数值分析

注意事项

1. 尽快进入QQ群 群号见黑板. 进群后先阅读群公告, 尽快实名(姓名在前, 学号在后). 以后很多通知和文件需通过QQ群传达。实名后可直接QQ私聊教师咨询问题, 不必加好友(反而不好识别).

2. 一些建议

(1) 关于教材(图片见下页).

上课是“交接”知识点的过程

(2) 关于每节课: 必参与, 必须深入领会有关基本概念, 否则...

(3) 关于线性代数和微积分的知识: **必要**.

(4) 关于习题. 鼓励多想、多问.
- 原创型问题: 优先解答
- 转发型问题: 启发式解答

习题是检查消化知识程度的视力表. “背”答案无意义.

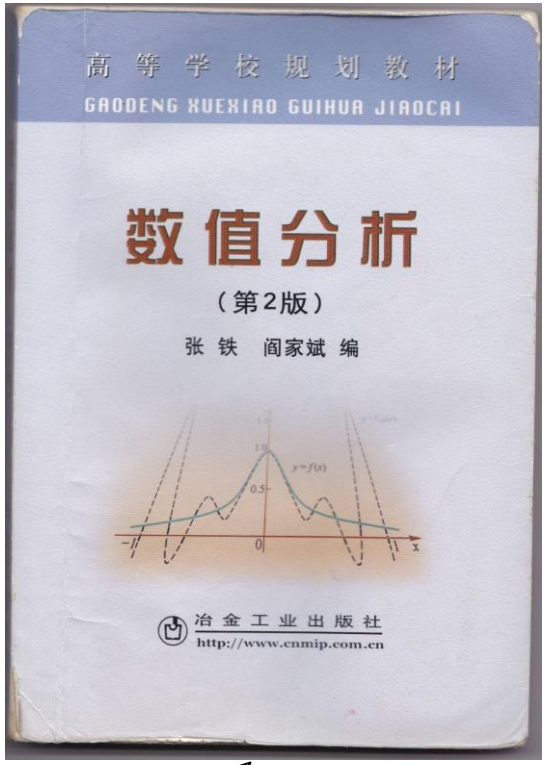
自己思考 VS 参考资料或AI (警惕某些“伪”答案)

“习题驱动”与“定义驱动”相结合.

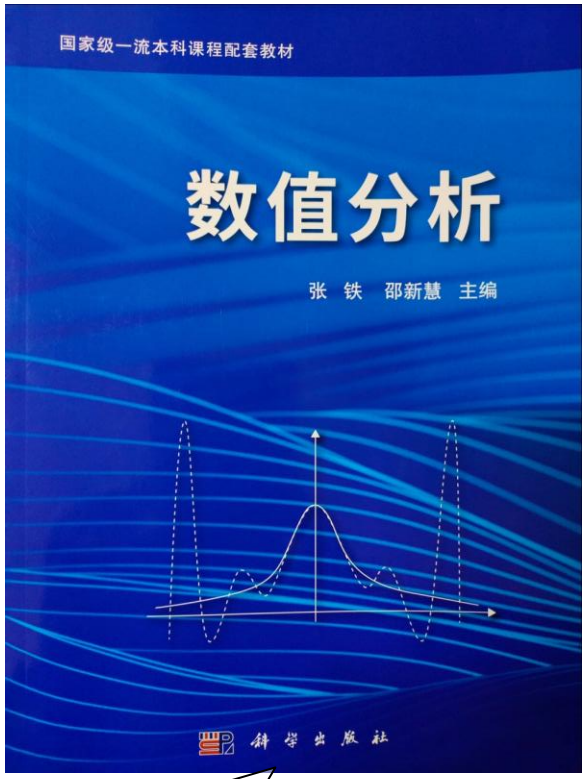
(5) 关于考前复习(期末不押题、不划重点、“题型”).

3. 网上学习平台以及所占比例: 详见另一文件(以后会发).

