数值分析 期末速通教程

1. 误差

1.1 误差与有效数字

[**定义1.1.1**] 误差的分类.

(1) **模型误差**: 从实际问题中抽象(简化)出数学模型, 模型与实际问题间存在误差.

如: 自由落体运动只考虑重力, 忽略空气阻力.

(2) **观测误差**: 通过测量得到模型中参数(如温度、长度等)的值产生的误差.

(3) **方法误差**(**截断误差**): 用数值方法求模型的近似解, 数值近似解与精确解间的误差.

如 $\mathrm{e}^x \approx S_n(x) = 1 + x + \dfrac{x^2}{2!} + \cdots + \dfrac{x^n}{n!}$,

截断误差 $R_n(x) = \mathrm{e}^x - S_n(x) = \dfrac{x^{n+1}}{(n+1)!}\mathrm{e}^{\theta x}\ \ (0 < \theta < 1)$.

(4) **舍入误差**: 因机器字长有限, 数据在计算机中表示的误差. 如计算时取 $\pi = 3.1415926$.

[**注**] 实际计算中可能混合多种误差.

[**定义1.1.2**] 若 x^* 是准确值 x 的一个近似值, 则称 $e^* = x^* - x$ 为该近似值的**绝对误差**, 简称**误差**. 通常准确值未知, 则误差也未知. 若可估计出误差绝对值的一个上界, 如 $|e^*| = |x^* - x| \leq \varepsilon^*$, 则称 ε^* 为近似值的**误差限**, 它恒正. 若 $|x^* - x| \leq \varepsilon^*$, 则记 $x = x^* \pm \varepsilon^*$.

[**例1.1.1**] 用毫米刻度尺测量某长度 $x\ \mathrm{mm}$, 读出与该长度最接近的刻度 x^* 作为 x 的近似值, 则误差限为 $0.5\ \mathrm{mm}$.

若读得长度为 $765\ \mathrm{mm}$, 因 $|765 - x| \leq 0.5$, 则真实长度 $x \in [764.5, 765.5]$.

[**例1.1.2**] 对两个量 $x = 10 \pm 1, y = 1000 \pm 5$, 其中 $x^* = 10, \varepsilon_x^* = 1$; $y^* = 1000, \varepsilon_y^* = 5$.

虽 ε_y^* 比 ε_x^* 大 4 倍, 但 $\dfrac{\varepsilon_x^*}{x^*} = \dfrac{1}{10} = 10\%$, $\dfrac{\varepsilon_y^*}{y^*} = \dfrac{5}{1000} = 0.5\% < 10\%$,

这表明: y^* 近似 y 的程度比 x^* 近似 x 的程度好. 故除考虑误差本身的大小外, 还需考虑准确值的大小.

[**定义1.1.3**] 若 x^* 是准确值 x 的一个近似值, $e^* = x^* - x$, 则称 $e_r^* = \dfrac{e^*}{x} = \dfrac{x^* - x}{x}$ 为该近似值的**相对误差**. 实际计算中, 真值 x 未知, 若 $e_r^* = \dfrac{e^*}{x^*}$ 较小, 则可取 $e_r^* = \dfrac{e^*}{x^*} = \dfrac{x^* - x}{x^*}$ 为相对误差. 相对误差可正可负, 其绝对值的上界称为**相对误差限**, 记作 $\varepsilon_r^* = \dfrac{\varepsilon^*}{|x^*|}$.

[例1.1.3] 设 $x>0$ 的相对误差为 δ . 求 $\ln x$ 的误差.

[解] $\ln x-\ln x^*=\ln\dfrac{x}{x^*}=\ln\dfrac{x-x^*+x^*}{x^*}=\ln\left(\delta+1\right)$.

[例1.1.4] 设 x 的相对误差为 2% . 求 x^n 的相对误差.

[解] 由微分中值定理: $x^n-(x^*)^n\approx nx^{n-1}(x-x^*)$.

$\dfrac{x^n-(x^*)^n}{x^n}\approx\dfrac{nx^{n-1}(x-x^*)}{x^n}=n\dfrac{x-x^*}{x}=n\cdot 2\%$.

