数值分析

任课教师：彭凯军

邮箱：kaijunpeng@hfut.edu.cn

教材 (Text Book)

数值分析（第二版）朱晓临 主编（中国科学科技大学出版社）

参考书目 (Reference)

- **数值分析** 李庆扬、王能超、易大义编著 （清华大学出版社）
- **Numerical Analysis** (Seventh Edition)
  数值分析 （第七版 影印版）
  Richard L. Burden & J. Douglas Faires （高等教育出版社）
- **Introduction to Numerical Analysis** (Second Edition)
  数值分析导论 （第二版 影印版）
  J. Stoer & R. Bulirsch （世界图书出版公司）

第一章　绪 论

第一节 引 言

数值分析概括为用计算机求解数学问题的**数值方法和理论**。

常见的数学问题:方程组求解、微分、积分、微分方程。

求解数学问题思维方法:

(1). 利用数学方法求出结果的解析表达式（又称解析解）；

(2). 采用数学理论与计算机相结合，寻求合适的算法得到问题的近似数值解。

——**数值分析**研究的主要问题。

- 通常解决数学问题的思维方式

实际问题 → 数学模型 → 解析表达式 → 结果

- 数值分析的思维方式

实际问题 → 数学模型 → 算法设计 → 编程计算结果

后者也正是利用计算机进行科学计算的过程。

第二节 误　差 /* Error */

误差：一个物理量的真实值与计算值之间的差异

§ 2.1 误差的来源和分类/* Source & Classification */

- **从实际问题中抽象出数学模型** —— **模型误差** /* Modeling Error */

  如：将未知函数取为多项式函数。

- **通过测量得到模型中参数的值** —— **观测误差** /* Measurement Error */

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

  如：Taylor展开时，阶数的不同，导致的误差。

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

例1.近似计算 $\int_0^1 e^{-x^2}\,dx$

解法之一：将 e^{-x^2} 作Taylor展开后再积分

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx=\int_0^1\left(1-x^2+\frac{x^4}{2!}-\frac{x^6}{3!}+\frac{x^8}{4!}-\cdots\right)dx=\overbrace{1-\frac{1}{3}+\frac{1}{2!}\times\frac{1}{5}-\frac{1}{3!}\times\frac{1}{7}}^{S_4}+\overbrace{\frac{1}{4!}\times\frac{1}{9}-\cdots}^{R_4}$$

取 $\int_0^1 e^{-x^2}dx\approx S_4$，则 $R_4=\frac{1}{4!}\times\frac{1}{9}-\frac{1}{5!}\times\frac{1}{11}+\cdots<\frac{1}{4!}\times\frac{1}{9}<0.005$ 称为截断误差

由截去部分
/* excluded terms */
引起

$$S_4=1-\frac{1}{3}+\frac{1}{10}-\frac{1}{42}\approx 1-0.333+0.1-0.024=0.743$$

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

由四舍五入
引起

|计算积分的总体误差| $<0.005+0.001=0.006.$

§ 2.2 误差与有效数字 /* Error and Significant Digits */

➢ 1. 绝对误差 /* absolute error */

设x为精确值，x^*为x的近似值，称$e = x - x^*$为绝对误差。

$|e|$ 的上限记为 ε，称为 x 的绝对误差限 /* accuracy */，

工程上常记为：$x = x^* \pm \varepsilon$。

注：e理论上讲是唯一确定的，可能取正，也可能取负。

$\varepsilon > 0$，但不唯一，当然ε越小越具有参考价值。

例如：$x=\int_0^1 e^{-x^2}dx$,

$$x^*=1-\frac{1}{3}+\frac{1}{2!}\times\frac{1}{5}-\frac{1}{3!}\times\frac{1}{7}\approx 0.743\text{—近似值}$$

绝对误差为:$e=x-x^*$是未知的，

绝对误差限：由例1可知，$|e|<0.005+0.001=0.006$

绝对误差限：$\varepsilon=0.006$

因此真实值$x=0.743\pm 0.006$

➢ 2. 相对误差 /* relative error */

称$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x-x^*}{x}$为$x$的相对误差，

x的相对误差上限 /* relative accuracy */ 定义为：$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|x|}$

注1：在e_r和ε_r的定义中，由于真实值x一般是未知的，因此在计算中一般取$e_r = \frac{x-x^*}{x^*}$, $\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|x^*|}$.

注2：相对误差和相对误差限一般用百分比表示.

➢3. 有效数字 /* significant digits */

有效数字： 若近似值x^*的误差限是**某一位**的半个单位，该位到x^*的**第一位非零数字**共有n位，则x^*有n位有效数字。

例如：$\pi = 3.14159265\cdots$，按四舍五入原则若取四位小数得$\pi \approx 3.1416$，取五位小数则有$\pi = 3.14159$，它们的绝对误差不超过近似值末位数的半个单位，即

$$|\pi - 3.1416| = 0.00000735\cdots \le \frac{1}{2} \times 0.0001,$$ 五位有效数字

$$|\pi - 3.14159| = 0.00000265\cdots \le \frac{1}{2} \times 0.00001$$ 六位有效数字

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

例:$\pi = 3.141592653589793 2\cdots$，$\pi^* = 3.1415$，问：$\pi^*$有几位有效数字？请证明你的结论。

证明：$\pi^* = 0.31415 \times 10^1$，

$$|\pi - \pi^*| = 0.0000926\cdots < 0.0005 = 0.5 \times 10^{-3} = 0.5 \times 10^{1-4}$$