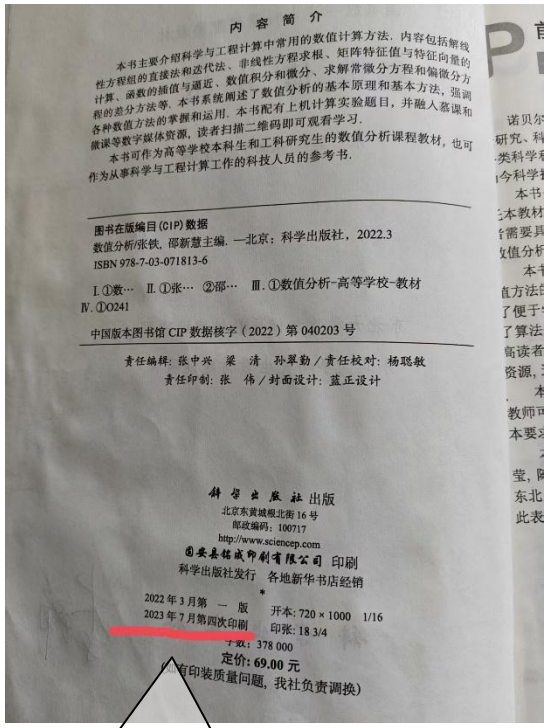
教材



曾用教材



现在的教材



建议最好选2023年7月第四次（或之后）印刷的版本

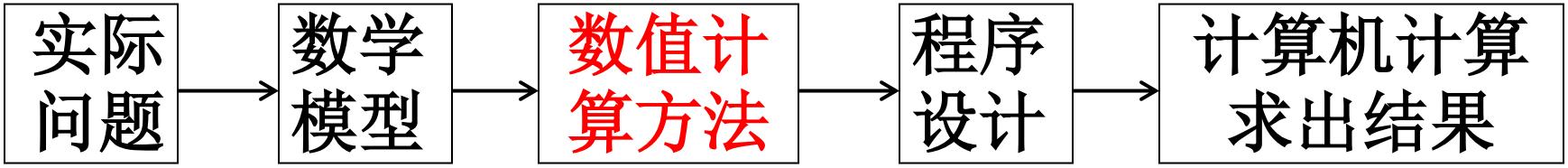
返回到注意事项

第1章 绪 论

§1 数值分析研究的对象和内容

数值分析研究科学计算中各种数学问题求解的数值计算方法.

用计算机进行科学计算解决实际问题的过程如下:



对数学模型建立数值计算方法，并对方法进行理论分析，直到编程上机计算出结果，以及对结果的分析，这就是数值分析研究的对象和任务.

如何评价不同算法的好坏呢？

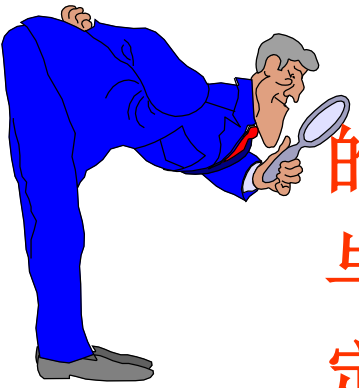
一个好的算法应具有如下特点：

(1) 结构简单, 易于计算机实现;

(2) 理论上要保证方法的收敛性和数值稳定性;

(3) 计算效率高: 计算速度快, 节省存储量;

(4) 经过数值实验检验, 证明行之有效.



我们在学习的过程中，要注意掌握数值方法的基本原理和思想，要注意方法处理的技巧及其与计算机的结合，要重视误差分析、收敛性和稳定性的基本理论.

随着计算机的飞速发展，数值分析方法已深入到计算物理、计算力学、计算化学、计算生物学、计算经济学等各个领域. 本课程仅限介绍最常用的数学模型的最基本的数值分析方法.

§2 误差的来源和分类

误差是描述数值计算之中近似值的精确程度，在数值计算中十分重要．误差按来源可分为模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差四种.

1. 模型误差. 数学模型通常是由实际问题抽象得到的，一般带有误差. 这种误差称为**模型误差**.

2. 观测误差. 数学模型中包含的一些物理参数通常是通过观测和实验得到的，难免带有误差，这种误差称为**观测误差.**

3. 截断误差. 求解数学模型所用的数值方法通常是一种近似方法. 这种因方法产生的误差称为**截断误差或方法误差.**

例如, 采用Taylor公式, 函数e^x可表示为

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

实际计算时只能截取有限项代数和计算, 如取：

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

那么此公式的截断误差为:

$$\mathrm{R} = e^x - S_n = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!}e^{\theta x}, \ 0 < \theta < 1.$$

