数 值 分 析

(NUMERICAL ANALYSIS)

东南大学数学学院
计算数学系
2019 年 6 月

目 录

参考资料

1. 孙志忠, 袁慰平, 闻振初. 数值分析 (第 3 版). 东南大学出版社, 2011.
2. Rainer Kress. Numerical Analysis. Springer-Verlag, 世界图书出版公司, 2003.
3. David Kincaid, Ward Cheney. 数值分析. 机械工业出版社, 2003.
4. 李庆扬, 王能超, 易大义. 数值分析 (第 5 版). 清华大学出版社, 2008.
5. 曹婉容, 杜睿, 吴宏伟, 孙志忠. 数值分析试题解析. 东南大学出版社, 2017.

上机习题

以下上机题**至少选做 5 题**, 在考试前交上机报告（包括程序和结果）.

- **习题 1** p.20. 17
- **习题 2** p.56. 20
- **习题 3** p.126-127. 39, 40
- **习题 4** p.195. 37
- **习题 5** p.256. 23
- **习题 6** p.307. 23
- **习题 7** p.346. 10

考核方式

平时作业 10%, 上机编程 10%, 期末考试 80%.

第 1 章 绪 论

本章主要内容

(1) 误差的概念

绝对误差 (限)、相对误差 (限)、有效数字及它们之间的关系

(2) 数据误差对函数值的影响

讨论函数的误差与自变量误差之间的关系

(3) 算法的数值稳定性

讨论初始数据的误差对计算结果的影响

(4) 实际计算中应注意的一些问题

1 误差的基本概念

1.1 绝对误差

定义 1.1 设 x^* 为准确值, x 是 x^* 的一个近似值. 记

$$e(x) = x^* - x,$$

称 $e(x)$ 为近似值 x 的**绝对误差**.

在实际计算中, 绝对误差一般无法求出 (因为精确值 x^* 未知). 绝大多数情况下, 只需知道误差的一个范围. 如果 $\exists\, \varepsilon > 0$, 使得

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

则 ε 称为近似值 x 的**绝对误差限**, 有时也可以表示成 $x^* = x \pm \varepsilon$.

1.2 相对误差

定义 1.2 设 x^* 为准确值, x 是 x^* 的一个近似值. 记

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

则称 $e_r(x)$ 为近似值 x 的**相对误差**.

由于精确值 x^* 难以求得, 通常以

$$\bar{e}_r(x) = \frac{x^* - x}{x}$$

作为 x 的相对误差.

如果 $\exists\, \varepsilon_r > 0$, 使得

$$|e_r(x)| \le \varepsilon_r \qquad \text{或} \qquad |\bar{e}_r(x)| \le \varepsilon_r,$$

则 ε_r 称为 x 的**相对误差限**.

1.3 有效数

定义 1.3 如果近似值 x 的绝对误差限是其某一位的半个单位, 且该位直到 x 的第一位非零数字之间共有 n 位, 则称 x 具有 $\boldsymbol{n}$ **位有效数字**, 用这 n 位有效数字表示的近似值称为**有效数**.

设近似值

$$x = \pm \overbrace{a_k a_{k-1} \cdots a_1 a_0 . b_1 b_2 \cdots b_t}^{n=k+1+t} \cdots, \quad a_k \neq 0,$$

如果

$$|e(x)| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-t},$$

则近似值 x 具有 n 位有效数.

如 π 的近似值取 $x_1 = 3.14$, 则

$$|\pi - x_1| = 0.00159\cdots < 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2},$$

所以 x_1 有 3 位有效数字; 如取 $x_2 = 3.1416$, 则

$$|\pi - x_2| < 0.00005 = \frac{1}{2} \times 10^{-4},$$

所以 x_2 有 5 位有效数字; 如取 $x_3 = 3.1415$, 则

$$|\pi - x_3| = 0.00009\cdots < 0.0005 = \frac{1}{2} \times 10^{-3},$$

所以 x_3 只有 4 位有效数字.

