南京大學 NANJING UNIVERSITY 工程管理学院 SCHOOL OF MANAGEMENT & ENGINEERING

数值分析与计算软件

温丹苹
邮箱：dpwen@nju.edu.cn
办公室：工管院协鑫楼306

《数值分析与计算软件》线上线下交互信息

课程微信群

Group: 2024秋季数值分析课程群

Valid until 9/10 and will update upon joining group

课程基本信息

- 课程名称：数值分析与计算软件
- 总学时：32
- 总学分：2
- 主要讲授：

理论与实践结合性质

1.如何用数学语言描述实际中的工程技术问题，即建立数学模型，将之转化为一个数学问题。

2.寻求合适的近似计算方法，获得最佳方案。

3.编程计算，充分发挥计算机的记忆和快速运算功能。

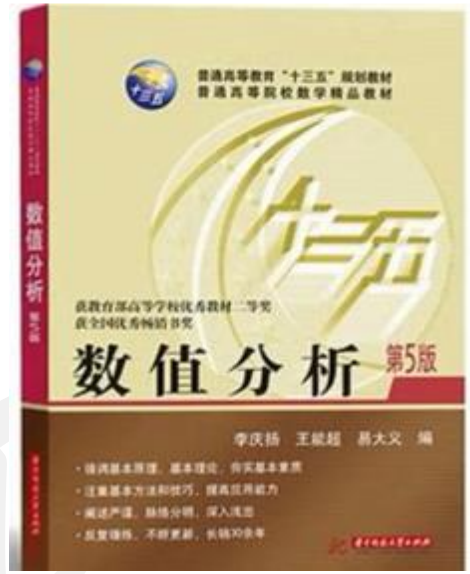
课程要求

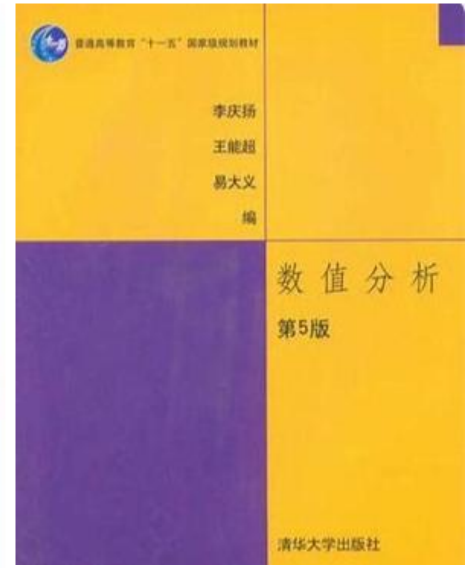
- **学习目的：**
  1. 应用，创新已有方法
  2. 编程完成计算，解决问题
- **学习方法：**
  1. 掌握各种方法的**基本原理**
  2. 理解方法的**构造过程**
  3. 分析各种方法的**优缺点**
  4. 习题练习+实际问题分析
- **学习考核：**

总成绩 =平时成绩（20%）+上机成绩（30%）+ 期末成绩（50%）

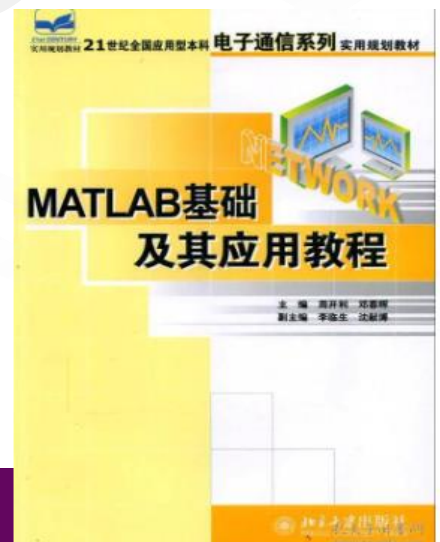
教材

[1] 李庆扬， 王能超， 易大义. 数值分析 [M]. 清华大学出版社, 2018.





[2] 周开利等编著, MATLAB 基础及其应用教程[M].北京大学出版社, 2007.