[定义1.1.3] 若准确值 x 的近似值 x^* 的误差限是某一位的半个单位, 该位到 x^* 的第一位非零数字有 n 位, 则称 x^* 有 n 位**有效数字**, 记作 $x^*=\pm 10^m\left(a_1+a_2\cdot 10^{-1}+\cdots+a_n\cdot 10^{-(n-1)}\right)$, 其中 $m\in\mathbb{Z}$, $a_i\in\{0,\cdots,9\}\ \ (i=1,\cdots,n)$, $a_1\neq 0$, 且 $|x-x^*|\leq\dfrac{1}{2}\cdot 10^{m-n+1}=\varepsilon^*$.

[注] m 固定时, n 越大, 10^{m-n+1} 越小, 即有效位数越多, 绝对误差限越小.

[例1.1.5] 真值 x 的近似值 $x^*=231.567$, 误差限 $\dfrac{1}{2}\times 10^{-2}$. 求 x^* 有几位有效数字.

[解] 将 x^* 拆分为下表.

2	3	1	.	5	6	7
10^2	10^1	10^0		10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}

因误差限 $\dfrac{1}{2}\times 10^{-2}$, 从数码 6 及之前有 5 个数码, 故有 5 位有效数字.

[例1.1.6] 真值 $x=0.005800\pm\dfrac{1}{2}\times 10^{-6}$. 求近似值 x^* 有几位有效数字.

[解] $0.005800=5.800\times 10^{-3}$, 则 $m=-3$.

$m-n+1=-6$, 解得: $n=4$, 即 x^* 有 4 位有效数字.

[例1.1.7] 求真值 $x=\pi$ 的近似值 x^* 有几位有效数字.

(1) $x^*=3.14$.

(2) $x^*=3.141$.

[解]

(1) $|e^*|=|x^*-x|=|3.14-\pi|\leq\dfrac{1}{2}\times 10^{-2}$.

$m=0$, $m-n+1=-2$, 解得: $n=3$, 即 x^* 有 3 位有效数字.

(2) $|e^*|=|x^*-x|=|3.141-\pi|\leq\dfrac{1}{2}\times 10^{-2}$.

$m=0$, $m-n+1=-2$, 解得: $n=3$, 即 x^* 有 3 位有效数字.

[**例1.1.8**] 按四舍五入原则求下列数的有 5 位有效数字的近似数.

(1) $187.9325:187.93$.

(2) $0.03785551:0.037856$.

(3) $8.000033:8.0000$.

(4) $2.718282818:2.7183$.

[**例1.1.9**] 重力加速度 g 以 $\mathrm{m/s^2}$ 为单位时, $g\approx 9.80\ \mathrm{m/s^2}$; 以 $\mathrm{km/s^2}$ 为单位时, $g\approx 0.00980\ \mathrm{km/s^2}$.

$|g-9.80|\leq\dfrac{1}{2}\times 10^{-2}$, $m=0,n=3$; $|g-0.00980|\leq\dfrac{1}{2}\times 10^{-5}$, $m=-3,n=3$,

故它们都有 3 位有效数字.

绝对误差限 $\varepsilon_1^*=\dfrac{1}{2}\times 10^{-2}\ \mathrm{m/s^2}$, $\varepsilon_2^*=\dfrac{1}{2}\times 10^{-5}\ \mathrm{m/s^2}$,

两者的绝对误差限不同, 但两者的相对误差都是 $\varepsilon_r^*=\dfrac{\frac{1}{2}\times 10^{-2}}{9.80}=\dfrac{\frac{1}{2}\times 10^{-5}}{0.00980}$.

[**注1**] 相对误差和相对误差限无量纲, 绝对误差和误差限有量纲.

[**注2**] 本例表明: 有效位数与小数点后的位数无关.

[**定理1.1.1**] 若近似值 x^* 是真值 x 四舍五入后的结果, 则 x^* 的有效数字为将 x^* 写成科学计数法后的位数.

[**例1.1.10**] 设真值 $x=\pi$ 的近似值为 x^* .

(1) $x^*=3.14$ 是 x 四舍五入的结果, 则 x^* 有 3 位有效数字.

(2) $x^*=3.142$ 是 x 四舍五入的结果, 则 x^* 有 4 位有效数字.

(3) $x^*=3.141$ 不是 x 四舍五入的结果, 无法用该方法判断.

[**例1.11.11**] 求真值 $x=0.00345$ 的近似值 $x^*=0.0035$ 有几位有效数字.

[**解**] x^* 是 x 四舍五入的结果, $x^*=3.5\times 10^{-3}$, 故 x^* 有 2 位有效数字.

