numerical Analysis) Introduction

3. 误差分析的基本理论（Error Analysis）

考评要求

- 作业:(about 30% of final grade)
  - 5次作业（纸上手写答题，拍照整理后，分题上传清晰图片至头歌平台作业答题区）
  - 请独立完成，不要抄袭，并在截止期前提交作业，不能补交
- 考试:(about 70% of final grade)
  - 闭卷
- 实验:基于Python编程的数值算法实现与数值计算及应用

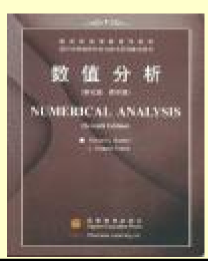
  (本学期自行完成，不计入成绩)

Textbook and references

- Textbook:
  - 付才,许如初. 计算方法(第2版)，电子工业出版社， 2021.
  - 崔国华,许如初. 计算方法，电子工业出版社，2002.

Textbook and references

- References:
  - *Scientific Computing: An Introductory Survey* (2nd Edition) by Michael T. Heath.（清华大学出版社，影印版）
  - *Numerical Analysis* (7th Edition) by Richard L. Burden and J. Douglas Faires. （高等教育出版社，影印版）
  - Python Programming And Numerical Methods: A Guide For Engineers And Scientists by Qingkai Kong et al.（https://pythonnumericalmethods.berkeley.edu/notebooks/Index.html）



Prerequisites

- 先修课程Prerequisite courses
  - 高等数学（微积分，线性代数，常微分方程）
  - 程序设计（C/Python语言编程等）
- 数学预备知识

  Mathematical preliminaries
  - **Rolle's Theorem**
  - **Langrange's Mean Value Theorem**
  - **Weighted Mean Value Theorem for Integrals**
  - **Taylor's Theorem**

$f(x) \in C[a, b]$, and f is differentiable on (a, b). $f(a)=f(b) \Rightarrow \exists x \in (a,b)$, $f'(x)=0$

$f(x) \in C[a, b]$, and $g(x)$ is integrable and does not change sign on (a, b). Then $\exists x \in (a,b)$ with $\int_a^b f(x)g(x)dx = f(x)\int_a^b g(x)dx$

什么是数值分析?

Chapter 1 Introduction

Numerical Analysis is concerned with the design and analysis of algorithms for solving mathematical problems that arise in many fields, especially science and engineering.

----Michael T. Heath

Numerical analysis is the study of algorithms for the problems of continuous mathematics.

----Lloyd N. Trefethen

HUST

什么是数值分析?

Numerical Analysis has always been strongly linked to mathematics, applications and the computer. It is a part of applied mathematics and its language is mathematics. Its purpose is to solve real world problems from basic physics to practical engineering. The tool used to obtain the solution is the computer.

Thus its development is often driven by technology, both in terms of computer capacity and architecture and also by the many technological applications.

----Gene Golub

什么是数值分析?

Chapter 1
Introduction

“数值分析”就是研究在计算机上解决连续性数学问题的理论和数值方法。

- **数值算法的构造**
- **算法的理论分析**

HUST

数值分析的学科别名

- 计算方法
- 科学与工程计算

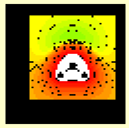
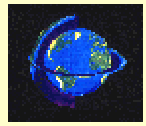
科学计算的重要性

- 科学计算是工程实践的重要工具
- 科学计算是继理论与实验后另一科学研究手段
- 科学计算的国家战略与发展：战略计算

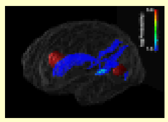
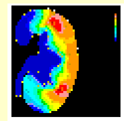
Scientific and Engineering Applications

Chapter 1 Introduction

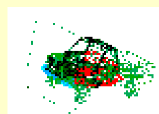
From Dr. Zhijun Wu

Plasma Physics, Quantum Chemistry Earth Simulation, Climate Modeling

Protein Folding, Tumor Growth Heart Simulation, Kidney Modeling

Airplane Design, Crash Simulation

HUST

Prediction Models for COVID-19

Chapter 1 Introduction

Ordinary Differential Equations

From School of Public Health, Tongji Medical College, HUST

$$\frac{dS}{dT} = -\frac{kbI_U S}{N} - \frac{kbI_U S(1-q)b}{N} + S_q r_q \quad (1)$$