2 数据误差对函数值的影响

设x_1^*, x_2^* 为准确值, $y^* = f(x_1^*, x_2^*)$, x_1, x_2 为对应的近似值, $y = f(x_1, x_2)$. 由 二元函数 Taylor 展开 得

$$\begin{aligned} e(y) &= y^* - y = f(x_1^*, x_2^*) - f(x_1, x_2) \\ &\approx \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1}(x_1^* - x_1) + \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2}(x_2^* - x_2), \end{aligned}$$

即

$$e(y) \approx \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} e(x_1) + \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} e(x_2). \tag{2.1}$$

从而可以得到

$$\begin{aligned} e_r(y) = \frac{e(y)}{y} &\approx \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} \frac{x_1}{f(x_1, x_2)} e_r(x_1) \\ &+ \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} \frac{x_2}{f(x_1, x_2)} e_r(x_2). \end{aligned} \tag{2.2}$$

简化为一元函数的情况, 即设 x^* 为准确值, $y^* = f(x^*)$, x 为对应的近似值, $y = f(x)$. 由 函数 Taylor 展开式得

$$\begin{aligned} e(y) &= y^* - y = f(x^*) - f(x) \\ &\approx f'(x)(x^* - x) = f'(x)e(x), \end{aligned}$$

即

$$e(y) \approx f'(x)e(x) \tag{2.3}$$

从而可以得到

$$e_r(y) = \frac{e(y)}{y} \quad \approx \frac{xf'(x)}{f(x)} e_r(x). \tag{2.4}$$

利用 (2.1) 和 (2.2) 可以得到

$$e(x_1 + x_2) = e(x_1) + e(x_2), \tag{2.5}$$

$$e(x_1 - x_2) = e(x_1) - e(x_2), \tag{2.6}$$

$$e(x_1 x_2) \approx x_2 e(x_1) + x_1 e(x_2), \tag{2.7}$$

$$e\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \frac{1}{x_2} e(x_1) - \frac{x_1}{x_2^2} e(x_2), \tag{2.8}$$

$$e_r(x_1 + x_2) \approx \frac{x_1}{x_1 + x_2} e_r(x_1) + \frac{x_2}{x_1 + x_2} e_r(x_2), \tag{2.9}$$

$$e_r(x_1 - x_2) \approx \frac{x_1}{x_1 - x_2} e_r(x_1) - \frac{x_2}{x_1 - x_2} e_r(x_2), \tag{2.10}$$

$$e_r(x_1 x_2) \approx e_r(x_1) + e_r(x_2), \tag{2.11}$$

$$e_r\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx e_r(x_1) - e_r(x_2). \tag{2.12}$$

例 2.1 设 $x = 0.1230$, $y = 1.234$ 均为有效数字, 试分析 $(x-y)$ 和 $x^2\cos(y)$ 的绝对误差限、相对误差限和有效数字.

解 由条件得

$$|e(x)| \leq \frac{1}{2}\times 10^{-4}, \quad |e(y)| \leq \frac{1}{2}\times 10^{-3},$$

因此

$$|e(x-y)| = |e(x)-e(y)| \leq |e(x)|+|e(y)| \leq 0.55\times 10^{-3},$$

$$|e_r(x-y)| = \left|\frac{e(x-y)}{x-y}\right| \leq \left|\frac{0.55\times 10^{-3}}{0.123-1.234}\right| = 0.4950\times 10^{-3}.$$

又因为

$$|e(x-y)| \leq 0.55\times 10^{-3} < \frac{1}{2}\times 10^{-2}, \quad x-y=-1.111,$$

所以 $(x-y)$ 具有 3 位有效数字.

$$\begin{aligned}|e(x^2\cos y)| &\approx |2x\cos y e(x) - x^2\sin y e(y)| \\ &\leq 2x|\cos y||e(x)| + x^2|\sin y||e(y)| \leq 0.1120\times 10^{-4},\end{aligned}$$

$$e_r(x^2\cos y)| = \left|\frac{e(x^2\cos y)}{x^2\cos y}\right| \leq 0.2240 \times 10^{-2},$$

又由于

$$|e(x^2\cos y)| < \frac{1}{2} \times 10^{-4}, \quad x^2\cos y = 0.0049996,$$

因此 $x^2\cos y$ 具有 2 位有效数字.

