第1章 绪论

张利军
zlj@nju.edu.cn
http://cs.nju.edu.cn/zlj

目录

- 研究对象与特点
- 误差来源与误差分析
- 误差的基本概念
- 误差分析的方法与原则

数值分析

- 研究各种数学问题求解的数值计算方法

电子计算机成为数值计算的主要工具

- 研究适合于计算机使用的数值计算方法

用计算机解决科学计算问题的过程

实际问题 → 数学模型 → 数值计算方法 → 程序设计 → 上机计算

应用数学　　计算数学/数值分析

数值分析

- 研究用计算机解决数学问题的数值方法及其理论
  - 函数的数值逼近、数值微分与数值积分、非线性方程数值解、数值线性代数、微分方程数值解等
  - 数学的分支，不止研究数学本身，理论与计算紧密结合，着重研究数学问题的数值方法及其理论
- 也称为计算方法
  - 内容丰富，研究方法深刻，有自身理论体系
  - 既有纯数学的高度抽象性与严密科学性，又有应用的广泛性与实际试验的高度技术性
  - 与计算机应用密切结合、实用性很强的数学课程

线性方程组数值解

- 线性代数
  - 介绍解存在的唯一性及有关理论、精确解法
  - 无法在计算机上求解大规模的方程组
- 数值分析
  - 研究适合计算机使用的、满足精度要求的、计算省时间的有效算法及其相关的理论
  - 根据计算机容量、字长、速度等指标，研究具体求解步骤和程序设计技巧
  - 有的方法在理论上虽不够严格，但通过实际计算、对比分析等手段，证明有效，也应采用

特点

1. 面向计算机，要根据计算机特点提供实际可行的有效算法，即算法只能包括加、减、乘、除运算和逻辑运算
2. 有可靠的理论分析，能任意逼近并达到精度要求，对近似算法要保证收敛性和数值稳定性，还要对误差进行分析
3. 有好的计算复杂性．时间复杂性好是指节省时间，空间复杂性好是指节省存储量
4. 有数值实验，通过实验证明它是行之有效的

中国计算数学的发展

- 1955 周恩来领导10年科技规划，提出发展几个新技术，包括计算技术（计算机，程序设计，计算数学），半导体技术，自动化技术。

- 1956 成立计算技术研究所筹备处，主任华罗庚，手下有两个组（计算机与计算数学）。在其领导下于数学所成立计算方法讨论班。

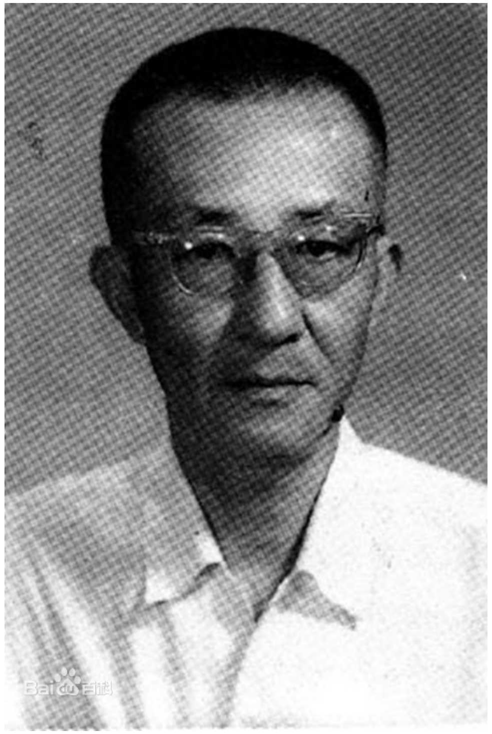
- 1958 计算所成立，带半军事性质，并且与苏联合作在中科院计算研究所造出104机。北大、吉大、复旦、南大相继成立计算数学专业。

中国计算数学的发展

- 1958 “计算数学 ” 专业
- 1984 “计算数学及其应用软件”专业
  - 加强计算机课程的分量
- 1998 “信息与计算科学”专业
  - 加强信息课程的分量

