

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

$$x^* = \pm 10^k * 0.a_1a_2 \dots a_n \dots \quad (4.1)$$

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 : $\because |\pi - 3.14285| \dots$ 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 0.03785551- > 0.037856

8.000033- > 8.0000 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:

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

(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

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

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

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)||x - x^*| \quad (4.4)$$

近似地,

$$|f(x) - f(x^*)| \leq \varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)||x - x^*| \leq |f'(x^*)|\varepsilon(x^*) \quad (4.5)$$

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

近似的有:

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

多元函数计算的误差界为:

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

相对误差界

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

两个近似值的算术运算, 其误差界估计:

$$\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) = \varepsilon(x_1^*) + \varepsilon(x_2^*) \quad (4.10)$$

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

$$\varepsilon(x_1^* * x_2^*) \approx |x_2^*|\varepsilon(x_1^*) + |x_1^*|\varepsilon(x_2^*) \quad (4.12)$$

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

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

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

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:

$$|f(x_1, x_2) - f(x_1^*, x_2^*)| = |x_1 x_2 - x_1^* * x_2^*| \leq \varepsilon(x_1^* x_2^*)$$

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

$$\frac{\frac{f(x)-f(x^*)}{f(x)}}{\frac{x-x^*}{x}} \approx \left| \frac{xf'(x)}{f(x)} \right| := C(x) = \text{Cond}(f(x))$$

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 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx, n = 0, 1, 2, \dots$

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

$$\therefore I_n = -5I_{n-1} + \frac{1}{n}, n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.1)$$

显然 $I_0 = \ln 6 - \ln 5 \quad I'_n = -5I'_{n-1} + \frac{1}{n}$

$E_n = I_n - I'_n = -5(I_{n-1} - I'_{n-1}) = -5E_{n-1} = \dots = (-5)^n E_0$ 由 (5.1) 可得,

$$I_{n-1} = -\frac{1}{5}I_n + \frac{1}{5n}, n = k, k-1, \dots, 1 \quad (5.2)$$

$\because \frac{1}{6(k+1)} = \int_0^1 \frac{x^k}{6} dx < I_k = \int_0^1 \frac{x^k}{x+5} dx < \int_0^1 \frac{x^k}{5} dx = \frac{1}{5(k+1)}, I_k \approx \frac{1}{2} [\frac{1}{6(k+1)} + \frac{1}{5(k+1)}]$, 取 $k = 6, I'_6 = 0.0262$

$\because E_k = (-5)E_{k-1} = \dots = (-5)^m E_{(k-m)}, m = 1, 2, \dots, k$

$\therefore E_{k-m} = (-\frac{1}{5})^m E_k, m = 1, 2, \dots, k$

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：

$$A = 52492 + \sum_{i=1}^{1000} r_i, \quad 0.1 \leq r_i \leq 0.9$$

实际上， $A = 0.52492 * 10^5 + \sum_{i=1}^{1000} r_i$ 若取 $r_i = 0.4, i = 1, 2, \dots, 1000$

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

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： $x^{255} = x \cdot x^2 \cdot x^4 \cdot x^8 \cdot \dots \cdot x^{128}$