例 2.2 设 $x_1^* = \sqrt{2001}$, $x_2^* = \sqrt{1999}$, $x_1 = 44.7325$, $x_2 = 44.7102$, 已知 x_1, x_2 分别是 x_1^*, x_2^* 的具有 6 位有效数字的近似值. 计算 $\sqrt{2001} - \sqrt{1999}$, 现有下面两种算法:

$$(1)\ \ x_1^* - x_2^* \approx x_1 - x_2 = 44.7325 - 44.7102 = 0.0223.$$

$$\begin{aligned}(2)\ \ x_1^* - x_2^* &= \frac{2}{x_1^* + x_2^*} \approx \frac{2}{x_1 + x_2} = \frac{2}{44.7325 + 44.7102} \\ &= 0.0223606845\cdots.\end{aligned}$$

试分析上述两种算法所得结果的有效数字.

解 由条件得

$$|e(x_1)| \le \frac{1}{2} \times 10^{-4}, \quad |e(x_2)| \le \frac{1}{2} \times 10^{-4}.$$

$$\begin{aligned}|e(x_1 - x_2)| &= |e(x_1) - e(x_2)| \le |e(x_1)| + |e(x_2)| \\ &\le \frac{1}{2} \times 10^{-4} + \frac{1}{2} \times 10^{-4} = 10^{-4} < \frac{1}{2} \times 10^{-3}.\end{aligned}$$

因此方法 (1) 所得结果至少具有 2 位有效数.

$$
\begin{aligned}
\left|e\left(\frac{2}{x_1+x_2}\right)\right| &\approx \left|-\frac{2}{(x_1+x_2)^2}e(x_1+x_2)\right| \\
&\approx \left|-\frac{2}{(x_1+x_2)^2}[e(x_1)+e(x_2)]\right| \\
&\le \frac{2}{(x_1+x_2)^2}[|e(x_1)|+|e(x_2)|] \\
&\le \frac{2}{(44.7325+44.7102)^2}\left(\frac{1}{2}\times 10^{-4}+\frac{1}{2}\times 10^{-4}\right) \\
&= 0.25\times 10^{-7} < \frac{1}{2}\times 10^{-7}
\end{aligned}
$$

按方法 (2) 得到的结果至少具有 6 位有效数字.

3 机器数系

(1) 数的浮点表示:$x = \pm(0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n)\beta^p$;
其中 $0 \le \alpha_i < \beta - 1\ (1 \le i \le n), L \le p \le U$.

(2) 机器中的数集是有限的:

$$F(\beta, n, L, U) = \{0\} \bigcup \left\{ x \,\middle|\, \begin{array}{l} x = \pm(0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n)\beta^p, 1 \le \alpha_1 \le \beta - 1, \\ 0 \le \alpha_i \le \beta - 1, i = 2, 3, \cdots, n, L \le p \le U \end{array} \right\}$$

(3) 实数 $x \xrightarrow{\text{舍入误差}} fl(x)$(机器数).

4 算法的数值稳定性

4.1 数值稳定性

定义 4.1 对于某一种算法, 如果初始数据很有小的误差仅使最终结果产生较小的误差, 则称该算法是**(数值)稳定**的, 否则称为**(数值)不稳定**的.

例 4.1 建立计算积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx, \qquad n = 0, 1, 2, \cdots, 10 \tag{4.1}$$

的递推公式, 并研究其误差传播.

