数值分析

朱升峰

华东师范大学 数学科学学院

2021 年 3 月

目录

第一章　数值分析概论

- 数学科学与数值分析
- 计算数学与科学计算
- 计算方法与计算机
- 数值问题与算法

计算数学

计算数学研究用计算机求解各种数学问题的数值计算方法及其理论与软件实现。

数值分析属于计算数学，研究数值计算方法及其理论。

用计算机求解科学技术问题通常步骤：

- 根据实际问题建立数学模型
- 由数学模型给出数值计算方法
- 编制算法程序在计算机上算出结果

数值分析研究上述后两步。

科学计算

科学计算是 20 世纪重要科学技术进步之一。

科学计算：计算数学、计算物理、计算化学、计算生物学、大数据等

科学研究的三种方法

- 理论研究
- 实验研究
- 科学计算

科学计算: 现今体现国家科学技术核心竞争力的重要标志

计算数学是各种计算性学科的共性基础。

计算方法与计算机

计算机出现后，计算方法迅速发展成数学科学的一个独立分支-计算数学。

计算能力的提高来自：

- 计算机
- 计算方法

两者发展相互促进。

数值问题与算法

面向计算机的算法:

- 串行算法: 只有一个进程的算法适合于串行计算机
- 并行算法: 有两个以上的算法适合于并行计算机

算法 "好": 可靠的理论分析且良好的数值表现 (计算复杂性好)

数值分析研究数值问题的算法

1. 面向计算机
2. 可靠的理论分析: 近似算法的收敛性, 数值稳定性, 误差分析等
3. 好的计算复杂性: 时间复杂性, 空间复杂性
4. 要有数值实验: 算法的数值验证

好算法的重要性

例: 对 n 阶线性方程组, 克拉默 (Cramer) 法则用行列式解法算 $n+1$ 个 n 阶行列式的值, 需要 $n!(n^2-1)$ 次乘除运算:

$$\text{当}n = 20 \text{ 时}, \; 20! \times \left(20^2 - 1\right) \approx 9.7 \times 10^{20}$$

用每秒运算 30 亿次（主频 3.0G）的计算机求解时，
大约需要 10000 年。
使用高斯消去法, 只需约 $2n^3/3$ 次乘除运算，不到 1 秒算完。

课程学习建议

- 注重掌握方法的思想与基本原理
- 重视误差分析, 收敛性, 稳定性的数学理论
- 通过例子, 学习使用各种数值方法解决实际问题
- 做一定数量的理论分析与编程练习
- 掌握微积分, 线性代数, 常微分方程课程中与数值分析相关的内容
- MATLAB

课程信息

教材：数值分析（第五版), 李庆扬, 王能超, 易大义编)

- 课程主页：http://math.ecnu.edu.cn/ sfzhu
- 讲义和参考资料：见课程主页
- 成绩评定：平时 50%（考勤, 作业, 上机, 期中笔试）+ 期末笔试 50%
- 答疑：周二 14:00—16:00，数学楼 218
- Email: sfzhu@math.ecnu.edu.cn
- 上机：数学楼 208 机房，时间待定

误差

误差是科学计算中非常重要的概念，用来描述数值计算中近似解的精确程度。

本节内容

- 误差来源分类
- 误差与有效数字
- 数值运算的误差估计

误差分类

- 模型误差
- 观测误差
- 方法误差（截断误差）
- 舍入误差

模型误差与观测误差

计算机解决计算问题要先建立数学模型，它对实际问题进行抽象、简化得到，因而是近似的。

模型误差：数学模型与实际问题之间的误差。

通常假定数学模型是合理的，数值分析中不讨论模型误差。

观测误差：由观测产生的误差。

根据观测得到的物理量，如温度、长度等，这些参量包含误差。

当数学模型不能得到精确解时，通常要用数值方法求近似解。

截断误差（方法误差）：近似解（数值解）与精确解之间的误差。

例：函数 $f(x)$ 用泰勒（Taylor）多项式

$$P_n(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n$$

近似代替，则数值方法的截断误差为

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1}, \quad \xi\text{在 0 与}x\text{之间}.$$

舍入误差：计算机的字长有限导致数据表示和计算过程产生误差。

数值分析主要讨论截断误差和舍入误差。

绝对误差

定义 1

设 x 为准确值（真值），x^* 为 x 的近似值，称

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

为近似值的绝对误差，简称误差。

定义 2

存在正数 ε^*, 使得

$$|x^* - x| \leq \varepsilon^*$$

称 ε^* 为近似值的绝对误差限，简称误差限。

$$x^* - \varepsilon^* \leqslant x \leqslant x^* + \varepsilon^*,$$

记作 $x = x^* \pm \varepsilon$.