另例: 计算函数ln(*x*+1)的Taylor公式为

$$\ln(x+1)=x-\frac{x^2}{2}+\frac{x^3}{3}-\frac{x^4}{4}+\cdots+(-1)^{n+1}\frac{x^n}{n}+\cdots$$

实际计算(例如计算ln(2))时只能截取有限项代数和计算, 如取前5项有：

$$\ln(2)\approx S_5=1-\frac{1}{2}+\frac{1}{3}-\frac{1}{4}+\frac{1}{5}$$

这里产生误差(记作R_5)

$$R_5=\ln(2)-S_5=-\frac{1}{6}+\frac{1}{7}-\frac{1}{8}+\frac{1}{9}-\frac{1}{10}+\cdots$$

4. 舍入误差. 由于计算机的字长有限, 参加运算的数据以及运算结果在计算机上存放时, 计算机会按舍入原则舍去每个数据在字长之外的数字, 从而产生误差, 这种误差称为**舍入误差**或**计算误差**.

例如, 在十进制十位的限制下, 会出现

$$(1.000002)^2-1.000004=0.$$

这个结果是不准确的. 准确的结果应为4×10^{-12}. 这里产生的误差就是计算舍入误差.

在数值分析中, 我们总假定数学模型是准确的, 因而不考虑**模型误差**和**观测误差**, 主要研究**截断误差**和**舍入误差**对计算结果的影响.

§3 绝对误差、相对误差和有效数字

设x是精确值x^*的一个近似值, 记

$$e=x^*-x.$$

称e为近似值x的**绝对误差**, 简称**误差**. 如果ε满足

$$|e|\le\varepsilon,$$

则称ε为近似值x的**绝对误差限**, 简称**误差限**.

精确值x^* 、近似值x和误差限ε之间满足:

$$x-\varepsilon\le x^*\le x+\varepsilon.$$

通常记为

$$x^*=x\pm\varepsilon.$$

绝对误差有时并不能很好地反映近似程度的好坏, 如

$$x^*=10,\ \varepsilon_x=1;\ y^*=10000,\ \varepsilon_y=5.$$

虽然ε_y是ε_x的5倍, 但“10000差5”显然比“10差1”好.

记

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

称e_r为近似值x的**相对误差**.

由于x^*未知, 实际使用时总是将x的相对误差取为

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

$\varepsilon_r = \varepsilon/|x|$称为近似值$x$的**相对误差限**. 显然有: $|e_r| \le \varepsilon_r$.

例1 设$x=2.18$是由精确值x^*经过四舍五入得到的近似值. 求x的绝对误差限和相对误差限.

解: 由已知条件可得$x^* = x \pm 0.005$. 所以, 绝对误差限为$\varepsilon = 0.005$. 相对误差限为:

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|x|} = \frac{0.005}{2.18} \approx 0.0023$$

一般地, 凡是由精确值经过四舍五入得到的近似值, 其绝对误差限等于该近似值末位的半个单位.

定义1 设数x是数x^*的近似值. 如果x的绝对误差限是它的某一数位的半个单位, 并且从x左起第一个非零数字到该数位共有n位, 则称这n个数字为x的**有效数字**, 也称用x近似x^*时**具有n位有效数字**.

例2 已知下列近似值的绝对误差限都是0.005, 问它们分别具有几位有效数字? a=10.075, b=-0.10, c=0.1, d=0.0032.

解 由于0.005是小数点后第2数位的半个单位, 所以

a有4位有效数字1、0、0、7;

b有2位有效数字1、0;　　c有1位有效数字1;

d没有有效数字.

数x总可以写成如下形式

$$x=\pm 0.a_1a_2\ldots a_k\times 10^m,$$

其中m是整数, a_i是0到9中的一个数字, (一般情况下) $a_1\neq 0$.

x(作为x^*的近似值), 具有(至少)n位($n\leq k$)有效数字当且仅当

$$|x^*-x|\leq 0.5\times 10^{m-n}.$$

以上可作为有效数字位数的“第二定义”. 请思考原因.

由此可见, 近似值的有效数字越多, 其绝对误差越小.

注1: 精确值的有效数字可认为有无限多位.

注2: 数1.14001的两个近似值

$$a=1.14,\ b=1.1400$$

是有区别的. a有3位有效数字, b有5位有效数字.

例3 为了使$x^*=\sqrt{2}$ 的近似值的绝对误差小于10^{-5}, 问(至少)应取几位有效数字?