$$\frac{dS_q}{dT} = \frac{kI_U Sq(1-b)}{N} - S_q r_q \quad (2)$$

$$\frac{dE}{dT} = \frac{kbI_U S(1-q)}{N} - \frac{E}{p} \quad (3)$$

$$\frac{dE_q}{dT} = \frac{kbqI_U S}{N} - \frac{E_q}{p} \quad (4)$$

$$\frac{dI_D}{dT} = wI_U + zI_q - (v+m)I_D \quad (5)$$

$$\frac{dI_U}{dT} = \frac{E}{p} - I_U(v+m+w) \quad (6)$$

$$\frac{dI_q}{dT} = \frac{E_q}{p} - zI_q - (v+m)I_q \quad (7)$$

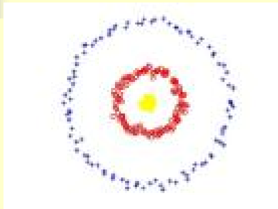
$$\frac{dR}{dT} = (v+m)(I_U + I_q + I_D) \quad (8)$$

$$R_0 = \frac{kb(1-q)S}{(v+m+w)N} \quad (9)$$

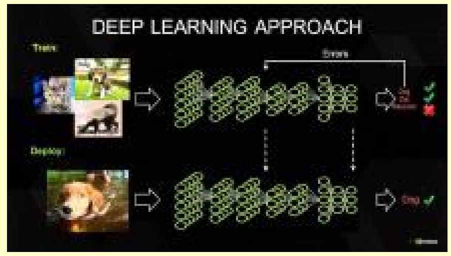
HUST

Applications in Data Science and AI

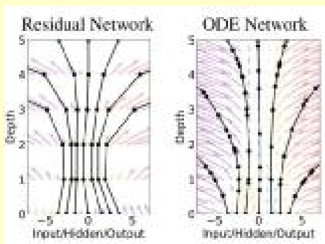
Chapter 1 Introduction



Data Mining:
Spectral Clustering,
Dimensionality Reduction with PCA
-Matrix Decompositions(e.g. SVD)



Deep Learning:
Model Training
-Stochastic Gradient Descent



Neural Ordinary Differential Equations (NIPS 2018):
-A new deep neural network model
- Residual network vs. ODE network

Some past developments in scientific computing

----Lloyd N. Trefethen

Chapter 1 Introduction

Ø Before 1940

Newton's method
Gaussian elimination
Gauss quadrature (求积法)
Least-squares fitting
Adams and Runge-Kutta formulas
Richardson extrapolation

Ø 1940--1970

floating point arithmetic
Fortran
Finite differences
Finite elements
Simplex algorithm (单纯形算法)
Monte Carlo
FFT
Orthogonal linear algebra

Ø 1970--1998

Quasi-Newton iterations
Adaptivity
Stiff ODE solvers
Software libraries
Sparse and iterative linear algebra
Multigrid
Matlab
Interior point methods
Spectral methods

The future development in scientific computing
----Lloyd N. Trefethen

- **1998--2048**
  - Linear algebra in $O(N^{2+e})$ flops
  - Multipole methods
  - Breakthroughs in preconditioners, spectral methods, time stepping for PDE

* speech and graphics everywhere
* fully intelligent, adaptive numerics
* loss of determinism
* seamless interoperability
* massively parallel computing made possible by ideas related to the human brain
* new programming methods made possible by ideas related to natural selection
* Evolutionary computation

数值分析课的主要内容(Topics)

- 误差的基本理论
- 插值和函数逼近
- 数值微分和数值积分
- 常微分方程和偏微分方程数值解法
- 求解线性和非线性方程的直接法和间接法
- 代数特征值问题的数值解法

数值分析的学科特点

Chapter 1
Introduction

实用性　　理论性　　实践性

（1）面向计算机，根据计算机的特点提供可行的有效算法；

- 只提供加、 减、 乘、 除和逻辑运算
- 串行机和并行机、CPU和GPU

（2）有可靠的理论分析：算法的收敛性、稳定性、误差分析；

（3）有好的计算复杂性：时间和空间复杂性；

（4）有充分的数值实验。

HUST

构造数值算法的基本思想

Chapter 1
Introduction

§ 近似替代

§ 离散化

§ 递推化

HUST

近似替代

例1 计算无理数e的近似值.

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

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

这是一个无限过程，计算机无法实现。

一般取其前有限项的和作为近似值。

$$e \approx 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \ldots + \frac{1}{n!}$$

把不能用有限次运算求解的问题,简化为用有限次运算求解的问题

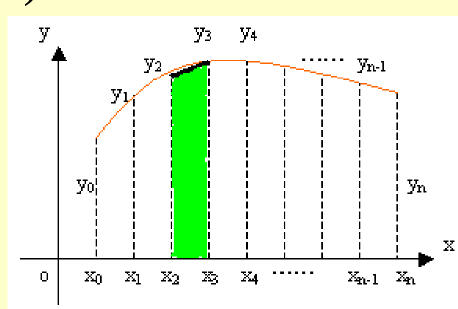
由Taylor公式,由此产生的误差: $|R_n| < \frac{e}{(n+1)!} < \frac{3}{(n+1)!}$

$$\because e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \ldots + \frac{x^n}{n!} + \frac{e^{\theta x}}{(n+1)!} x^{n+1}, (0 < \theta < 1)$$