中国计算数学的发展

- 冯康（1920年9月9日－1993年8月17日）
  - 1944年冯康毕业于国立中央大学
  - 有限元方法
  - 辛几何算法



https://baike.baidu.com/item/%E5%86%AF%E5%BA%B7/47515?fr=aladdin

中国计算数学的发展

- 冯康（1920年9月9日－1993年8月17日）

中国近代数学能够超越西方或与之并驾齐驱的主要原因有三个，主要是讲能够在数学历史上很出名的有三个：一个是陈省身教授在示性类方面的工作，一个是华罗庚在多复变函数方面的工作，一个是冯康在有限元计算方面的工作。

（1997年春丘成桐在清华大学所作题为“中国数学发展之我见”的报告）

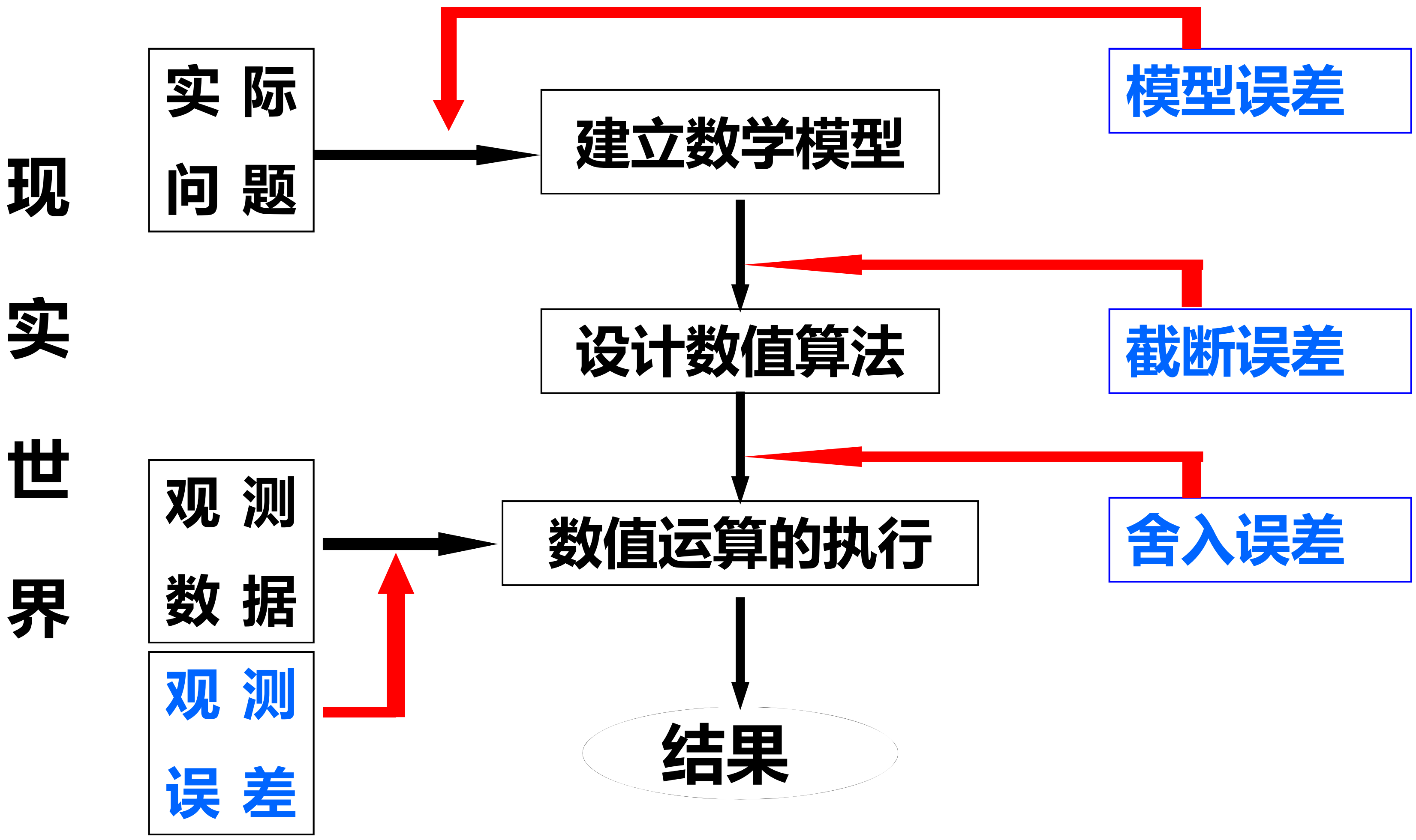
研究分支

1. 微分方程数值解是信息与计算数学的主要分支。（气象、物理、力学等诸多领域）
2. 数值代数和最优化是科学计算、运筹学的基础学科。（在材料科学、生命科学、信息科学、交通、通讯以及金融中的计算问题）
3. 反问题无疑是最热门的方向之一。（图像处理、信号处理）
4. 计算数学的应用型分支：与具体的应用结合形成新的学科，比如说计算流体力学、计算空气动力学、计算力学、计算物理