所以π^*有4位有效数字，精确到小数点后第3位。

例：$x = 20.03173$，x^*分别如下，判定各有几位有效数字。

20.03　　　　20.031　　　　20.032

解：转化为浮点数(科学计算法) $x = 0.2003173 \times 10^2$,

$x_1^* = 0.2003 \times 10^2$,　　$x_2^* = 0.20031 \times 10^2$,　　$x_3^* = 0.20032 \times 10^2$

$$|x - x_1^*| = 0.00173 = 0.173 \times 10^{-2} < 0.5 \times 10^{-2} = 0.5 \times 10^{2-4}$$

$$|x - x_2^*| = 0.00073 = 0.073 \times 10^{-2} < 0.5 \times 10^{-2} = 0.5 \times 10^{2-4}$$

$$|x - x_3^*| = 0.00027 = 0.27 \times 10^{-3} < 0.5 \times 10^{-3} = 0.5 \times 10^{2-5}$$

所以x_1^*的有效数字为4位，x_2^*的有效数字为4位，x_3^*的有效数字为5位.

➤4 有效数字与相对误差的关系

☞ **有效数字** ⇒ **相对误差限**

已知$x = 0.a_1a_2\cdots \times 10^m$的近似值$x^*$有$n$位有效数字，

则其相对误差限为： $\varepsilon_r \le \dfrac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$.

证明：$\varepsilon_r = \left|\dfrac{\varepsilon}{x^*}\right| = \dfrac{0.5\times 10^{m-n}}{0.a_1a_2\cdots\times 10^m} = \dfrac{10^{-n}}{2\times 0.a_1a_2\cdots} \le \dfrac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$

P22. EX6(1). 设x^*的有效数字为5位，则相对误差限为多少？

解：由上式可知$\varepsilon_r \le \dfrac{1}{2a_1} \times 10^{-5+1} < \dfrac{1}{2} \times 10^{-4} = 0.00005 = 0.005\%$.

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 $n > 6 \quad \lg 6$，即 $n \ge 6$，

应取6位有效数字，所以四舍五入得 $\pi^* = 3.14159$。

☞ 相对误差限 ⇒ 有效数字

已知x^*的相对误差限可以写成$\varepsilon_r = \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1}$，则

x^* 至少有 n 位有效数字。

证明：$|x - x^*| \le \varepsilon_r \cdot |x^*| = \frac{10^{-n+1}}{2(a_1+1)} \times 0.a_1a_2\cdots \times 10^m$

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

注1. 若存在n使得$\frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1} < \varepsilon_r < \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+2}$，则$x^*$有$n$位有效数字

例：为使π^*的相对误差小于0.001%,至少应取几位有效数字？

解二：因为$a_1 = 3$，π^*的相对误差上限ε_r满足

$$\frac{1}{2(3+1)} \times 10^{-6+1} < \varepsilon_r = 10^{-5} < \frac{1}{2\,(3+1)} \times 10^{-6+2}$$

所以π^* 至少取6位有效数字，四舍五入得 $\pi^* = 3.14159$。

P8. 例2 设$\sqrt{50}$的近似值x^*的相对误差小于0.01%,则有效数字至少几位？

解三：因为$\sqrt{50} = 0.7\cdots \times 10^1$，$x^*$的相对误差上限满足

$$\frac{1}{2(7+1)} \times 10^{-4+1} = 0.625 \times 10^{-4} < \varepsilon_r = 10^{-4} < 0.625 \times 10^{-3}$$

所以x^* 至少取4位有效数字，四舍五入得 $x^* = 7.071$。

➢5. 数值计算中的基本原则

(1) 避免绝对值小的数做除数；

(2) 避免两相近数相减；

(3) 防止大数“吃”小数现象；

例如：$a = 109$，$b = 9$，设想在8位浮点数系统中相加

$$a + b = 1.0000000 \times 109 + 0.000000009 \times 109$$

由于只保留8位有效数，数据09被舍去，实际加法操作 $a + b$计算结果是 将a的数据作为计算结果赋值给 $a + b$.

(4)尽量减少计算工作量(乘、除法次数) ——秦九韶算法

例 计算 $P(x) = 1 + 2x + 3x^2 + 4x^3 + 5x^4$ 的值时采用

$$P(x) = 1 + x(2 + x(3 + x(4 + 5x)))$$

复杂度：前者乘法10次，加法4次；后者乘法4次，加法4次

例：一个应用： 2进制数转换为10进制数

$$(1\,1\,1\,0\,1\,1\,1\,0)_2 = 2^7 + 26 + 25 + 0 + 23 + 22 + 2 + 0$$

$$= ((((((1 \cdot 2 + 1)2 + 1)2 + 0)2 + 1)2 + 1)2 + 1)2 + 0 = 238$$

复杂度：前者乘法18次，加法7次；后者：乘法7次，加法7次

(5)保持算法的稳定性

初值误差在算法执行过程中不断增大，这种算法称为数值不稳定算法。

初始误差在算法执行过程中不断减小，这种算法称为数值稳定算法。

在算法执行过程中，舍入误差对计算结果影响不大的一类算法被称为数值稳定算法；否则称为不稳定算法.