离散化---把求连续变量的问题转化为求离散变量的问题

例2 计算定积分 $I = \int_a^b f(x)dx$

I为如图所示的曲边梯形的面积，这个连续的问题，无法在计算机上计算。



一般，可以如下计算：

1. n等分[a,b]，$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b, y_i = f(x_i), i = 0, 1, \ldots n.$

2. 用n个小梯形的面积之和近似代替曲边梯形的面积

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{n}[\frac{1}{2}(y_0 + y_n) + y_1 + \ldots + y_{n-1}]$$

递推化---复杂的计算归结为简单过程的多次重复。易于用循环结构来实现(迭代法)。

例3 计算多项式 $P_n(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\ldots+a_1x+a_0$

构造递推过程:

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

令 $u_0=a_n,\quad u_1=a_nx+a_{n-1}=u_0x+a_{n-1}$

$$\begin{aligned}\therefore P_n(x)&=u_1x^{n-1}+a_{n-2}x^{n-2}+\ldots+a_1x+a_0\\&=(u_1x+a_{n-2})x^{n-2}+\ldots+a_1x+a_0\\&=u_2x^{n-2}+\ldots+a_1x+a_0\end{aligned}$$

$$\ldots\quad \begin{cases}u_0=a_n\\ u_k=u_{k-1}x+a_{n-k}\end{cases}\quad (1.3)\qquad \Rightarrow P_n(x)=u_n$$

这是宋代数学家秦九韶最先提出的，称为秦九韶算法(Horner **算法**)。

学习“计算方法”需注意如下几点

1. **要掌握算法的原理和思想**
2. **要掌握算法的处理技巧,步骤和计算公式**
3. **重视误差分析,理解收敛性,稳定性分析的理论**
4. **做一定的理论分析证明与计算练习**
5. **上机实践**

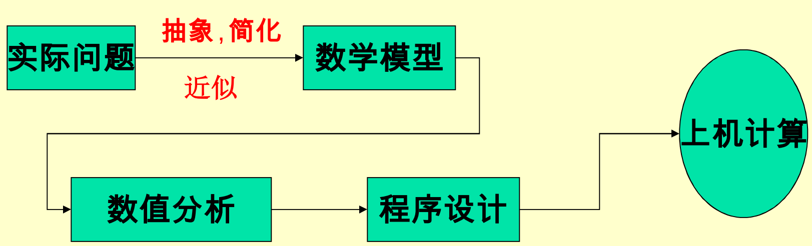
1.2 误差的基本理论

1、用计算机进行实际问题的数值计算时,往往求得的是问题的近似解， 存在误差。

2、误差是难以避免,既要允许误差,又要控制误差。要重视误差分析,分析误差的来源,误差的传播及对误差作出估计。

误差来源

人们用计算机解决科学与工程计算问题的过程:



其中主要会产生以下几个方面的误差：

1.模型误差　　3.截断误差

2.观测误差　　4.舍入误差

模型误差.观测误差

- 数学模型是对实际问题的抽象、简化和近似，存在误差

  —— **模型误差** /* Modeling Error */

  例 英国经济学家Malthus的人口模型

$$\begin{cases} \dfrac{dp}{dt} = a\,p \\ p(t_0) = p_0 \end{cases} \quad (1)$$

其中 $a = 0.029$ 为生态系数。

$$\begin{cases} \dfrac{dp}{dt} = a\,p - b\,p^2 \\ p(t_0) = p_0 \end{cases} \quad (2)$$

其中 $b > 0$ 为社会摩擦系数。

- 通过测量或实验得到模型中参数的值而产生的误差

  —— **观测误差** /* Measurement Error */

截断误差

- 求近似解 —— **方法误差 (截断误差** /* Truncation Error */ **)**

例4 $e^x = 1 + x + \dfrac{x^2}{2!} + \ldots + \dfrac{x^n}{n!} + \ldots$

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

此时截断误差为

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

舍入误差

Chapter 1 Introduction

Ø **机器字长有限——舍入误差** /* Roundoff Error */

由于计算机的字长有限,只能对有限位数进行运算,超过的位数按一定规则舍入,产生“舍入误差”.