目录

- 研究对象与特点
- 误差来源与误差分析
- 误差的基本概念
- 误差分析的方法与原则

误差来源



误差来源

- 1. 模型误差
  - 数学模型与实际问题之间出现的误差
  - 只有实际问题提法正确，建立数学模型时又抽象、简化得合理，才能得到好的结果
  - 这种误差难以用数量表示，通常都假定数学模型是合理的，这种误差可忽略不计
- 2. 观测误差
  - 在数学模型中往往还有一些根据观测得到的物理量，如温度、长度、电压等
  - 由观测产生的误差，本课程也不讨论这种误差

误差来源

- 3. 截断误差/方法误差
  - 当数学模型不能得到精确解时，通常要用数值方法求它的近似解
  - 近似解与精确解之间的误差
  - 例：用Taylor多项式近似函数$f(x)$

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

截断误差（泰勒余项定理）：

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1}$$

其中ξ在0与x之间

误差来源

- 3. 截断误差/方法误差
  - 真实函数

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots$$

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots$$

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

误差来源

3. 截断误差/方法误差

- 真实函数

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots$$

- 近似函数

$$P_n(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!}$$

- 截断误差为

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

误差来源

4. 舍入误差

- 由于计算机的字长有限，原始数据在计算机上表示会产生误差
- 计算过程又可能产生新的误差
- 例：用3.14159近似代替π，产生的误差

$$R = \pi - 3.14159 = 0.0000026 \ldots$$

就是舍入误差

$$\sqrt{2} = 1.41421356237 \cdots \approx 1.4142$$

$$\ln(2) = 0.69314718056 \cdots \approx 0.6931$$

多种误差同时出现

- 例：近似计算$\int_0^1 e^{-x^2}\,\mathrm{d}x$ （$=0.747\ldots$）
  - 将e^{-x^2}作Taylor展开后再积分：

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,\mathrm{d}x=\int_0^1\left(1-x^2+\frac{x^4}{2!}-\frac{x^6}{3!}+\frac{x^8}{4!}-\cdots\right)\mathrm{d}x$$

$$=\underbrace{1-\frac{1}{3}+\frac{1}{2!}\times\frac{1}{5}-\frac{1}{3!}\times\frac{1}{7}}_{S_4}+\underbrace{\frac{1}{4!}\times\frac{1}{9}-\cdots}_{R_4}$$

多种误差同时出现（续）

- 取$\int_0^1 e^{-x^2}\,\mathrm{d}x \approx S_4$，则$R_4 = \frac{1}{4!}\times\frac{1}{9} - \frac{1}{5!}\times\frac{1}{11} + \cdots$ 称为截断误差
- 这里$|R_4| < \frac{1}{4!}\times\frac{1}{9} < 0.005$

$$S_4 = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{10} - \frac{1}{42}$$

$$\approx 1 - 0.333 + 0.1 - 0.024 = 0.743$$

- 舍入误差$< 0.0005 \times 2 = 0.001$
- 总体误差$< 0.005 + 0.001 = 0.006$

误差分析

- 误差分析/估计
  - 研究计算结果的误差是否满足精度要求
  - 本课程主要讨论算法的截断误差与舍入误差

- **例1.1** 计算$I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n e^x \,\mathrm{d}x \ (n = 0,1,\ldots)$，并估计误差
  - 分部积分公式：