课程内容

1. 绪论
2. 非线性方程的数值解法
3. 解线性代数方程组的直接法
4. 解线性代数方程组的迭代法
5. 插值法
6. 函数逼近

举个例子

- 一个普通问题：

$x^2 - 2 = 0$ 的非负解是什么？

- 一个不彻底的答案：$\sqrt{2}$

- 一个新问题：$\sqrt{2} = ?$

举个栗子

- 用**数值分析**方法求：

$$x^2 - 2 = 0 \text{ 的非负解。}$$

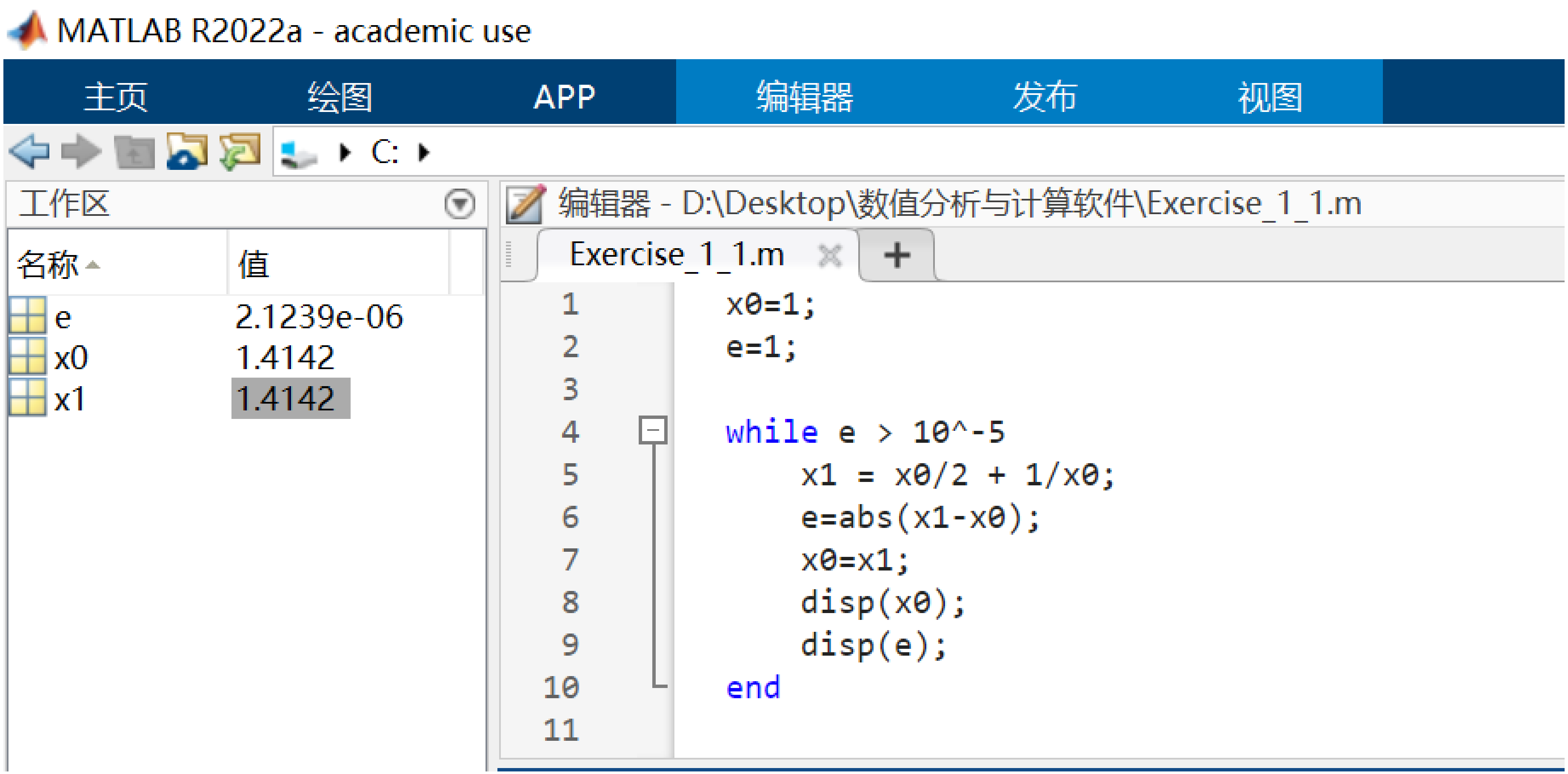
Algorithm 2 求 $\sqrt{2}$ 的不动点迭代算法

Initialize $x_0 = 1,\ \ e = 1$
while $e > 10^{-5}$ **do**
  Compute $x_1 = \frac{x_0}{2} + \frac{1}{x_0}$; $e = |x_1 - x_0|$
  Let $x_0 = x_1$
end while
Output x_0.