[**定理1.1.2**] 设准确值 x 的近似值 $x^*=\pm 10^m\times\left(a_1+a_2\times 10^{-1}+\cdots+a_l\times 10^{-(l-1)}\right)$, 其中 $a_i\in\{0,\cdots,9\}\ \ (i=1,\cdots,l)$, $a_1\neq 0$, $m\in\mathbb{Z}$.

(1) 若 x^* 有 n 位有效数字, 则其相对误差限 $\varepsilon_r^*\leq\dfrac{1}{2a_1}\times 10^{-(n-1)}$.

(2) 若 x^* 的相对误差限 $\varepsilon_r^*\leq\dfrac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-(n-1)}$, 则 x^* 至少有 n 位有效数字.

[**证**]

(1) 注意到 $a_1\times 10^m\leq|x^*|<(a_1+1)\times 10^m$, 则 x^* 有 n 位有效数字时,

$$\varepsilon^*=\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\leq\frac{\dfrac{1}{2}\times 10^{m-n+1}}{a_1\times 10^m}=\frac{1}{2a_1}\times 10^{-n+1}.$$

(2) 注意到 $|x-x^*|=|x^*|\cdot\varepsilon_r^*<(a_1+1)\times 10^m\times\dfrac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-n+1}=\dfrac{1}{2}\times 10^{m-n+1}$,

则 x^* 至少有 n 位有效数字.

[**注**] 本定理表明: 有效位数越多, 相对误差限越小.

[**例1.1.12**] 测量得长度 $954\ \mathrm{cm}$. 求相对误差限.

[**解**] 954 有 $n=3$ 位有效数字. $\varepsilon_r^*\leq\dfrac{1}{2a_1}\times 10^{1-n}=\dfrac{1}{2\times 9}\times 10^{1-3}\approx 0.056\%$.

[**例1.1.13**] 要 $s.t.\ \sqrt{20}$ 的近似值的相对误差限 $<0.1\%$, 需取几位有效数字.

[**解**] 设需取 n 位有效数字. 由 **定理1.1.2** : $\varepsilon_r^*\leq\dfrac{1}{2a_1}\times 10^{-(n-1)}$.

因 $\sqrt{20}=4.4\cdots$, 则 $a_1=4$. 取 $n=4$, 则 $\varepsilon_r^*\leq 0.125\times 10^{-3}<10^{-3}=0.1\%$.

故需取 4 位有效数字, 此时查表知: $\sqrt{20}\approx 4.472$.

1.2 数值运算的误差估计

[**定理1.2.1**] 设两近似数 x_1^* 和 x_2^* 的误差限分别为 $\varepsilon(x_1^*)$ 和 $\varepsilon(x_2^*)$, 则:

(1) $\varepsilon(x_1^*\pm x_2^*)=\varepsilon(x_1^*)\pm\varepsilon(x_2^*)$.

(2) $\varepsilon(x_1^*\cdot x_2^*)\approx|x_1^*|\cdot\varepsilon(x_2^*)+|x_2^*|\cdot\varepsilon(x_1^*)$.

(3) $\varepsilon\left(\dfrac{x_1^*}{x_2^*}\right)\approx\dfrac{|x_1^*|\cdot\varepsilon(x_2^*)+|x_2^*|\cdot\varepsilon(x_1^*)}{|x_2^*|^2}\ \ (x_2^*\neq 0)$.

[定理1.2.2] 设一元函数 $f(x)$ 的自变量 x 的近似值为 x , 则用 $f(x^*)$ 近似 $f(x)$ 的误差限 $\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)| \cdot \varepsilon(x^*)$.

[证] 由Taylor展开: $f(x) - f(x^*) = f'(x^*)(x - x^*) + \dfrac{f''(\xi)}{2}(x - x^*)^2$, 其中 ξ 介于 x 和 x^* 间.

两边取绝对值得: $|f(x) - f(x^*)| \leq |f'(x^*)| \cdot \varepsilon(x^*) + \dfrac{|f''(\xi)|}{2} \cdot \varepsilon^2(x^*)$.

假设 $f'(x^*)$ 和 $f''(x^*)$ 的比值不太大, 则可忽略 $\varepsilon(x^*)$ 的高阶项, 此时 $\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)| \cdot \varepsilon(x^*)$.