$$\int_a^b u(x)v'(x)\,dx = [u(x)v(x)]_a^b - \int_a^b u'(x)v(x)\,dx$$

例1.1（续）

- 令 $u(x) = x^n, v(x) = e^x$，有：

$$I_n = e^{-1} \int_0^1 x^n e^x \,\mathrm{d}x$$

$$= e^{-1}\left([x^n e^x]_0^1 - n\int_0^1 x^{n-1} e^x \,dx \right)$$

$$= e^{-1}\left(e^1 - n\int_0^1 x^{n-1} e^x \,dx \right)$$

$$= 1 - nI_{n-1}$$

例1.1（续）

- 计算I_n的递推公式：

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

$$I_0 = \mathrm{e}^{-1}\int_0^1 e^x \,\mathrm{d}x = 1 - e^{-1}$$

- 为计算I_0，先计算e^{-1}

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

并取$k = 7$，用四位小数计算，则得$e^{-1} \approx 0.3679$，截断误差

$$R_7 = \left|e^{-1} - 0.3679\right| \leq \frac{1}{8!} < \frac{1}{4} \times 10^{-4}$$

例1.1（续）

- 初始值$I_0 \approx 0.6321 = \tilde{I}_0$，用先前递推公式

方案（A） $\begin{cases} \tilde{I}_0 = 0.6321, \\ \tilde{I}_n = 1 - n\tilde{I}_{n-1} \ (n = 1,2,\ldots) \end{cases}$

n	$\tilde{I}_n$ （A）	I_n^* （B）	n	$\tilde{I}_n$ （A）	I_n^* （B）
0	0.6321	0.6321	5	0.1480	0.1455
1	0.3679	0.3679	6	0.1120	0.1268
2	0.2642	0.2643	7	0.2160	0.1121
3	0.2074	0.2073	8	-0.728	0.1035
4	0.1704	0.1708	9	7.552	0.0684

例1.1（续）

- $\tilde{I}_8 < 0$，与$\tilde{I}_n > 0$相矛盾
- $\tilde{I}_9 = 7.552$，同样有问题

$$\frac{e^{-1}}{n+1} = e^{-1}\left(\min_{0\le x\le 1} e^x\right)\int_0^1 x^n \, \mathrm{d}x < I_n$$

$$I_n < e^{-1}\left(\max_{0\le x\le 1} e^x\right)\int_0^1 x^n \, \mathrm{d}x = \frac{1}{n+1}$$

- 初值$\tilde{I}_0$ 有误差$E_0 = I_0 - \tilde{I}_0$
- 各步计算的误差$E_n = I_n - \tilde{I}_n$满足关系

$$E_n = -nE_{n-1}\ (n = 1,2,\ldots) \Rightarrow E_n = (-1)^n n!\,E_0$$

例1.1（续）

- 例如$n=8$，若$|E_0|=\frac{1}{2}\times 10^{-4}$，则$|E_8|=8!\times |E_0|>2$
- 当$n=9$时，根据前面的上下界：

$$\frac{e^{-1}}{10}<I_9<\frac{1}{10}$$

- 粗略取

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

根据递推公式

方案（B） $$\begin{cases} I_9^*=0.0684, \\ I_{n-1}^*=\dfrac{1}{n}\left(1-I_{\mathrm{n}}^*\right)\ (n=9,8,\ldots 1) \end{cases}$$

例1.1（续）

差之毫厘、谬以千里

- I_0^*与I_0的误差不超过10^{-4}。由于$|E_0^*| = \frac{1}{n!}|E_n^*|$，$E_0^*$比$E_n^*$缩小了$n!$倍。尽管$E_9^*$较大，但误差逐步缩小
- 方案（A）计算时，初值$\tilde{I}_0$较准确，但误差逐步扩大

n	$\tilde{I}_n$ （A）	I_n^* （B）	n	$\tilde{I}_n$ （A）	I_n^* （B）
0	0.6321	0.6321	5	0.1480	0.1455
1	0.3679	0.3679	6	0.1120	0.1268
2	0.2642	0.2643	7	0.2160	0.1121
3	0.2074	0.2073	8	−0.728	0.1035
4	0.1704	0.1708	9	7.552	0.0684

目录

- 研究对象与特点
- 误差来源与误差分析
- 误差的基本概念
- 误差分析的方法与原则

误差与误差限

- **定义1.1** 设x为准确值，x^*为x的近似值，称

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

为近似值的绝对误差，简称误差

  - e^*可正可负：当绝对误差为正时，叫做强近似值；当绝对误差为负时，叫做弱近似值
  - 通常准确值x和误差e^*都是未知的

- 估计出误差的绝对值不超过某正数ε^*，称为近似值的误差限
  - 总是正数
  - $|x - x^*| \le \varepsilon^*$，也可表示为$x = x^* \pm \varepsilon^*$