举个栗子

➢程序设计：用 **Matlab** 实现

Exercise_1_1_ln.m



举个栗子

➤计算机计算：用 Matlab 实现

命令行窗口

```
>> Exercise_1_1
   1.500000000000000

   0.500000000000000

   1.416666666666667

   0.083333333333333

   1.414215686274510

   0.002450980392157

   1.414213562374690

     2.123899819794772e-06
```

循环	0	1	2	3	4
x0	1	1.5	1.4166667	1.4142157	1.4142136
e	1	0.5	0.0833333	0.0024510	2.12389981e −6

➤ 结果分析：

在保留 8 位有效数字的情况下，用计算器直接计算 $\sqrt{2}$， 等于 1.4142136。

第一章 绪论

1.1 数值分析对象和特点

1.2 误差的来源及基本概念

1.3 误差分析原则

1.4 小结

1.1 数值分析对象和特点

- 数值分析是专门研究**求解各种数学问题的数值计算方法**。
- 传统的科学研究方法：**理论分析**和**科学实验**。

  科学计算已成为第三种科学研究的方法和手段。

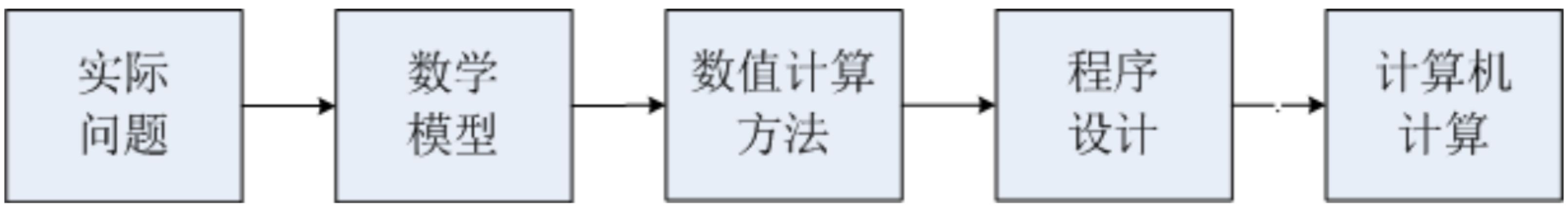


图1.1 用计算机进行科学计算解决实际问题的基本过程

- 数值分析也称为数值计算方法，它是**研究用计算机求解数学问题的数值方法及其理论**，是计算数学的主体部分。

1.1 数值分析对象和特点

➢以**数学问题**为研究对象，
以**纯数学**为基础；
把**理论**和**实际计算**结合起来；
着重研究**面向计算机**的；
能够解决**实际问题**的数值方法和理论。

1.1 数值分析对象和特点

➢数值分析特点

1. 面向**计算机**，要根据计算机的特点，构造实际可行的有效算法；
2. 有可靠的理论分析，从理论上能够保证方法的**收敛性**和**稳定性**；
3. 要有**好的计算复杂度**，即时间复杂度和空间复杂度；
4. 要经得起**数值实验检验**。