如 $\pi = 3.1415926\ldots, \sqrt{2} = 1.41421356\ldots$

在计算机上运算时,只能取前有限位:

若取小数点后4位数字,舍入误差是

$$3.1416 - \pi = 0.0000074\ldots, \quad 0.3333 - \frac{1}{3} = -0.000033\ldots$$

小结: **模型误差、观测误差不是数值分析讨论的内容,计算方法主要研究截断误差和舍入误差在计算过程中的传播和对计算结果的影响,以提高计算的精度。**

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

Chapter 1 Introduction

解法之一: 将 e^{-x^2} 作Taylor展开后再积分

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

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

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 */

由截去部分引起

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** /* Roundoff Error */ $| < 0.0005 \times 2 = 0.001$

$\left|\text{计算} \int_0^1 e^{-x^2}dx \text{ 的总体误差}\right| < 0.005 + 0.001 = 0.006$

由留下部分引起

误差，误差限

- 绝对误差 /* absolute error */

定义1.1 令 x 是精确值，x^* 是它的一个近似值，则

$e(x)=|x-x^*|$ 是 x^* 的绝对误差；

$e=x^*-x$ 是 x^* 误差； /*有教材称此为绝对误差*/

（1）误差是有量纲的，可正可负；

（2）$\varepsilon(x)$ 的大小表明了x^*的精度，但难以计算其精确值，

不过，可以估计出它的一个上界 η，

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

称 η 为x^* 的绝对误差限（或误差限） /* accuracy */；

$$x^*-h\le x\le x^*+h \text{或} x\in[x^*-h,x^*+h] \text{或} x=x^*\pm h$$

（3）可取$h=0.5\times10^p$，p为符合条件的最小整数。

误差,误差限

例1.8 用有毫米的刻度的米尺测量桌子的长度，读出的长度

$$x^*=1235mm$$

这是桌子实际长度 x 的近似值，由米尺的精度知，这个近似值的误差不会超过0.5mm(即绝对误差限为1/2mm)，则

$$|x^*-x|=|1235-x|\le\frac{1}{2}mm$$

$$1234.5\le x\le1235.5$$

即 $x\in[1234.5,1235.5]$

或 $x=1235\pm0.5mm$

有效数字

Ø有效数字 /* significant digits */

定义1.2 若近似值 x^* 的绝对误差限为某一位上的半个单位,且该位直到 x^* 的第一位非零数字共有n位,则称近似值 x^* 有n位有效数字,或说 x^* 精确到该位。

例1.10 设 $x=p=3.1415926\ldots$ 那么

1. $x_1^*=3,\ e_1(x)=0.14159\ldots\ldots\le 0.5\times 10^0$

   x_1^* 的有效数字为1位3, 或 x_1^* 精确到个位.

2. $x_2^*=3.1416,\ e_2(x)=0.00000734\ldots\le 0.5\times 10^{-4}\ (>0.5\times 10^{-5})$

   x_2^* 的有效数字为5位, 或者说 x_2^* 精确到0.0001.

有效数字

Chapter 1 Introduction

用科学计数法，记 $x^*=\pm 0.a_1a_2\ldots a_l\ldots a_n\times 10^m$

（其中a_1，a_2，…，a_n是0到9的自然数, $a_1\ne 0$ ）

当 $|x^*-x|\le\dfrac{1}{2}\times 10^{m-l}\qquad(1\le l\le n)$

则 x^* 有 l 位 有效数字 a_1，a_2，…，a_l

例1.11 用四舍五入法则取 x=4.26972的近似值。

取其前2位 x_1^* =4.3 有效数字为2位,此时 $|x_1^*-x|<=0.5\times 10^{-1}$

取其前4位 x_2^* =4.270 有效数字为4位,此时 $|x_2^*-x|<=0.5\times 10^{-3}$

注：数字末尾的0不可随意省去！

可以通过误差限或四舍五入法则确定其有效数字位数
可以通过有效数字的位数来确定其误差限.
} 定义(1.2)

有效数字练习

例 1.12 (1)若$x^*=3587.64$是x具有六位有数字的近似值,那么它的误差限是多少? (2) 若$x^*=0.0023156$是 x 的具有 5位有效数字的近似值,它的误差限是多少?

解: (1) $\because x^* = 0.358764\times10^4, (m=4, l=6)$

$$\therefore |x^*-x| \le \frac{1}{2}\times10^{4-6} = \frac{1}{2}\times10^{-2}$$

(2) $\because x^* = 0.23156\times10^{-2}, (m=-2, l=5)$

$$\therefore |x^*-x| \le \frac{1}{2}\times10^{-2-5} = \frac{1}{2}\times10^{-7}$$

例 1.13 若 $x=1000$，求 $x_1^*=999.9$与 $x_2^*=1000.1$有效数字位数。

解: $|x_1^*-x| = |x_2^*-x| = 0.1 < 0.5\times10^0$,

则它们分别有3和4位有效数字。

相对误差

- 相对误差 /* relative error */

$$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x^*-x}{x}$$ 为近似值x^*的相对误差。

注：（1）当$|e_r|$较小时，定义

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

（2）把相对误差绝对值的上界，称为相对误差限，记作 e_r

$$|e_r| = \frac{|x^*-x|}{|x^*|} \le \frac{h}{|x^*|} = e_r$$ /* relative accuracy */