误差与误差限

- 例：用米刻度的米尺测量一长度x（单位：mm）
  - 读出和该长度接近的刻度x^*，x^*是x的近似值，它的误差限是0.5，于是

$$|x^* - x| \leq 0.5$$

  - 如读出的长度为765，则有

$$|765 - x| \leq 0.5$$

从上式仍不知道准确的x是多少，但知道

$$764.5 \leq x \leq 765.5$$

即$x \in [764.5, 765.5]$

误差的局限

- 误差限的大小不能完全表示近似值的好坏
  - 例：有两个量 $x = 10 \pm 1$，$y = 1000 \pm 5$，则

$$x^* = 10,\ \varepsilon_x^* = 1,\ y^* = 1000,\ \varepsilon_y^* = 5$$

虽然ε_y^*比ε_x^*大4倍，但

$$\frac{\varepsilon_y^*}{y^*} = \frac{5}{1000} = 0.5\% < \frac{\varepsilon_x^*}{x^*} = \frac{1}{10} = 10\%$$

说明y^*近似y的程度比x^*近似x的程度好

- 在判断近似值好坏时，除考虑误差大小外，还应考虑准确值x本身的大小

相对误差

- 近似值的误差e^*与准确值x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}^*

- 由于x未知，通常取

$$e_{\mathrm{r}}^*=\frac{e^*}{x^*}=\frac{x^*-x}{x^*}$$

  - 当$e_{\mathrm{r}}^*=e^*/x^*$较小时，近似合理

$$\frac{e^*}{x}-\frac{e^*}{x^*}=\frac{e^*(x^*-x)}{x^*x}=\frac{(e^*)^2}{x^*(x^*-e^*)}=\frac{(e^*/x^*)^2}{1-(e^*/x^*)}$$

相对误差限

- 相对误差也可正可负，它的绝对值上界称为相对误差限，记作ε_r^*

$$\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon^*}{|x^*|}$$

  - ε^*为近似值的误差限
  - 例：有两个量$x = 10 \pm 1$，$y = 1000 \pm 5$

$$\frac{\varepsilon_x^*}{|x^*|} = \frac{1}{10} = 10\% > \frac{\varepsilon_y^*}{|y^*|} = \frac{5}{1000} = 0.5\%$$

所以，y^*近似y的程度比x^*近似x的程度好

四舍五入

- 当准确值x有多位数时，常常按四舍五入的原则得到x的前几位近似值x^*
- 例：$x = \pi = 3.14159265\cdots$
  - 取前3位，$x_3^* = 3.14$，$\varepsilon_3^* \le 0.002$
    $$e_3^* = |\pi - 3.14| \le 0.002 \le \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$
  - 取前5位，$x_5^* = 3.1416$，$\varepsilon_5^* \le 0.000008$
    $$e_5^* = |\pi - 3.1416| \le 0.000008 \le \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

误差都不超过末位数字的半个单位

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，就说x^*有n位有效数字
  - $x_3^* = 3.14$，3位有效数字
  - $x_5^* = 3.1416$，5位有效数字

有效数字

其他形式：$x^* = \pm 0.a_1 a_2 \ldots a_n \times 10^m$

- 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，就说x^*有n位有效数字
- 可以写成标准形式

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

$$= \pm a_1.a_2 \ldots a_n \times 10^m$$

  - 其中a_1是1到9中的一个数字；$a_2, \ldots, a_n$是0到9中的一个数字；m为整数，且

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

举例

- **例1.2** 按四舍五入原则写出下列各数具有五位有效数字的近似数

187.9325	0.03785551	8.000033	2.7182818
187.93	0.037856	8.0000	2.7183

- 例：$x=\sqrt{3}\approx 1.732050808$，判断下面的有效数字有几位

近似值	有效数字	原因
1.73	3	$\left\|\sqrt{3}-1.73\right\| < 0.5\times 10^{-2} = 0.5\times 10^{0-3+1}$
1.7321	5	$\left\|\sqrt{3}-1.7321\right\| < 0.5\times 10^{-4} = 0.5\times 10^{0-5+1}$
1.7320	4	$\left\|\sqrt{3}-1.7320\right\| > 0.5\times 10^{-4} = 0.5\times 10^{0-5+1}$