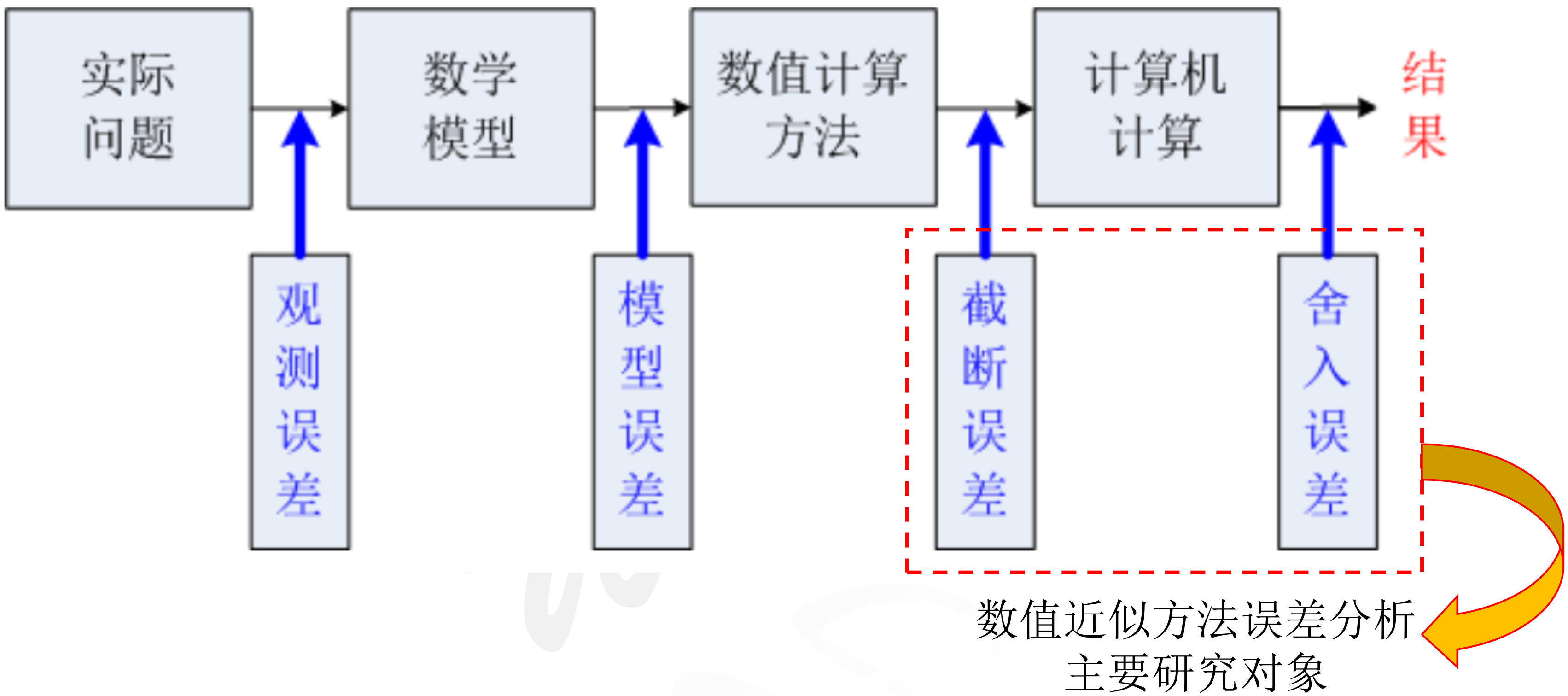
1.2 误差的来源及基本概念

1.2.1 误差来源

- 误差：数值计算结果和原问题的结果间存在的差异。
- 误差来源：**简化近似，连续问题离散化，四舍五入**等。

- **模型误差**：数学模型与实际问题之间的误差。
- **观测误差**：通过测量和实验得到模型中的各种数据或参量产生的误差。
- **截断误差**：也称方法误差，是指对数学模型进行数值求解时产生的误差，即近似解与精确解之间的误差。
- **舍入误差**：由于计算机的机器字长有限，做算术运算时存在一定的精度限制，产生的误差。

1.2 误差的来源及基本概念



◆ 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。

1.2 误差的来源及基本概念

例 近似计算 $\int_0^1 e^{-x^2}\,\mathrm{d}x$ 的值.

解. 这里我们利用 Taylor 展开, 即

$$\begin{aligned}\int_0^1 e^{-x^2}\,\mathrm{d}x &= \int_0^1 \left(x - x^2 + \frac{x^4}{2!} - \frac{x^6}{3!} + \frac{x^8}{4!} - \cdots\right)\mathrm{d}x \\ &= 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{2!}\times\frac{1}{5} - \frac{1}{3!}\times\frac{1}{7} + \frac{1}{4!}\times\frac{1}{9} - \cdots \\ &\triangleq S_4 + R_4,\end{aligned}$$

如果我们以 S_4 作为定积分的近似值, 则 R_4 就是由此而产生的误差, 这种误差就称为截断误差, 它是由我们的近似方法所造成的.

在计算 S_4 的值时, 假定我们保留小数点后 4 位有效数字, 则

$$S_4 = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{10} - \frac{1}{42} \approx 1.00000 - 0.33333 + 0.10000 - 0.023810 \approx 0.7429$$

这就是我们最后得到的近似值. 这里, 在计算 S_4 时所产生的误差就是舍入误差. □

1.2 误差的来源及基本概念

◆ 绝对误差：

定义 设 $\tilde{x}$ 是 x 的近似值，则称

$$\epsilon \triangleq \tilde{x} - x$$

为近似值 $\tilde{x}$ 的**绝对误差**，简称**误差**. 若存在 $\varepsilon > 0$ 使得

$$|\epsilon| = |\tilde{x} - x| \leq \varepsilon,$$

则称 ε 为**绝对误差限**，简称**误差限**.