其中η 是x^*的误差限。

Review

误差的来源： 模型误差、 观测误差、截断误差和舍入误差。

误差的表示： 误差、绝对误差限、有效数字、相对误差限

$e(x) = |x - x^*| \le h = \frac{1}{2}\times 10^{p}$ **p为符合条件的最小整数。**

$x^* = \pm 0.a_1 a_2 \ldots a_l \ldots a_n \times 10^m \quad |x^* - x| \le \frac{1}{2}\times 10^{m-l} \quad (1 \le l \le \mathrm{n})$

$\Leftrightarrow$ **则 x^* 有 l 位 有效数字 $a_1(\neq 0)$，a_2，…，a_l**

可以通过误差限或四舍五入法则确定其有效数字位数.

可以通过有效数字的位数来确定其误差限.

$$|e_r| = \frac{|x^* - x|}{|x^*|} \le \frac{h}{|x^*|} = e_r$$

练习

例1.14 光速$c = (2.997925 \pm 0.000001)\times 10^{10}\, cm/s$

$$c^* = 2.997925\times 10^{10}\, cm/s$$

绝对误差限 $\eta = 0.000001\times 10^{10}$cm/s

相对误差限 $e_r = \frac{h}{|c^*|} = \frac{0.000001}{2.997925} \approx 0.0000003.$

注：绝对误差与相对误差的区别

1. **绝对误差是有量纲，而相对误差无量纲。**
2. **对于同一个量的两个不同近似值，可以通过其绝对误差来判断谁更精确。对于两个不同量的近似值，只有通过其相对误差来比较其精确程度。**

相对误差与有效数字的联系一

F 有效数字 Þ 相对误差限

定理1.1 设近似值 $x^* = \pm 0.a_1a_2\ldots a_n \times 10^m$ 有n位有效数字，$a_1 \neq 0$，则其相对误差限为 $\frac{1}{2a_1}\times 10^{-n+1}$

证：∵ x^*有n位有效数字

$$\therefore\ |x^*-x| \le \frac{1}{2}\times 10^{m-n}$$

$$\because\ |x^*| = 0.a_1a_2\ldots a_n \times 10^m \ge a_1\times 10^{m-1}$$

$$\therefore\ \frac{|x^*-x|}{|x^*|} \le \frac{\frac{1}{2}\times 10^{m-n}}{a_1\times 10^{m-1}} = \frac{1}{2a_1}\times 10^{-n+1} \qquad ∎$$

注：该定理指出由近似值的有效数字可推出其相对误差限.

相对误差与有效数字的联系二

F 相对误差限 Þ 有效数字

定理1.2 设近似值 $x^* = \pm\ 0.a_1a_2..a_n \times 10^m$的相对误差限为 $\frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-n+1}$, $a_1 \neq 0$， 则它至少有n位有效数字.

证：$\because\ |x^*| = 0.a_1a_2\ldots a_n\times 10^m = a_1.a_2\ldots\times 10^{m-1} \le (a_1+1)\times 10^{m-1}$

$$\therefore\ |x^*-x| = \frac{|x^*-x|}{|x^*|}\cdot|x^*|$$

$$\le \frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-n+1}\times(a_1+1)\times 10^{m-1}$$

$$= \frac{1}{2}\times 10^{m-n}$$

所以x^*至少有n位有效数字. ∎

定理1.1与1.2 的应用

例1.15 用x^*=2.72来表示e的具有三位有效数字的近似值.求 x^* 的相对误差限?

解: $\because x^*=0.272\times10^1$ ，$a_1=2$

由定理1.1, 则

$$e_r \le \frac{1}{2a_1}\times10^{-3+1} = \frac{1}{2\times2}\times10^{-2} = \frac{1}{4}\times10^{-2} \qquad \blacksquare$$

定理1.1与1.2 的应用

例1.16 要使$\sqrt{20}$的近似值的相对误差限小于0.1%，要取几位有效数字?