解

$$\begin{aligned} I_n &= \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1} - 5x^{n-1}}{x+5} dx \\ &= \int_0^1 x^{n-1} dx - 5 \int_0^1 \frac{x^{n-1}}{x+5} dx \\ &= \frac{1}{n} - 5 I_{n-1}, \qquad (n = 1, 2, \cdots, 10.) \end{aligned}$$

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5}dx = \ln(6/5).$$

从而得到计算 I_n 的递推关系

$$\begin{cases} I_n = \dfrac{1}{n} - 5I_{n-1}, \qquad n = 1, 2, \cdots, 10, & (4.2) \\ I_0 = \ln(6/5). & (4.3) \end{cases}$$

计算时, 取 I_0 具有 6 位有效数的近似值 $\tilde{I}_0 = 0.182322$, 设 $\tilde{I}_i$ 表示 I_i 的近似值, 则实际计算公式为

$$\begin{cases} \tilde{I}_n = \dfrac{1}{n} - 5\tilde{I}_{n-1}, \qquad n = 1, 2, \cdots, 10, & (4.4) \\ \tilde{I}_0 = 0.182322. & (4.5) \end{cases}$$

由上式计算可得到下列结果

$$\tilde{I}_1 = 1 - 5\tilde{I}_0 = 0.0883900, \qquad \tilde{I}_2 = \frac{1}{2} - 5\tilde{I}_1 = 0.0580500,$$

$$\tilde{I}_3 = \frac{1}{3} - 5\tilde{I}_2 = 0.0430833, \qquad \tilde{I}_4 = \frac{1}{4} - 5\tilde{I}_3 = 0.0345835,$$

$$\tilde{I}_5 = \frac{1}{5} - 5\tilde{I}_4 = 0.0270825, \qquad \tilde{I}_6 = \frac{1}{6} - 5\tilde{I}_6 = 0.0312542,$$
$$\tilde{I}_7 = \frac{1}{7} - 5\tilde{I}_6 = -0.0134139, \qquad \tilde{I}_8 = \frac{1}{8} - 5\tilde{I}_7 = 0.192070,$$
$$\tilde{I}_9 = \frac{1}{9} - 5\tilde{I}_8 = -0.849239, \qquad \tilde{I}_{10} = \frac{1}{10} - 5\tilde{I}_9 = 4.34620.$$

由于 $I_n > 0$ 且单调减, 显然计算有误差. 事实上, 记 $e_n = I_n - \tilde{I}_n$ $(n = 0, 1, 2, \cdots, 10)$, 则

$$I_n - \tilde{I}_n = (-5)(I_{n-1} - \tilde{I}_{n-1})$$

即

$$|e_n| = 5|e_{n-1}| = 5^n|e_0|.$$

用另一种方法计算.

$$I_{n-1} = \frac{1}{5}\left(\frac{1}{n} - I_n\right), \quad n = 10, 9, \cdots, 2, 1. \tag{4.6}$$

只要计算出 I_{10} 的近似值 $\tilde{I}_{10}$, 就可以算出其它的值. 同样有

$$|e_{n-1}| = \frac{1}{5}|e_n|, \quad n = 10, 9, \cdots, 2, 1,$$

或

$$|e_{10-k}| = \left(\frac{1}{5}\right)^k |e_{10}|, \quad k = 1, 2, \cdots, 10.$$

所以递推 (4.6) 是稳定的. 由 积分中值定理

$$I_n = \frac{1}{\xi_n + 5}\int_0^1 x^n dx = \frac{1}{\xi_n + 5} \cdot \frac{1}{n+1}, \quad (0 < \xi_n < 1).$$

$\Rightarrow$

$$\frac{1}{6}\frac{1}{n+1} < I_n < \frac{1}{5}\frac{1}{n+1}.$$

可以取

$$\tilde{I}_n = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{6}\frac{1}{n+1} + \frac{1}{5}\frac{1}{n+1}\right),$$

$$\tilde{I}_{10} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{6}\frac{1}{10+1} + \frac{1}{5}\frac{1}{10+1}\right) = \frac{1}{60}.$$