在工程中，通常用 $x = \tilde{x} \pm \varepsilon$ 表示 $\tilde{x}$ 的误差限为 ε.

1.2 误差的来源及基本概念

✓ 关于误差和误差限的几点说明

- 绝对误差不是误差的绝对值，可能为正，也可能为负.
- 由于精确值通常是不知道的，因此绝对误差一般也是不可知的.
- 在做误差估计时，我们所求的通常是误差限；
- 误差限不唯一，越小越好；

- 近似值的精确程度不能仅仅看绝对误差，更重要的是看**相对误差**.

◆ 相对误差：

定义 设 $\tilde{x}$ 是 x 的近似值, 称

$$\epsilon_r \triangleq \frac{\tilde{x}-x}{x} \qquad \text{或} \qquad \epsilon_r \triangleq \frac{\tilde{x}-x}{\tilde{x}}$$

为近似值 $\tilde{x}$ 的 **相对误差**. 若存在 $\varepsilon_r > 0$ 使得

$$|\epsilon_r| \leq \varepsilon_r,$$

则称 ε_r 为**相对误差限**.

- 近似值的精确程度通常取决于**相对误差**的大小;
- 实际计算中我们所能得到的通常是相对误差限 (所能找到的最小上界);

1.2 误差的来源及基本概念

- 设有两个量 x = 100 ± 1，y = 1000 ± 2，求 x 与 y 的相对误差限。

解：$|e_r^*(x)| = |\frac{x^* - x}{x^*}| \leq \frac{1}{100} = 1\%$，所以用 100 来估计 x 的相对误差限为 1%。

$|e_r^*(y)| = |\frac{y^* - y}{y^*}| \leq \frac{2}{1000} = 0.2\%$，所以用 1000 来估计 y 的相对误差限为 0.2%。

1.2 误差的来源及基本概念

◆ 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，则称x*有n位有效数字。

x*有n位有效数字的标准形式:

$$x^* = \pm(0.a_1a_2\cdots a_n)\times 10^m$$

若其绝对误差限满足 $\left|x-x^*\right| \le \frac{1}{2}\times 10^{m-n}$ ，

则称近似值**x*有n为有效数字**，**其中m为整数，a_i属于数字0-9，且$a_1 \neq$ 0**。

- **例：** e的近似值2.71828具有 $\boxed{6}$位有效数字

$$2.71828 = \left(2\times10^{-1} + 7\times10^{-2} + 1\times10^{-3} + 8\times10^{-4} + 2\times10^{-5} + 8\times10^{-6}\right)\times10$$

这里 $m = 1, n = 6$，而

$$\left|e - 2.71828\right| = 0.000001828\cdots < \frac{1}{2}\times10^{-5}$$

- 有效数字不但给出了近似值的大小，而且还给出了它的绝对误差限

1.2 误差的来源及基本概念

思考：

$x = 3.14159265\cdots$ 的两个近似值，$x_1 = 3.1415$ 和 $x_2 = 3.1416$ 各具有几位有效数字?

解：$|x_1 - x| = 0.00009265\cdots = 10^{-4} * 0.9265$，因为 $10^{-4} * 0.5 < 10^{-4} * 0.9265 < 10^{-3} * 0.5$，所以 3.1415 具有 4 位有效数字。
类似的，3.1416 具有 5 位有效数字。

按四舍五入原则得到的数字都是有效数字.

一个数末尾的 0 不可以随意添加或省略.

1.2 误差的来源及基本概念

- 有效数字与绝对误差，相对误差有如下性质：

性质1：若某数x^*的近似值x有n位有效数字，那么，这个近似值x的绝对误差限为

$$\left|x^* - x\right| \le \frac{1}{2} \cdot 10^{m-n}$$

- 由此看出，当m相同时，n越大，则m-n越小，从而有效位数越多，其绝对误差限越小。

性质2： 用 $x=\pm(0.a_1a_2\cdots a_n)\,10^m$ 表示的近似数x，若具有n位有效数字，则其**相对误差限**为

$$|E_r(x)|\le\frac{1}{2a_1}\cdot 10^{-(n-1)}$$

反之，若x的**相对误差限**为

$$|E_r(x)|\le\frac{1}{2(a_1+1)}\cdot 10^{-(n-1)}$$

则x至少具有n位有效数字。

- 证：由性质1知，若x具有n位有效数字，则

$$\left|x^{*}-x\right|\leq\frac{1}{2}\cdot10^{m-n}$$

从而

$$\left|E_{r}(x)\right|=\left|\frac{x^{*}-x}{x}\right|\leq\frac{1}{2|x|}\cdot10^{m-n}\leq\frac{10^{m-n}}{2a_{1}\cdot10^{m-1}}$$