解: 设应取n位有效数字，由定理1.1，有

Q $\sqrt{20}=4.4\ldots$ $\quad \therefore a_1=4,$

$$\therefore \quad e_r \le \frac{1}{8}\times10^{-n+1} < 0.1\% = 10^{-3} \Rightarrow 10^{-n+4} < 8$$

$\therefore\ n \ge 4$ 从而应取4位有效数字，即为4.427（查表得）。

1.2.4 算术运算的误差一

Chapter 1 Introduction

误差的传播：初始数据的误差对算术运算的结果有何影响？

令x^*、y^*分别 是x、y **的近似值，且**

$|x^*-x|\leqslant \eta(x^*)$、$|y^*-y|\leqslant \eta(y^*)$

1. x+y的近似值为x^*+y^*，则

$(x^*+y^*)-(x+y)=(x^*-x)+(y^*-y)$

$$\begin{aligned}|(x^*+y^*)-(x+y)| &= |(x^*-x)+(y^*-y)| \\ &\leqslant |x^*-x|+|y^*-y| \\ &\leqslant \eta(x^*)+\eta(y^*)\end{aligned}$$

所以x^*+y^*的误差限$\eta(x^*+y^*)=\eta(x^*)+\eta(y^*)$

和的误差等于误差的和，和的误差限等于误差限的和。

2. 类似， $(x^*-y^*)-(x-y)=(x^*-x)-(y^*-y)$

$\eta(x^*-y^*)=\eta(x^*)+\eta(y^*)$

HUST

1.2.4 算术运算的误差二

Chapter 1 Introduction

3. xy的近似值为x^*y^*，则

看: p.10
例1.19～1.22

$$\begin{aligned}\because |x^*y^*-xy| &= |x^*y^*-xy^*+xy^*-xy| \\ &= |y^*(x^*-x)+x(y^*-y)| \\ &\leqslant |y^*|\cdot|x^*-x|+|x|\cdot|y^*-y| \\ &\leqslant |y^*|\cdot|x^*-x|+|x^*-x-x^*|\cdot|y^*-y| \\ &\leqslant |y^*|\cdot|x^*-x|+|x^*|\cdot|y^*-y|+|x^*-x|\cdot|y^*-y| \\ &\leqslant |y^*|\eta(x^*)+|x^*|\eta(y^*)+\eta(x^*)\eta(y^*)\end{aligned}$$

$\therefore\ \eta(x^*y^*)=|y^*|\eta(x^*)+|x^*|\eta(y^*)+\eta(x^*)\eta(y^*)$

若$\eta(y^*)\ll|y^*|$或$\eta(x^*)\ll|x^*|$，则

$\eta(x^*y^*)\approx|x^*|\eta(y^*)+|y^*|\eta(x^*)$

4. $\eta\left(\dfrac{x^*}{y^*}\right)\approx\dfrac{|x^*|\eta(y^*)+|y^*|\eta(x^*)}{|y^*|^2}$，其中$y\neq 0$，$y^*\neq 0$

HUST

函数的误差估计 /*Error Estimation for Functions*/

问题：对于 $y = f(x)$，若用 x^* 取代 x，将对 y 产生什么影响？

分析：$e(y) = f(x^*) - f(x)$ ， $e(x) = x^* - x$，由中值定理

$$= f'(\xi)(x^* - x)$$

x^* 与 x 非常接近时，可认为 $f'(\xi) \approx f'(x^*)$ ，则有：

$$|e(y)| \approx |f'(x^*)| \cdot |e(x)| \text{ 或 } |e_r(y)| \approx |f'(x^*)| \cdot |e(x)|$$

即：x^*产生的误差经过 f 作用后被放大/缩小了$|f'(x^*)|$倍。故称 $|f'(x^*)|$为放大因子 或 绝对条件数 /* absolute condition number */.

$$|e_r(y)| = \left|\frac{e(y)}{y^*}\right| = \left|\frac{f(x^*) - f(x)}{f(x^*)}\right| = \left|\frac{f(x^*) - f(x)}{x^* - x} \cdot \frac{x^*}{f(x^*)} \cdot \frac{x^* - x}{x^*}\right|$$

$$|e_r(y)| \approx \left| f'(x^*) \cdot \frac{x^*}{f(x^*)} \right| \cdot |e_r(x)|$$

相对条件数

多元函数的误差估计

对多元函数 $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$，若 $x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*$分别是 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的近似值，则

$$e(y) = y^* - y \approx \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_k} e(x_k)$$

$$e_r(y) = \frac{y^* - y}{y^*} \approx \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_k} \cdot \frac{x_k^*}{y^*} \cdot e_r(x_k),$$

其中 $e(x_k) = x_k^* - x_k, e_r(x_k) = \dfrac{x_k^* - x_k}{x_k^*}$.