有误差估计

$$|I_{10} - \tilde{I}_{10}| \leq \frac{1}{2}\left(\frac{1}{55} - \frac{1}{66}\right) = \frac{1}{660}.$$

4.2 病态问题

例 4.2 研究方程

$$
\begin{aligned}
p(x) &= (x-1)(x-2)\cdots(x-20) \\
&= x^{20} - 210x^{19} + \cdots = 0.
\end{aligned}
$$

解 该方程的精确根是 $x_i = i, i = 1, 2, \cdots, 20$. 若将系数 -210 作微小扰动变成 $-210 + 2^{-23}$, 则方程为

$$
p(x) + 2^{-23}x^{19} = 0
$$

可以计算其根分别是

$$
\begin{array}{ccc}
1.000000000, & 2.000000000, & 3.000000000, \\
4.000000000, & 4.999999928, & 6.000006944, \\
6.999697234, & 8.007267603, & 8.917250249,
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{ll}
10.095358137 \pm 0.643500904i, & 11.793633881 \pm 1.652329728i, \\
13.992358137 \pm 2.518830070i, & 16.730737466 \pm 2.812624894i, \\
19.502439400 \pm 1.940330347i, & 20.846908101.
\end{array}
$$

其中 10 个根变成了复数. 这是一个病态问题.

5 实际计算中应注意的一些问题

(1) 要尽量避免除数绝对值远远小于被除数绝对值.

$$e\left(\frac{x_1}{x_2}\right) \approx \frac{1}{x_2}e(x_1) - \frac{x_1}{x_2^2}e(x_2).$$

(2) 要尽量避免两个相近的数相减.

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

$$\sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}};$$

当 x 很大时, $\ln(x+1) - \ln(x) = \ln(1 + 1/x)$;

当 $|x| << 1$ 时, $1 - \cos(x) = 2\sin^2(x/2)$.

(3) 要防止大数“吃”小数

(4) 简化计算步骤, 减少运算次数

例 5.1 计算 $x^{31}=x\cdot x^2\cdot x^4\cdot x^8\cdot x^{16}$, 进行 8 次乘法.

例 5.2 计算多项式

$$p_n(x)=a_0x^n+a_1x^{n-1}+\cdots+a_{n-1}x+a_n.$$

若直接计算, 则需要 $\frac{n(n+1)}{2}$ 次乘法, n 次加法. 将多项式改写为

$$p_n(x)=(\cdots((a_0x+a_1)x+a_2)x+\cdots+a_{n-1})x+a_n,$$

令

$$\begin{aligned}
b_0 &= a_0\\
b_1 &= b_0x+a_1\\
b_2 &= b_1x+a_2\\
&\vdots\\
b_n &= b_{n-1}x+a_n=P_n(x)
\end{aligned}$$

即可得到递推公式

$$\begin{aligned}
b_0 &= a_0,\\
b_k &= b_{k-1}x+a_k,\quad k=1,2\cdots,n.
\end{aligned}$$

$p_n(x) = b_n$. 这就是秦九韶法. 它需要 n 次乘法和 n 次加法.

6 习 题

p.18-p.20: 4, 6, 9, 13, 14, 15, 17(上机题).

7 两个重要的结果

二元函数 Taylor 展开

$$
\begin{aligned}
&f(x+\Delta x, y+\Delta y) = f(x,y) + \frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\Delta y \\
&+\frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2}(\Delta x)^2 + 2\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x \partial y}(\Delta x)(\Delta y) + \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y^2}(\Delta y)^2\right) \\
&+\cdots
\end{aligned}
$$

积分中值定理

设 $f(x), g(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续, $g(x)$ 在 $[a,b]$ 上保号（即非负或非正）, 则存在 $\xi \in [a,b]$, 使得

$$\int_a^b f(x)g(x)\,dx = f(\xi)\int_a^b g(x)\,dx.$$