第一章 引论

1 内容

1. 数值分析的研究对象
2. 数值计算的误差
3. 病态问题、数值稳定性与避免误差的原则

2 参考文献

《数值计算原理》教材
《数值分析基础》、《数值分析》、《工程中的数值方法》、《现代数值分析》

3 数值分析的研究对象

函数的插值和逼近、数值积分与微分
线性代数方程组的数值解法
非线性方程组的数值解法
常微分方程的数值解法
矩阵特征值的数值解法

4 数值计算的误差

4.1 误差的来源与分类

观测误差、舍入误差、截断误差
观测误差：π
截断误差：函数泰勒展开，$f(x) \approx f(0) + f(x) + \cdots + \frac{f^n(0)}{n!}x^n$
误差：$\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1}$

4.2 误差和有效数字

定义 4.1 假设 x 是某个实数的精确值，x^* 是它的一个近似值。则称 $e = x - x^*$ 为近似值 x^* 的绝对误差或简称误差。称 $e_r = \frac{x-x^*}{x}$ 为 x^* 的相对误差，或 $e_r = \frac{x-x^*}{x^*}$。

定义 4.2 设 x 是某实数的精确值，x^* 是它的一个近似值，并且 $|x-x^*| \leq \varepsilon(x^*)$，则称 $\varepsilon(x^*)$ 是 x^* 的绝对误差界或简称误差界。称 $\frac{\epsilon(x^*)}{|x^*|}$ 为 x^* 的相对误差界，记为：

$$\varepsilon_r(x^*) = \frac{\varepsilon(x^*)}{|x^*|}$$

定义 4.3 设 x^* 是 x 的一个近似值，写成

$$x^* = \pm 10^k * 0.a_1 a_2 \ldots a_n \ldots \tag{4.1}$$

其中 $a^i \neq 0$, k 为整数。若 $|x-x^*| \leq \frac{1}{2} * 10^{k-n}$, 则称 x^* 具有 n 位有效数字。

例 4.1 对 π 的不同近似的有效位数:

用 3.14 近似 π：$\because |\pi - 3.14| \leq 0.002 < \frac{1}{2} * 10^{1-3}$

用 3.14285 近似 π：$\because |\pi - 3.14285| \ldots$ 有效数字仍是 *3* 位。

例 4.2 按四舍五入原则写出下列各数具有 *5* 位有效数字的近似数:

$187.9325 -> 187.93$ $\quad$ $0.03785551 -> 0.037856$

$8.000033 -> 8.0000$ $\quad$ $2.7182818 -> 2.7183$

定理 4.1 设 x 的近似值 x^* 有*4.1*的表达式,

(*1*) 若 x^* 有 n 位有效数字，则:

$$\frac{|x-x^*|}{|x^*|} \leq \frac{1}{2a_1} * 10^{1-n} \tag{4.2}$$

(*2*) 若 $\frac{|x-x^*|}{|x^*|} \leq \frac{1}{2a_1+1} * 10^{1-n}$，则 x^* 至少具有 n 位有效数字。

4.3 求函数值和算数运算的误差估计

$$|f(x) - f(x^*)| \leq |f^{'}(x^*)||x-x^*| + \frac{1}{2}|f^{''}(\xi)||x-x^*|^2 \tag{4.3}$$

若 $f^{'}(x^*) \neq 0$，且 $f''(\xi)$ 与 $f'(x^*)$ 相比不太大，则上式即可忽略第二项，由此可得到函数值 $f(x^*)$ 的一个近似误差界，为

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx |f^{'}(x^*)||x-x^*| \tag{4.4}$$

近似地，

$$|f(x)-f(x^*)|\leq\varepsilon(f(x^*))\approx|f^{'}(x^*)||x-x^*|\leq|f^{'}(x^*)|\varepsilon(x^*) \tag{4.5}$$

$$\varepsilon_r(f(x^*))=\frac{\varepsilon(f(x^*))}{|f(x^*)|} \tag{4.6}$$

近似的有：

$$|f(x_1,x_2,\ldots,x_n)-f(x_1^*,x_2^*,\ldots,x_n^*)|\leq\sum_{k=1}^{n}|\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\ldots,x_n^*)}{\partial x_k}||x_k-x_k^*| \tag{4.7}$$

多元函数计算的误差界为：

$$\begin{aligned}\varepsilon(f(x_1^*,x_2^*,\ldots,x_n^*))&\approx\sum_{k=1}^{n}|\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\ldots,x_n^*)}{\partial x_k}||x_k-x_k^*|\\&\leq\sum_{k=1}^{n}|\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\ldots,x_n^*)}{\partial x_k}|*\varepsilon(x_k^*)\end{aligned} \tag{4.8}$$

相对误差界

$$\varepsilon_r(f(x_1^*,x_2^*,\ldots,x_n^*))=\frac{\varepsilon(f(x_1^*,x_2^*,\ldots,x_n^*))}{|f(x_1^*,x_2^*,\ldots,x_n^*)|} \tag{4.9}$$