积与商的相对误差估计

Chapter 1
Introduction

应用刚才的公式，容易得出算术运算的相对误差估计：

（1）$y=f(x_1,x_2)=x_1\cdot x_2$，**则**

$$\because e_r(x_1\cdot x_2)\approx x_2^*\cdot\frac{x_1^*}{x_1^*\cdot x_2^*}e_r(x_1)+x_1^*\cdot\frac{x_2^*}{x_1^*\cdot x_2^*}e_r(x_2),$$

$$\therefore e_r(x_1\cdot x_2)\approx e_r(x_1)+e_r(x_2)$$

（2）$y=f(x_1,x_2)=\frac{x_1}{x_2}$，**则**

$$e_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right)\approx e_r(x_1)-e_r(x_2)$$

HUST

和与差的相对误差估计一

Chapter 1
Introduction

$$e_r(x_1+x_2)\approx\frac{x_1^*}{x_1^*+x_2^*}e_r(x_1)+\frac{x_2^*}{x_1^*+x_2^*}e_r(x_2)$$

$$e_r(x_1+x_2)\approx\left|\frac{x_1^*}{x_1^*+x_2^*}\right|e_r(x_1)+\left|\frac{x_2^*}{x_1^*+x_2^*}\right|e_r(x_2)$$

注1：若x_1^*与x_2^*同号，则

$$0\le\frac{x_1^*}{x_1^*+x_2^*},\frac{x_2^*}{x_1^*+x_2^*}\le 1\text{且}\frac{x_1^*}{x_1^*+x_2^*}+\frac{x_2^*}{x_1^*+x_2^*}=1$$

$$\therefore e_r(x_1+x_2)\le\max\{e_r(x_1),e_r(x_2)\}$$

$$|e_r(x_1+x_2)|\le\max\{|e_r(x_1)|,|e_r(x_2)|\}$$

$$\therefore e_r(x_1+x_2)\approx\max\{e_r(x_1),e_r(x_2)\}$$

HUST

和与差的相对误差估计二

Chapter 1
Introduction

$$e_r(x_1+x_2)\approx\frac{x_1^*}{x_1^*+x_2^*}e_r(x_1)+\frac{x_2^*}{x_1^*+x_2^*}e_r(x_2)$$

注2：若 $|x_1^*| >> |x_2^*|$ ，则

$$\mathrm{Q}\ \frac{x_1^*}{x_1^*+x_2^*}\approx 1 \text{而} \frac{x_2^*}{x_1^*+x_2^*}\approx 0$$

$$\therefore e_r(x_1+x_2)\approx e_r(x_1)$$

HUST

和与差的相对误差估计三

Chapter 1
Introduction

$$e_r(x_1+x_2)\approx\left|\frac{x_1^*}{x_1^*+x_2^*}\right|e_r(x_1)+\left|\frac{x_2^*}{x_1^*+x_2^*}\right|e_r(x_2)$$

注3：若 x_1^* 与 x_2^* 异号，且 $x_1^*+x_2^*\approx 0$，则相对误差条件数很大

$$\mathrm{Q}\ \left|\frac{x_1^*}{x_1^*+x_2^*}\right|>>1,\ \left|\frac{x_2^*}{x_1^*+x_2^*}\right|>>1,$$

此类计算问题称为坏条件的（或病态的），其初始数据的微小误差导致计算结果较大的误差，计算过程不稳定。因此要避免两相近的数相减。

例 计算 $1/662-1/663$（保留四位有效数字）

解法一： $1/662-1/663=\dfrac{1}{662\times 663}\approx 2.278\times 10^{-6}$

解法二： $1/662-1/663\approx$ **0.0015106 - 0.0015081 =0.0000025=2.5×10^{-6}**

HUST

多元函数误差估计公式的应用

$$e_r(y)=\frac{y^*-y}{y^*}\approx\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}{\partial x_k}\cdot\frac{x_k^*}{y^*}e_r(x_k)$$

例 1.18 分析函数 $u=\frac{xy}{zw}$ **的相对误差传播。**

$$e_r(u)\approx\frac{y^*}{z^*w^*}\cdot\frac{x^*}{u^*}e_r(x)+\frac{x^*}{z^*w^*}\cdot\frac{y^*}{u^*}e_r(y)$$

$$-\frac{x^*y^*}{(z^*)^2w^*}\cdot\frac{z^*}{u^*}e_r(z)-\frac{x^*y^*}{z^*(w^*)^2}\cdot\frac{w^*}{u^*}e_r(w)$$

$$=e_r(x)+e_r(y)-e_r(z)-e_r(w)$$

$$\because |e_r(u)|\le|e_r(x)|+|e_r(y)|+|e_r(z)|+|e_r(w)|$$

$$\le e_r(x)+e_r(y)+e_r(z)+e_r(w)$$

$$\therefore e_r(u)=e_r(x)+e_r(y)+e_r(z)+e_r(w)$$

一元函数误差估计公式的应用

$$|e_r(y)|\approx|f'(x^*)\cdot\frac{x^*}{f(x^*)}|\cdot|e_r(x)|$$

例 1.19 设函数 $y=x^{10}$ ，**问**$x=\pi=3.141592\ldots$**，取几位有效数字才能使** y **的相对误差限不超过**0.5×10^{-6} ？