相对误差

定义 3

近似值的误差与准确值的比值

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

称为近似值 x^* 的相对误差，记作 e_r^*。

定义 4

若存在正数 ε_r^*, 使得 $|e_r^*| \leq \varepsilon_r^*$, 则称 ε_r^* 为相对误差限。

实际计算中，准确值未知，一般取

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

作为 x^* 的相对误差，$\varepsilon_r^* = \varepsilon^*/|x^*|$.

有效数字

定义 5

若近似值 x^* 的误差限是某位的半个单位，该位到 x^* 的第一位非零数字有 n 位, 就说 x^* 有 n 位有效数字（或说准确到该位)。它可表示为

$$x^* = \pm 10^m \times (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}),$$

共中 $a_i(i = 1, 2, \cdots, n)$ 是 0 到 9 中的一个数字 , $a_1 \neq 0, m$ 为整数, 且

$$|x - x^*| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$$

例：$\pi = 3.14159265 \cdots$.

取 $x^* = 3.14$ 作 π 的近似值，x^* 有 3 位有效数字；误差限为

$$|x^* - \pi| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

有效数字

取 $x^* = 3.1416$ 作 π 的近似值，x^* 有 5 位有效数字；误差限为

$$|x^* - \pi| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

定理 6 (有效数字与相对误差限的关系)

设近似值 x^* 可表示为 $x^* = \pm a_1 \cdot a_2 \cdots a_n \cdots \times 10^m \, (a_1 \neq 0)$
若 x^* 具有 n 位有效数字, 则其相对误差限满足

$$\left| \frac{x^* - x}{x^*} \right| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

反之, 若

$$\left| \frac{x^* - x}{x^*} \right| \leq \frac{1}{2\,(a_1 + 1)} \times 10^{-(n-1)}$$

则 x^* 至少有 n 位有效数字。

有效数字

定理表明，有效位数越多，相对误差限越小。

例：用 $x^* = 2.72$ 表示 e 具有 3 位有效数字的近似值，则相对误差限是

$$\frac{1}{2\times 2}\times 10^{-(3-1)} = \frac{1}{4}\times 10^{-2}.$$

例：要使 $\sqrt{20}$ 的近似值的相对误差限小于 0.1%, 要取几位有效数字?

设取 n 位有效数字，则 $\varepsilon_r^* \leqslant \frac{1}{2a_1}\times 10^{-n+1}$. 由于 $\sqrt{20} = 4.a_2, \cdots$, 知 $a_1 = 4$,
故只要取 $n = 4$, 就有

$$\varepsilon_r^* \leqslant 0.125\times 10^{-3} < 10^{-3} = 0.1\%$$

即只要对 $\sqrt{20}$ 的近似值取 4 位有效数字。

误差估计

真值 x_1 与 x_2 的近似值 x_1^* 与 x_2^* 的误差限分别为 $\varepsilon(x_1^*)$ 与 $\varepsilon(x_2^*)$。

四则运算的误差限:

$$\varepsilon\left(x_1^* \pm x_2^*\right) \leqslant \varepsilon\left(x_1^*\right) + \varepsilon\left(x_2^*\right)$$

$$\begin{aligned}
\varepsilon\left(x_1^* x_2^*\right) &\leqslant \left|x_2^*\right| \varepsilon\left(x_1^*\right) + \left|x_1^*\right| \varepsilon\left(x_2^*\right) + \varepsilon\left(x_1^*\right) \varepsilon\left(x_2^*\right) \\
&\approx \left|x_2^*\right| \varepsilon\left(x_1^*\right) + \left|x_1^*\right| \varepsilon\left(x_2^*\right) \\
\varepsilon\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) &\leqslant \frac{\left|x_2^*\right| \varepsilon\left(x_1^*\right) + \left|x_1^*\right| \varepsilon\left(x_2^*\right)}{\left|x_2^*\right| \left|x_2\right|} \\
&\approx \frac{\left|x_2^*\right| \varepsilon\left(x_1^*\right) + \left|x_1^*\right| \varepsilon\left(x_2^*\right)}{\left|x_2^*\right|^2} \quad (x_2^* \neq 0).
\end{aligned}$$

一元函数误差估计

对一元可微函数 $f(x)$, x 的近似值为 x^*，以 $f(x^*)$ 近似 $f(x)$

$$f(x)-f(x^*)=f'(x^*)(x-x^*)+\frac{f''(\xi)}{2}(x-x^*)^2, \quad \xi \text{ 介于} x, x^* \text{ 之间}$$