[定理1.2.3] 设多元函数 $f(x_1, \cdots, x_n)$. 若 $x_1, \cdots, x_n$ 的近似值为 $x_1^*, \cdots, x_n^*$, 则 $A = f(x_1, \cdots, x_n)$ 的近似值 $A^* = f(x_1^*, \cdots, x_n^*)$ 的误差限 $\varepsilon(A^*) \approx \displaystyle\sum_{k=1}^n \left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*\right| \cdot \varepsilon(x_k^*)$, 相对误差限 $\varepsilon_r^* \approx \displaystyle\sum_{k=1}^n \left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*\right| \cdot \frac{\varepsilon(x_k^*)}{|A|^*}$.

[证] 由Taylor展开: $e(A^*) = A^* - A = f(x_1^*, \cdots, x_n^*) - f(x_1, \cdots, x_n)$

$$\approx \sum_{k=1}^n \frac{\partial f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_k} \cdot (x_k^* - x_k) = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^* \cdot e_k^* ,$$

则 $\varepsilon(A^*) \approx \displaystyle\sum_{k=1}^n \left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*\right| \cdot \varepsilon(x_k^*)$,

$$\varepsilon_r^* = \varepsilon_r(A^*) = \frac{\varepsilon(A^*)}{|A^*|} \approx \sum_{k=1}^n \left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*\right| \cdot \frac{\varepsilon(x_k^*)}{|A|^*} .$$

[例1.2.1] 设某矩形的长 l 的估计值 $l^* = 110$, 宽 d 的估计值 $d^* = 80$. 已知 $|l - l^*| \leq 0.2, |d - d^*| \leq 0.1$, 求面积 $s = l \cdot d$ 的绝对误差限和相对误差限.

[解] $\varepsilon(l^*) = 0.2, \varepsilon(d^*) = 0.1$. 因 $s = l \cdot d$, 则 $\dfrac{\partial s}{\partial l} = d, \dfrac{\partial s}{\partial d} = l$.

绝对误差限 $\varepsilon(s^*) \approx \left|\left(\dfrac{\partial s}{\partial l}\right)^*\right| \cdot \varepsilon(l^*) + \left|\left(\dfrac{\partial s}{\partial d}\right)^*\right| \cdot \varepsilon(d^*) = 27$,

相对误差限 $\varepsilon_r(s^*) = \dfrac{\varepsilon(s^*)}{|s^*|} = \dfrac{\varepsilon(s^*)}{l^* \cdot d^*} \approx \dfrac{27}{8800}$.

1.3 误差避免

[减少误差的原则]

(1) 避免两相近数相减.

如 $a_1 = 0.12345$, $a_2 = 0.12346$ 都有 5 位有效数字, 而 $a_2 - a_1 = 0.00001$ 只有 1 位有效数字.

经验性的避免方法:

① $\sqrt{x + \varepsilon} - \sqrt{x} = \dfrac{\varepsilon}{\sqrt{x + \varepsilon} + \sqrt{x}}$.

② $\ln(x + \varepsilon) - \ln x = \ln\left(1 + \dfrac{\varepsilon}{x}\right)$.

③ $|x| << 1$ 时, $1 - \cos x = 2\sin^2\dfrac{x}{2}$, $\mathrm{e}^x - 1 = x\left(1 + \dfrac{x}{2} + \dfrac{x^2}{6} + \cdots\right)$.

(2) 避免除数的绝对值远小于被除数的绝对值.

如 $\dfrac{2.718}{0.001}=2718.2$ 的分母 y 作微小扰动 0.0001 , 则 $\dfrac{2.7182}{0.0011}\approx 2471.1$.

$\eta\left(\dfrac{x}{y}\right)\approx\dfrac{|x^*|\cdot\eta(y)+|y^*|\cdot\eta(x)}{|y^*|^2}$, 当 $|x|>>|y|$ 时舍入误差扩大.

计算结果对 y 的扰动敏感, 而 y 常为近似值, 故计算结果不可靠. 此外, 除以很小的数还可能导致数据类型溢出.

(3) 避免大数吃小数.

如用单精度浮点数求方程 $x^2-(10^9+1)x+10^9=0$ 的根.

① 算法I: 用求根公式 $x=\dfrac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$.

计算机内, 10^9 存为 0.1×10^{10} , 1 存为 0.1×10^1 .