$$=\frac{1}{2a_{1}}\cdot10^{-(n-1)}$$

反之，若x的相对误差为

$$\left|E_{r}(x)\right|\leq\frac{1}{2(a_{1}+1)}\cdot10^{-(n-1)},$$

1.2 误差的来源及基本概念

- 证（续）：由于 $|E(x)| = |x| \cdot |E_r(x)|$, $|x| < (a_1+1) \cdot 10^{m-1}$

故

$$|E(x)| \le (a_1+1) \cdot 10^{m-1} \cdot \frac{1}{2(a_1+1)} \cdot 10^{-(n-1)} = \frac{1}{2} \cdot 10^{m-n}$$

所以x至少具有n位有效数字。

- 由性质2可以看出，有效位数越多，相对误差限越小。若近似数的有效位数越多，代替准确值的精度越高。

1.2 误差的来源及基本概念

➢误差估计：四则运算：

设 $\tilde{x}_1$ 和 $\tilde{x}_2$ 的误差限分别为 $\varepsilon(\tilde{x}_1)$ 和 $\varepsilon(\tilde{x}_2)$, 则

$$\varepsilon(\tilde{x}_1 \pm \tilde{x}_2) \le \varepsilon(\tilde{x}_1) + \varepsilon(\tilde{x}_2),$$

$$\varepsilon(\tilde{x}_1\tilde{x}_2) \le |\tilde{x}_2|\varepsilon(\tilde{x}_1) + |\tilde{x}_1|\varepsilon(\tilde{x}_2) + \varepsilon(\tilde{x}_1)\varepsilon(\tilde{x}_2) \lessapprox |\tilde{x}_2|\varepsilon(\tilde{x}_1) + |\tilde{x}_1|\varepsilon(\tilde{x}_2),$$

$$\varepsilon\left(\frac{\tilde{x}_1}{\tilde{x}_2}\right) \lessapprox \frac{|\tilde{x}_2|\varepsilon(\tilde{x}_1) + |\tilde{x}_1|\varepsilon(\tilde{x}_2)}{|\tilde{x}_2|^2}.$$

1.2 误差的来源及基本概念

➢函数误差：

$f(x)-f(\tilde{x})=f'(\tilde{x})(x-\tilde{x})+\dfrac{f''(\xi)}{2}(x-\tilde{x})^2$，$\xi$介于$x,\tilde{x}$之间

$f(\tilde{x})-f(x)=f'(\tilde{x})(\tilde{x}-x)-\dfrac{f''(\xi)}{2}(\tilde{x}-x)^2$

一般地，设 $\tilde{x}$ 是 x 的近似值，若 $f(x)$ 可导，则有

$$f(\tilde{x})-f(x)=f'(x)(\tilde{x}-x)+\frac{f''(\xi)}{2}(\tilde{x}-x)^2.$$

由于 $\tilde{x}-x$ 相对较小，所以当 $|f''(x)|$ 与 $|f'(x)|$ 的比值不是很大时，我们可以忽略二阶项，即

$$|f(\tilde{x})-f(x)|\approx|f'(x)|\cdot|\tilde{x}-x|.$$

因此，可得函数值的误差限

$$\varepsilon(f(\tilde{x}))\approx|f'(x)|\,\varepsilon(\tilde{x})\approx|f'(\tilde{x})|\,\varepsilon(\tilde{x}).$$

例 设 $x>0$, x 的相对误差是 δ, 试估计 $\ln x$ 的误差.

解. 设 $\tilde{x}$ 是 x 的近似值. 由题意可知, 相对误差为

$$\left|\frac{\tilde{x}-x}{\tilde{x}}\right|=\delta.$$

所以误差 $|\varepsilon(\tilde{x})|=|\tilde{x}-x|=|\tilde{x}|\cdot\delta$. 设 $f(x)=\ln(x)$, 则

$$\varepsilon(f(\tilde{x}))\approx|f'(\tilde{x})|\varepsilon(\tilde{x})=\left|\frac{1}{\tilde{x}}\right|\cdot|\tilde{x}|\cdot\delta=\delta,$$

即 $\ln x$ 的误差约为 δ.