解: 由于$\sqrt{2}$ =1.4142135…, 近似值x可写为

$$x=\pm 0.a_1a_2\ldots a_k\times 10,\ a_1=1\neq 0.$$

$$令\left|\sqrt{2}-x\right|\leq\tfrac{1}{2}\times 10^{1-n}\leq 10^{-5}$$

可得$n=6$(为最小整数解). 故(至少)取6位有效数字. 此时$x=1.41421$.

注: 事实上, 此题也可以直接根据有效数字的定义数出相应的位数.

补充: 两个命题(有效数字与相对误差的关系)

当数x写成形式 $x=\pm 0.a_1a_2\ldots a_k\times 10^m$, 其中$m$是整数, a_i是0到9中的一个数字, $a_1\neq 0$. 以下结论成立.

(1) 若x有n位有效数字, 则其相对误差限ε_r必满足以下条件:

$$\varepsilon_r \leq \frac{1}{2a_1}\times 10^{-n+1}.$$

(2) 若x的相对误差限ε_r满足以下关系

$$\varepsilon_r \leq \frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-n+1},$$

则x至少有n位有效数字.

(留作思考题. 许多文献有此内容, 但建议自己想明白)

§4 数值计算中的若干原则

为了减少舍入误差的影响，设计算法时应遵循如下的一些原则.

1. 避免两个相近的数相减

如果x^*, y^* 的近似值分别为x, y, 则$z=x-y$是$z^*=x^*-y^*$的近似值. 此时, 相对误差满足估计式

$$|e_r(z)|=\left|\frac{z^*-z}{z}\right|\le\left|\frac{x}{x-y}\right||e_r(x)|+\left|\frac{y}{x-y}\right||e_r(y)|$$

可见, 当x与y很接近时, z的相对误差有可能很大.

在数值计算中, 如果遇到两个相近的数相减运算, 可考虑改变一下算法以避免两数相减. 例如:

$$\text{当}x_1\approx x_2\text{时,有}\log x_1-\log x_2=\log\frac{x_1}{x_2}$$

当$x \approx 0$时，有$1-\cos x = 2\sin^2 \frac{x}{2}$

当$x >> 1$时，有$\sqrt{x+1}-\sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$

例4 求方程$x^2-64x+1=0$的两个根, 使它们至少具有四位有效数字. 要求须利用信息: $\sqrt{1023} \approx 31.984$

解: 由求根公式有

$$x_1 = 32 + \sqrt{1023} \approx 63.984.$$

若直接根据求根公式计算另一根, 则有

$$x_2 = 32 - \sqrt{1023} \approx 0.016,$$

这样做的计算结果只有2位有效数字.

而如果由根与系数的关系, 可得$x_2=1/x_1 \approx 0.01563$. 则有4位有效数字 .

对两个相近的数相减, 若找不到适当方法代替, 可以在计算机上采用双倍字长计算, 以提高精度.

2. (在做加法或减法时) 防止大数“吃掉”小数

目前的计算机上只能采用有限位数计算. 若参加运算的数量级差很大, 在它们的加、减运算中, 绝对值很小的数往往被绝对值较大的数“吃掉”, 造成计算结果失真.

例如, 用八位十进制浮点计算

$$A=63281312+0.2+0.4+0.4.$$

按照加法浮点运算的对阶(对大阶)规则, 应有

$$A=0.63281312\times10^{8}+0.000000002\times10^{8}$$
$$+0.000000004\times10^{8}+0.000000004\times10^{8}$$

由于计算机只能存放八位十进制数, 上式后三个数在计算机上变成”机器零”, 计算结果为

$$A=0.63281312\times10^{8}=63281312.$$

若改变计算顺序, 先将三个小数相加得到数字1, 再进行加法运算, 就会(可能)避免上述现象, 此时

$$A=0.00000001\times10^{8}+0.63281312\times10^{8}=63281313.$$

3. 绝对值太小的数不宜作除数

由于除数很小, 将导致商很大, 有可能出现“溢出”现象.

另外, 设x^*, y^* 的近似值分别为x, y, 则$z=x/y$是$z^*=x^*/y^*$的近似值. 此时, z的绝对误差满足估计式

$$|e(z)| = |z^* - z| = \left|\frac{(x^* - x)y + x(y - y^*)}{yy^*}\right| \approx \frac{|y||e(x)| + |x||e(y)|}{y^2}$$

可见, 若除数太小, 则可能导致商的绝对误差很大.