做加法时, 两加数的指数向大数对齐, 再将浮点部分相加, 即 $1=0.000000001\times 10^{10}$,

$10^9+1=0.10000000\times 10^{10}+0.00000000\times 10^{10}=0.10000000\times 10^{10}$,

解得: $x_1=\dfrac{-b+\sqrt{b^2-4ac}}{2a}=10^9$, $x_2=\dfrac{-b-\sqrt{b^2-4ac}}{2a}=0$.

② 算法II: 先解得 $x_1=\dfrac{-b+\mathrm{sgn}(b)\cdot\sqrt{b^2-4ac}}{2a}=10^9$, 再由 Vieta 定理 $x_1\cdot x_2=\dfrac{c}{a}$ 求得 $x_2=1$.

求和时, 从小往大相加可减小和的误差.

(4) 先化简再计算, 减少步骤, 避免误差积累.

(5) 选用稳定的算法. 评价算法的准则: 复杂度、精度、稳定性.

1.4 数值计算的常用方法

1.4.1 近似替代

[**例1.4.1**] 求 e 的近似值.

[**解**] 因 $\mathrm{e}^x=1+x+\dfrac{x^2}{2!}+\cdots+\dfrac{x^n}{n!}+\cdots$, 则 $\mathrm{e}=1+1+\dfrac{1}{2!}+\cdots+\dfrac{1}{n!}+\cdots$.

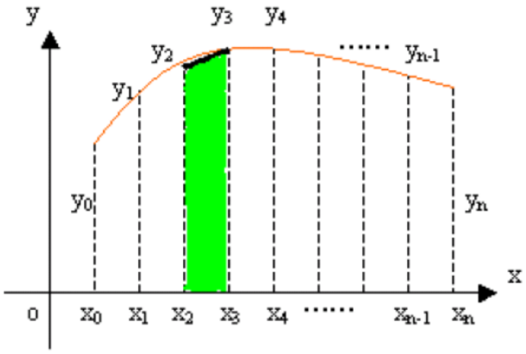
计算机无法求无限项之和, 只能求前有限项之和作为近似值,

如求前 n 项之和 $\mathrm{e}\approx 1+1+\dfrac{1}{2!}+\cdots+\dfrac{1}{n!}$, 其误差 $|R_n|<\dfrac{\mathrm{e}}{(n+1)!}<\dfrac{3}{(n+1)!}$.

1.4.2 离散化

[例1.4.2] 对连续、非负函数 $f(x)$, 求积分 $I=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$.

[解] 计算机无法计算连续的问题.



将区间 $[a,b]$ n 等分, 即取分点 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$, 记 $y_i=f(x_i)\ \ (i=0,1,\cdots,n)$.

用 n 个梯形的面积之和代替曲边梯形的面积, 即 $I\approx\dfrac{b-a}{n}\left(\dfrac{y_0+y_n}{2}+y_1+\cdots+y_{n-1}\right)$.

1.4.3 递推/迭代

[例1.4.3] **[秦九韶算法]** 求多项式 $P_n(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0$ 在某一点 $x=x_0$ 处的值.

[解] 朴素算法需 $\dfrac{n(n+1)}{2}$ 次乘法和 n 次加法, 而秦九韶算法只需 n 次乘法和 n 次加法.

$P_n(x)=(a_nx+a_{n-1})x^{n-1}+a_{n-2}x^{n-2}+\cdots+a_x+a_0$.

令 $u_0=a_n$, $u_1=a_nx+a_{n-1}=u_0x+a_{n-1}$,

则 $P_n(x)=u_1x^{n-1}+a_{n-2}x^{n-2}+\cdots+a_1x+a_0$

$=(u_1x+a_{n-2})x^{n-2}+a_{n-3}x^{n-3}+\cdots+a_1x+a_0$.

令 $u_2=u_1x+a_{n-2}$,

则 $P_n(x)=(u_2x+a_{n-3})x^{n-3}+a_{n-4}x^{n-4}+\cdots+a_1x+a_0=\cdots$.

[例1.4.4] 用秦九韶算法求多项式 $p(x)=3x^5-2x^3+x+7$ 在 $x=3$ 处的值.

[解] $p(x)=(3x^4-2x^2+1)x+7=[(3x^2-2)x^2+1]x+7$.

$u_0=3$, $u_1=u_0x^2-2=3\times3^2-2=25$, $u_2=u_1x^2+1=226$, $u_3=u_2x+7=685$.