1.2 误差的来源及基本概念

关于多元函数 $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, 我们可以得到类似的结论:

$$\varepsilon(f(\tilde{x})) \approx \sum_{k=1}^{n} \left| \frac{\partial f(\tilde{x})}{\partial x_k} \right| \varepsilon(\tilde{x}_k),$$

其中 $\tilde{x} = [\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \ldots, \tilde{x}_n]^{\mathsf{T}}$ 是 $x = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^{\mathsf{T}}$ 的近似值.

例：

测得某场地的长 L 和宽 D 分别为：L ∗ = 110m, D∗ = 80m。其测量误差限分别为 0.2m 和 0.1m。试求面积 S 的绝对误差限和相对误差限。

例 测得某场地的长 x 和宽 y 分别为: $\tilde{x} = 110\text{m}$, $\tilde{y} = 80\text{m}$, 其测量误差限分别为 0.2m 和 0.1m. 试求面积 $S = x \times y$ 的绝对误差限和相对误差限.

解. 由于 $\varepsilon(\tilde{x}) = 0.2\text{m}$, $\varepsilon(\tilde{y}) = 0.1\text{m}$, 故

$$\begin{aligned}\varepsilon(\tilde{S}) &\approx \left|\frac{\partial S(\tilde{x}, \tilde{y})}{\partial x}\right| \varepsilon(\tilde{x}) + \left|\frac{\partial S(\tilde{x}, \tilde{y})}{\partial y}\right| \varepsilon(\tilde{y}) \\ &= |\tilde{y}| \cdot \varepsilon(\tilde{x}) + |\tilde{x}| \cdot \varepsilon(\tilde{y}) \\ &= 80 \times 0.2 + 110 \times 0.1 = 27(\text{m}^2).\end{aligned}$$

相对误差限

$$\varepsilon_r(\tilde{S}) = \frac{\varepsilon(\tilde{S})}{|\tilde{S}|} \approx \frac{27}{110 \times 80} \approx 0.0031.$$

$\square$

1.3 误差分析原则

1. 避免绝对值较小的数做除数
2. 要避免两相近数相减
3. 要防止大数“吃掉”小数
4. 注意简化计算步骤，减少运算次数

1.3 误差分析原则

1. 避免绝对值非常小的数做除数

可能会产生溢出, 即超出计算机所能表示的数的范围. 特别需要注意的是, 尽量不要用很小的数作为除数, 否则为放大分子的误差。（当商过大时，商作为一个大数可能吃掉参与运算的一些小数，进而放大商的绝对误差。）

► 如果两个数相除, 一般情况下建议把绝对值小的数作为分子, 这在后面的算法 中会经常遇到。

1.3 误差分析原则

2.要避免两相近数相减

若有两个相近的数相减，则会损失有效数字。

如 0.12346 – 0.12345 = 0.00001, 两个操作数都有 5 位有效数字, 但计算结果却只有 1 位有效数字。

例 计算 $\sqrt{9.01}-3$, 计算过程中保留 3 位有效数字.

解. 如果直接计算的话, 可得

$$\sqrt{9.01}=3.0016662039607\cdots\approx 3.00.$$

所以 $\sqrt{9.01}-3\approx 0.00$, 一个有效数字都没有!

但如果换一种计算方法, 如

$$\sqrt{9.01}-3=\frac{9.01-3^2}{\sqrt{9.01}+3}\approx\frac{0.01}{3.00+3}\approx 0.00167.$$

通过精确计算可知 $\sqrt{9.01}-3=0.0016662039607\cdots$. 因此第二种计算能得到三位有效数字! $\square$

1.3 误差分析原则

如何避免两相近数相减？

通过各种等价公式来计算两个相近的数相减，是避免有效数字损失的有效手段之一.

下面给出几个常用的等价公式:

$$\sqrt{x+\varepsilon}-\sqrt{x}=\frac{\varepsilon}{\sqrt{x+\varepsilon}+\sqrt{x}}$$

$$\ln(x+\varepsilon)-\ln(x)=\ln\left(1+\frac{\varepsilon}{x}\right)$$

$$1-\cos(x)=2\sin^2\frac{x}{2},\quad |x|\ll 1$$

$$\mathrm{e}^x-1=x\left(1+\frac{1}{2}x+\frac{1}{6}x^2+\cdots\right),\quad |x|\ll 1$$

例 计算 $y=\ln 2$.