4. 注意简化计算程序, 减少计算次数

若算法计算量太大, 可能会造成实际计算无法完成. 另外, 即使是可行算法, 计算量越大积累的误差也会越大. 因此, 算法的计算量越小越好.

例如, 对于n次多项式

$$p_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \ldots + a_1 x + a_0$$

若直接逐项计算, 大约需要乘法运算次数为

$$n + (n-1) + \ldots + 2 + 1 = \frac{n(n+1)}{2} \text{次}$$

若将上述多项式改写为:

$$p_n(x) = (\ldots((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \ldots)x + a_0$$

则只需n次乘法和n次加法运算.

另例:

用Cramer法则求n元线性方程组$\boldsymbol{Ax=b}$的解,需要计算n+1个n阶行列式, 而每个n阶行列式按定义:

$$\mathrm{D}=\sum_{p_1p_2\cdots p_n}(-1)^{\tau(p_1p_2\cdots p_n)}a_{1,p_1}a_{2,p_2}\cdots a_{n,p_n}$$

要计算$(n-1)n!$次乘法, 则Cramer法则至少需要$(n+1)(n-1)n!=(n^2-1)n!$ 次乘法.

当n=20时, $(n^2-1)n!\approx 9.7\times 10^{20}$. 如果用每秒钟计算1百万次乘除运算的计算机, 约需要:

$9.7\times 10^{20}\div 10^6\div 60\div 60\div 24\div 365\approx$3000万年

5. 选用数值稳定性好的算法

一种数值算法，如果其计算舍入误差积累是可控制的，则称其为**数值稳定的**，反之称为**数值不稳定的**. 例如积分

$$I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx$$

利用分部积分法可得计算I_n的递推公式

$$I_n = 1 - nI_{n-1},\ n = 1, 2, \ldots$$

由于$n=0$时

$$I_0 = \int_0^1 e^{x-1} dx = 1 - e^{-1} = 0.632120558.....$$

取I_0具有四位有效数字的近似值$I_0 \approx 0.6321$，递推可得:

I_0	0.6321	I_1	0.3679	I_2	0.2642	I_3	0.2074	I_4	0.1704
I_5	0.1480	I_6	0.1120	I_7	0.2160	I_8	-0.7280	I_9	7.5520

以上计算结果显然是错误的. 这是因为: 对任何n都应有$I_n > 0$, 但计算结果显示$I_8 < 0$. (此外还有其他明显的错误)

可见，虽然I_0的近似误差不超过0.5×10^{-4}，但随着计算步数的增加,误差明显增大. 这说明这里的递推公式是数值不稳定的.

(误差分析) 事实上, 由于

$$I_n=1-nI_{n-1},\ 和\ I^*_n=1-nI^*_{n-1},\ n=1,2,\ldots$$

可得

$$I_n-I^*_n=-n(I_{n-1}-I^*_{n-1})=\ldots=(-1)^n n!(I_0-I^*_0).$$

可见, 随着计算步数的增加, 误差迅速放大, 致使结果失真.

(解决方案)若将计算公式改写为:

$$I_{n-1}=\frac{1}{n}(1-I_n),\quad n=k,k-1,\ldots2,1$$

也就是说, “倒” 序计算.

(新算法的误差分析) 可得

$$I_k - I_k^* = (-1)^{n-k}\frac{k!}{n!}(I_n - I_n^*), \quad k = n, n-1, \ldots, 1, 0$$

可见, 此时误差I_k-I^*_k是可控制的, 算法是数值稳定的.

注意此时初始步骤$n\neq 0$, 但初值I_n不难选取. 例如, 当n=9时, 由于

$$\frac{e^{-1}}{10} = \int_0^1 x^9 e^{-1} dx \le I_9 \le \int_0^1 x^9 dx \le \frac{1}{10}$$

取近似值$I_9 \approx \frac{1}{2}(\frac{e^{-1}}{10} + \frac{1}{10}) = 0.0684$, 根据新算法递推可得:

I_9	0.0684	I_8	0.1121	I_7	0.1455	I_6	0.2073	I_5	0.3679
I_4	0.1035	I_3	0.1268	I_2	0.1709	I_1	0.2642	I_0	0.6321

可见, 此时I_0已精确到小数点后四位.

本章内容完