则

$$|f(x)-f(x^*)| \leqslant |f'(x^*)|\varepsilon(x^*)+\frac{|f''(\xi)|}{2}\varepsilon^2(x^*)$$

假定 $|f''|$ 不大，则误差限

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

相对误差限

$$\varepsilon_r(f(x^*)) \approx \frac{|f'(x^*)|}{|f(x^*)|}\varepsilon(x^*)$$

多元函数误差估计

计算 $A = f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$。若 $(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 的近似值为 $(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$，$A$ 的近似值 $A^* = f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$，则由泰勒展开得到

$$\begin{aligned} e(A^*) &:= A^* - A = f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*) - f(x_1, x_2, \cdots, x_n) \\ &\approx \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_k} \right) (x_k^* - x_k) \equiv \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* e_k(x^*) \end{aligned}$$

则

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

且

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

例: 已测得某场地的长 l 和宽 d 分别为：$l^* = 110$ m, $d^* = 80$ m, 测量误差限分别为 0.2 m 和 0.1 m 。试求面积 $s = ld$ 的误差限和相对误差限。

解

$$\varepsilon\left(s^*\right) \approx \left|\left(\frac{\partial s}{\partial l}\right)^*\right| \varepsilon\left(l^*\right) + \left(\frac{\partial s}{\partial d}\right)^* \varepsilon\left(d^*\right)$$

其中

$$\left(\frac{\partial s}{\partial l}\right)^* = d^* = 80 \text{ m}, \quad \left(\frac{\partial s}{\partial d}\right)^* = l^* = 110 \text{ m}$$

误差限和相对误差限分别为:

$$\varepsilon\left(s^*\right) \approx 80 \times (0.2) + 110 \times (0.1) = 27(\text{ m}^2);$$

$$\varepsilon_r\left(s^*\right) = \frac{\varepsilon\left(s^*\right)}{\left|s^*\right|} = \frac{\varepsilon\left(s^*\right)}{l^* d^*} \approx \frac{27}{8800} = 0.31\%$$

内容提要

- 算法的数值稳定性
- 病态问题与条件数
- 尽量避免误差危害

算法的稳定性

在计算过程中，如果误差不增长或能得到有效控制，则称该算法是**稳定的**，否则为**不稳定的**。

例: 计算 $I_n = \mathrm{e}^{-1}\int_0^1 x^n \mathrm{e}^x \,\mathrm{d}x \ (n=0,1,\cdots)$. (见 exp11.m)

$$\begin{cases} I_n = 1 - nI_{n-1}, & n = 1,2,\cdots \\ I_0 = \mathrm{e}^{-1}\int_0^1 \mathrm{e}^x \,\mathrm{d}x = 1 - \mathrm{e}^{-1} \end{cases}$$

由泰勒公式

$$\mathrm{e}^{-1} \approx 1 + (-1) - \frac{(-1)^2}{2!} + \cdots + \frac{(-1)^k}{k!}$$

取 $k=7$，用 4 位小数计算，得 $\mathrm{e}^{-1} \approx 0.3679$, 截断误差

$$R_7 = |\mathrm{e}^{-1} - 0.3679| \leqslant \frac{1}{8!} < \frac{1}{4} \times 10^{-4}.$$

于是得近似值 $I_0 \approx 0.6321 = \tilde{I}_0$，**计算方法 1** (递推关系逐个计算):

$$\begin{cases} \tilde{I}_0 = 0.6321 \\ \tilde{I}_n = 1 - n\tilde{I}_{n-1}, & n = 1,2,\cdots \end{cases} \tag{1}$$

算法的数值稳定性

初值 $\tilde{I}_0$ 有误差 $E_0 = \tilde{I}_0 - I_0$，以后每步计算误差 $E_n = \tilde{I}_n - I_n$，从而

$$E_n = -nE_{n-1}, \quad n = 1, 2, \cdots$$

由此推得

$$E_n = (-1)^n n! E_0$$

例如，$n = 8$，若 $|E_0| = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$，则

$$|E_8| > 8!|E_0| > 2.$$

n	0	1	2	$\cdots$	7	8	9
$\tilde{I}_n$(由 (1))	0.6321	0.3679	0.2642	$\cdots$	0.2160	-0.7280	7.5520
I_n^*(由 (2))	0.6321	0.3679	0.2642	$\cdots$	0.1121	0.1035	0.0684