解：设截取 n **位有效数字后得** $x^*\approx x$ **，则**

$$|e_r(y)|\approx\left|10(x^*)^9\cdot\frac{x^*}{y^*}\right||e_r(x)|=\left|10\cdot\frac{(x^*)^{10}}{(x^*)^{10}}\right||e_r(x)|=10|e_r(x)|\le10e_r(x)$$

$$\therefore e_r(y)\approx10e_r(x)\Rightarrow e_r(x)\approx0.1\cdot e_r(y)$$

$$\Rightarrow\frac{1}{2\times3}10^{-n+1}\le0.1\times0.5\times10^{-6}$$

$$\Rightarrow10^{-n+8}\le3$$

$$\Rightarrow n\ge8$$

几点注意事项 /* Remarks */

Chapter 1 Introduction

1. 避免相近二数相减

例：$a_1 = 0.12345$，$a_2 = 0.12346$，各有5位有效数字。

而 $a_2 - a_1 = 0.00001$，只剩下1位有效数字。

根据定理1.1，结果的绝对误差限与相对误差限均扩大。

$ **几种经验性避免方法：**

$$\sqrt{x+\varepsilon}-\sqrt{x}=\frac{\varepsilon}{\sqrt{x+\varepsilon}+\sqrt{x}}; \qquad \ln(x+\varepsilon)-\ln x=\ln\left(1+\frac{\varepsilon}{x}\right);$$

当 $|x| << 1$ 时： $1-\cos x = 2\sin^2\frac{x}{2}$;

$$e^x - 1 = x\left(1+\frac{1}{2}x+\frac{1}{6}x^2+\ldots\right)$$

HUST

2. 避免除数的绝对值远小于被除数的绝对值

Chapter 1 Introduction

$$h\left(\frac{x^*}{y^*}\right) \approx \frac{|x^*|h(y^*)+|y^*|h(x^*)}{|y^*|^2}$$，当 $|x| >> |y|$ 时，舍入误差会扩大。

例：$\frac{2.7182}{0.001} = 2718.2$ 当分母y作微小变化：0.0001，则

$$\frac{2.7182}{0.0011} = 2471.1$$

```
print(2.7182/0.001)
2718.2
print(2.7182/0.0011)
2471.090909090909
```

计算结果对y的扰动很敏感，而y通常是近似值，所以计算结果不可靠；另外，很小的数作除数有时会造成计算溢出而停机。

HUST

3. 避免大数吃小数

例：用单精度计算 $x^2 - (10^9+1)x + 10^9 = 0$ 的根。

精确解为 $x_1 = 10^9$，$x_2 = 1$

? 算法1：利用求根公式 $x = \dfrac{-b \pm \sqrt{b^2-4ac}}{2a}$

在计算机内，10^9存为0.1×10^{10}，1存为0.1×10^1。加法运算时两加数的指数先向大指数对齐，再将浮点部分相加。

则：$1 = 0.0000000001 \times 10^{10}$，取单精度时就成为：

$10^9+1=0.1000000\times 10^{10}+0.0000000 \times 10^{10}=0.1000000 \times 10^{10}$

$$\Rightarrow\ x_1 = \frac{-b+\sqrt{b^2-4ac}}{2a} = 10^9,\quad x_2 = \frac{-b-\sqrt{b^2-4ac}}{2a} = 0$$

大数吃小数

Chapter 1 Introduction

? 算法2：先解出 $x_1 = \dfrac{-b - sign(b)\cdot\sqrt{b^2-4ac}}{2a} = 10^9$

再利用 $x_1 \cdot x_2 = \dfrac{c}{a} \Rightarrow x_2 = \dfrac{c}{a \cdot x_1} = \dfrac{10^9}{10^9} = 1$

注：求和时从小到大相加，可使和的误差减小。

例：按从小到大、以及从大到小的顺序分别计算

$1 + 2 + 3 + \ldots + 40 + 10^9$

4. 简化计算步骤，减少运算次数，进而减少误差积累。

$$\text{algorithm 1}: x^{16} = \underbrace{x \cdot x \cdots x}_{16}$$

$$\text{algorithm 2}: x^{16} = (((x^2)^2)^2)^2$$

HW:
作业一@头歌

5. 选用稳定的算法，以便控制舍入误差的传播。

评价算法的准则：计算复杂性、算法的精度、算法的稳定性

小结

本章重点内容是误差分析的基本理论，包括:

1. 误差的来源
2. 绝对误差、 相对误差与有效数字
3. 计算过程中误差的传播

要求: ① 掌握截断误差与舍入误差的概念与区别

② 掌握绝对误差、 相对误差与有效数字的相互联系

③ 掌握有效数字的几种判别方法

④ 掌握算术运算的误差限估计