Demo_1_1_ln.m

方法一: 利用 $f(x)=\ln(1+x)$ 的 Taylor 展开

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

将 $x=1$ 代入后计算结果为

n	1	2	3	4	5	10	50	100
S_n	1	0.5	0.833	0.583	0.783	0.646	0.683	0.688
误差	3.1E-1	1.9E-1	1.4E-1	1.1E-1	9.0E-2	4.8E-2	9.9E-3	5.0E-3

计算到第 100 项, 误差仍有 0.05.

例 计算 $y = \ln 2$.

方法二：利用 $f(x) = \ln\left(\frac{1+x}{1-x}\right)$ 的 Taylor 展开

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

将 $x = 1/3$ 代入后计算结果为

n	1	2	3	4	5	10
S_n	0.667	0.691	0.693	0.693	0.693	0.693
$\lvert S_n - \ln 2\rvert$	2.6E-2	1.8E-3	1.4E-4	1.2E-5	1.1E-6	1.0E-11

计算到第 10 项，误差已经小于 10^{-10}！实际值为 $\ln 2 = 0.693147180559945$.

1.3 误差分析原则

3. 要防止大数“吃掉”小数

数值运算中参加运算的数有时数量级相差很大，而计算机位数有限，如不注意运算次序就可能出现大数“吃掉”小数的现象，影响计算结果可靠性。

如 $(10^9+10^{-9}-10^9)/10^{-9}$, **直接计算的话, 结果为** 0.

另外, 在对一组数求和时, 建议按照绝对值从小到大求和.

例：计算 $a+b+c$，$a=63281312, b=0.1, c=0.9$

解：如果按 $(a+b)+c$ 次序来编程，按照加法浮点运算的对阶规则，应有

$$0.63281312\times10^8+0.000000001\times10^8+0.000000009\times10^8$$

在8位计算机上计算时，后两数变为了“机器零”，计算结果为63281312。

如果改变计算次序为 $(b+c)+a$ ，则有

$$(0.1+0.9)+63281312=1+63281312=63281313$$

4. 注意简化计算步骤，减少运算次数

尽量减少运算次数, 从而减少误差的积累。

例 多项式计算. 设多项式

$$p(x) = 5x^5 + 4x^4 + 3x^3 + 2x^2 + 2x + 1.$$

试计算 $p(3)$ 的值.

方法一: 直接计算

$$p(3) = 5 \times 3^5 + 4 \times 3^4 + 3 \times 3^3 + 2 \times 3^2 + 2 \times 3 + 1.$$

需要做 15 次乘法和 5 次加法.

方法二: 当计算 x^k 时, 由于前面已经计算出 x^{k-1}, 因此只需做一次乘法. 这样整个计算过程可以减少到 9 次乘法和 5 次加法.

方法三: 有没有更快的?

1.3 误差分析原则

在计算多项式的值时，我们都是将多项式改写成

$$\begin{aligned} p(x) &= a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + a_{n-2}x^{n-2} + \cdots + a_1 x + a_0 \\ &= ((\cdots((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \cdots)x + a_1)x + a_0. \end{aligned}$$

这里利用了嵌套思想，如果直接计算的话，需要 $\frac{n(n+1)}{2}$ 次乘法和 n 次加法. 但如果采用秦九韶算法的话，只需做 n 次乘法和 n 次加法.

这种计算方法就是著名的 秦九韶算法 (1247)，五百多年后，英国数学家 Horner (1819) 重新发现了该公式，因此西方也称为 Horner 算法.

方法三：我们可以将多项式改写为

$$p(x) = ((((5x+4)x+3)x+2)x+2)x+1.$$

这样就只需做 5 次乘法和 5 次加法. 显然这是更佳的计算方案.

1.4 小结

◆**本章要求：**

1. 熟悉数值分析是以计算机为工具求近似解的数值方法；
2. 熟悉绝对误差（限），相对误差（限）及有效数字概念；
3. 熟悉选用算法应遵循的原则。

《数值分析与计算软件》线上线下交互信息

课程微信群

Group: 2024秋季数值分析
课程群

Valid until 9/10 and will update upon joining
group