尽管初值精度高，由于误差传播导致计算结果不可靠。

递推计算公式数值不稳定！

对 I_n 积分推出

$$\frac{e^{-1}}{n+1} \leqslant I_n \leqslant \frac{1}{n+1}$$

取 $n=9$ 得，$e^{-1}/10 \leqslant I_9 \leqslant 1/10$. 粗略估计, 取

$$I_9^* \approx \frac{1}{2}\left(\frac{1}{10}+\frac{e^{-1}}{10}\right) = 0.0684.$$

计算方法 2 (递推式倒过来计算):

$$\begin{cases} I_9^* = 0.0684 \\ I_{n-1}^* = \frac{1}{n}\left(1 - I_n^*\right), \quad n = 9, 8, \cdots, 1 \end{cases} \tag{2}$$

记 $E_n^* = I_n^* - I_n$, 则 $|E_0^*| = \frac{1}{n!}|E_n^*|$。

尽管 E_9^* 较大，误差逐步缩小，I_0 的近似效果好（不超过 10^{-4}）。

此例表明，数值不稳定的算法不能使用!

病态问题与条件数

如果一个数值问题输入数据的微小扰动（即误差）会引起计算结果的很大相对误差，则称该问题是病态问题，否则就是良态问题。

例: 求解线性方程组

$$\begin{cases} x + ay = 1 \\ ax + y = 0 \end{cases}$$

解：当 $a = 1$ 时，方程组无解。当 $a \neq 1$ 时，方程组解

$$x = \frac{1}{1-a^2}, y = -\frac{a}{1-a^2}$$

当 $a \approx 1$，则 a 的微小误差可能会引起解很大误差。

例如，$a = 0.99$, $x \approx 50.25$; 如果输入的数据有 0.001 的误差，取 $a = 0.991$，则 $x^* \approx 55.81$，误差约为 55.56！

当 a 接近于 1 时，该例为病态问题！

病态问题与条件数

病态问题是问题本身固有的，与数值方法无关，

对病态问题需要采用好的算法。

计算函数值 $f(x)$：

若 x 有扰动 x^*，函数值亦有扰动，由泰勒公式，相对误差比值

$$\left|\frac{f(x^*)-f(x)}{f(x)}\right| \Big/ \left|\frac{x^*-x}{x}\right| \approx \left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right| \triangleq C_p$$

C_p 称为计算函数值问题的**条件数**。

若条件数大，将引起函数值较大的相对误差，此时问题是病态问题。

尽量避免误差危害

(1) **避免两个很相近的数相减**

若 x_1 与 x_2 接近，

$$\lg x_1 - \lg x_2 = \lg \frac{x_1}{x_2}$$

$$\sqrt{x_1} - \sqrt{x_2} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}$$

$$1 - \cos x = 2\sin^2 \frac{x}{2} (x \to 0)$$

例：求 $x^2 - 16x + 1 = 0$ 的小正根

解：$x_1 - 8 + \sqrt{63}, x_2 - 8 - \sqrt{63} \approx 8 - 7.94 = 0.06 = x_2^*$，

x_2^* 只有一位有效数字，若用

$$x_2 = 8 - \sqrt{63} = \frac{1}{81\sqrt{63}} \approx \frac{1}{15.94} \approx 0.0627$$

有 3 位有效数字。

例：计算 $\ln 2$ 的值（见 exp12.m）

解：

法一

$$\ln(1+x)=\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\frac{x^n}{n}$$

令 $x=1$。只要计算前 10 项之和，截断误差 5×10^{-5}。

计算量大，舍入误差累积严重。

法二

$$\ln\frac{1+x}{1-x}=2\left(x+\frac{x^3}{3}+\frac{x^5}{5}+\cdots+\frac{x^{2n+1}}{2n+1}+\cdots\right)$$

令 $x=1/3$，只要计算前 10 项之和，截断误差小于 10^{-10}。

尽量避免误差危害

(2) **节省计算次数以减少误差累积**

例

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

的值，若直接计算 $a_k x^k$ 再逐项相加，一共需做

$$n + (n-1) + \cdots + 2 + 1 = \frac{n(n+1)}{2}$$

法和 n 次加法；

若采用：

$$p(x) = (\cdots(a_0 x + a_1)\, x + \cdots + a_{n-1})\, x + a_n$$

只用 n 次乘法和 n 次加法，计算量大大减少。

此算法为秦九韶（南宋数学家）算法（1247），国外称为Hernor算法（1819）.

用秦九韶算法则只需 n 次乘法和 n 次加法，运算量大大减小！