两个近似值的算术运算，其误差界估计：

$$\varepsilon(x_1^*\pm x_2^*)=\varepsilon(x_1^*)+\varepsilon(x_2^*) \tag{4.10}$$

$$\varepsilon_r(x_1^*\pm x_2^*)=\frac{\varepsilon(x_1^*)+\varepsilon(x_2^*)}{|x_1^*\pm x_2^*|} \tag{4.11}$$

$$\varepsilon(x_1^* * x_2^*)\approx|x_2^*|\varepsilon(x_1^*)+|x_1^*|\varepsilon(x_2^*) \tag{4.12}$$

$$\varepsilon_r(x_1^* * x_2^*)\approx\frac{\varepsilon(x_1^*)}{|x_1^*|}+\frac{\varepsilon(x_2^*)}{|x_1^*|}=\varepsilon_r(x_1^*)+\varepsilon_r(x_2^*) \tag{4.13}$$

$$\varepsilon(x_1^*/x_2^*)\approx\frac{\varepsilon(x_1^*)}{|x_2^*|}+\frac{|x_1^*|}{|x_2^*|}\varepsilon(x_2^*) \tag{4.14}$$

$$\varepsilon_r(x_1^*/x_2^*)\approx\frac{\varepsilon(x_1^*)}{|x_1^*|}+\frac{\varepsilon(x_2^*)}{|x_2^*|}=\varepsilon_r(x_1^*)+\varepsilon_r(x_2^*) \tag{4.15}$$

注：以上公式都可由构造简单二元函数利用多元函数误差界公式，做泰勒展开求得。简单证明如下：
$|f(x_1,x_2)-f(x_1^*,f_2^*)|=|x_1x_2-x_1^* * x_2^*|\leq\varepsilon(x_1^*x_2^*)$

5 病态问题、数值稳定性与避免误差的原则

5.1 病态问题与条件数

定义 5.1 设 x^* 为自变量 x 的近似值，则称
$\frac{\frac{f(x)-f(x^*)}{f(x)}}{\frac{x-x^*}{x}} \approx |\frac{xf'(x)}{f(x)}| := C(x) = Cond(f(x))$
为计算函数值问题的条件数。

5.2 数值方法的稳定性

例 5.1 计算 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}dx, n = 0, 1, 2, \ldots$
解：$\because I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 x^n - 1 = \frac{1}{n}$

$$\therefore I_n = -5I_{n-1} + \frac{1}{n}, n = 0, 1, 2, \ldots \tag{5.1}$$

显然 $I_0 = ln6 - ln5 \quad I_n^{'} = -5I_{n-1}^{'} + \frac{1}{n}$
$E_n = I_n - I_n^{'} = -t(I_{n-1} - I_{n-1}^{'}) = -5E_{n-1} = \cdots = (-5)^n E_0$ 由 *(5.1)* 可得，

$$I_{n-1} = -\frac{1}{5}I_n + \frac{1}{5n}, n = k, k-1, ..., 1 \tag{5.2}$$

$\because \frac{1}{6(k+1)} = \int_0^1 \frac{x^k}{6}dx < I_k = \int_0^1 \frac{x^k}{x+5}dx < \int_0^1 \frac{x^k}{5}dx = \frac{1}{5(k+1)}$，$I_k \approx \frac{1}{2}[\frac{1}{6(k+1)} + \frac{1}{5(k+1)}]$，取 $k = 6, I_6^{'} = 0.0262$
$\because E_k = (-5)E_{k-1} = \cdots = (-5)^m E_(k-m), m = 1, 2, \ldots, k$
$\therefore E_{k-m} = (-\frac{1}{5})^m E_k, m = 1, 2, \ldots, k$
若取 $k = 6$，则 $E_0 = (-\frac{1}{5})^6 E_6$，$\therefore |E_0| = (1/5)^6 |E_6|$

n	按 (5.1) 计算	按 (5.2) 计算	I_n 准确值（4 位）
0	0.1823	0.1823	0.1823
1	0.0885	0.0884	0.0884
2	0.0575	0.0580	0.0580
...	...	...	...
5	0.0950	0.0281	0.0285
6	-0.3083	0.0262	0.0243

定义 5.2 如果初始数据有误差，而在计算过程中误差得到控制，则称数值方法是稳定的，否则称该方法是不稳定的或称为发散的。

数值计算中应注意的若干准则:

- 应避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的运算。
- 要避免两相近数相减，如 $x = 532.65, y = 532.62$，$x - y = 0.03$
- 要防止大数“吃”小数
  如：在五位十进制计算机上计算：
  $A = 52492 + \sum_{i=1}^{1000} r_i$，$0.1 \leq r_i \leq 0.9$
  实际上，$A = 0.52492 * 10^5 + \sum_{i=1}^{1000} r_i$ 若取 $r_i = 0.4, i = 1, 2, \ldots, 1000$

  $$\begin{aligned} \therefore A &= 0.52492 * 10^5 + 0.000004 * 10^5 + \ldots \\ &= 0.52492 * 10^5 = 52492 \end{aligned}$$

  改写成，$A = \sum_{i=1}^{1000} r_i + 52492 = 0.004 * 10^5 + 0.52492 * 10^5 = 52892$
- 注意简化计算步骤如：$x^{255} = x \cdot x^2 \cdot x^4 \cdot x^8 \cdots x^{128}$