举例

- 例1.2 按四舍五入原则写出下列各数具有五位有效数字的近似数

187.9325	0.03785551	8.000033	2.7182818
187.93	0.037856	8.0000	2.7183

- 例：$x=\sqrt{3}\approx 1.732050808$，判断下面的有效数字有几位

近似值	有效数字	原因
1.73	3	$\left\lvert\sqrt{3}-1.73\right\rvert<0.5\times 10^{-2}=0.5\times 10^{0-3+1}$
1.7321	5	$\left\lvert\sqrt{3}-1.7321\right\rvert<0.5\times 10^{-4}=0.5\times 10^{0-5+1}$
1.7320	4	$\left\lvert\sqrt{3}-1.7320\right\rvert<0.5\times 10^{-3}=0.5\times 10^{0-4+1}$

例1.3

- 重力常数g，如果以$\mathrm{m/s^2}$为单位，$g \approx 9.80\ \mathrm{m/s^2}$；如果以$\mathrm{km/s^2}$为单位，$g \approx 0.00980\ \mathrm{km/s^2}$，它们都具有3位有效数字
  - 按第一种写法
    $$|g - 9.80| \le \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \frac{1}{2} \times 10^{0-3+1}$$
  - 按第二种写法
    $$|g - 0.00980| \le \frac{1}{2} \times 10^{-5} = \frac{1}{2} \times 10^{-3-3+1}$$
  - 绝对误差限：$\frac{1}{2} \times 10^{-2}\ \mathrm{m/s^2}$、$\frac{1}{2} \times 10^{-5}\ \mathrm{km/s^2}$
  - 相对误差限：$\varepsilon_{\mathrm{r}}^* = 0.005/9.8$

讨论

- 重力常数g，如果以$\mathrm{m/s^2}$为单位，$g \approx 9.80\ \mathrm{m/s^2}$；如果以$\mathrm{km/s^2}$为单位，$g \approx 0.00980\ \mathrm{km/s^2}$，它们都具有3位有效数字
- 有效位数与小数点后有多少位数无关
- m相同的情况下，有效位数越多，绝对误差限越小

$$\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$$

- 绝对误差与误差限是有量纲的
- 相对误差与相对误差限是无量纲的

有效数字与相对误差限

- **定理1.1** 对于下面的近似数

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

  若x^*具有n位有效数字，则其相对误差限为

  $$\varepsilon_{\mathrm{r}}^* \le \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

  反之，若x^*的相对误差限满足

  $$\varepsilon_{\mathrm{r}}^* \le \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

  则x^*至少具有n位有效数字

- 有效位数越多，相对误差限越小

定理1.1（证明）

- 由x^*的形式可知

$$a_1 \times 10^m \le |x^*| \le (a_1+1)\times 10^m$$

- 当x^*有n位有效数字时，有

$$\frac{|x-x^*|}{|x^*|} \le \frac{0.5\times 10^{m-n+1}}{a_1\times 10^m} = \frac{1}{2a_1}\times 10^{-(n-1)}$$

- 反之，若$\varepsilon_{\mathrm{r}}^* \le \frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-(n-1)}$，有

$$|x-x^*| \le |x^*|\varepsilon_{\mathrm{r}}^*$$

$$\le (a_1+1)\times 10^m \times \frac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-(n-1)} = \frac{1}{2}\times 10^{m-n+1}$$

例1.4

- 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？
  - 根据**定理1.1**，知
  $$\varepsilon_{\mathrm{r}}^{*} \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$
  - 由$\sqrt{20} = 4.4\cdots$，知$a_1 = 4$
  - 易得当$n = 4$时，
  $$\varepsilon_{\mathrm{r}}^{*} \leq \frac{1}{8} \times 10^{-3} < 10^{-3} = 0.1\%$$
  - 此时，$\sqrt{20} \approx 4.472$

几点说明

1. 用四舍五入法取准确值的前n位作为近似值，则x^*必有n位有效数字
2. 有效数字位数相同的两个近似数，绝对误差限不一定相同
   - 单位可能不同，见例**1.3**
3. 将任何数乘以10^m(m为整数)，等于移动该数的小数点，并不影响它的有效数字的位数
4. 准确值被认为具有无穷位有效数字

数值运算的误差估计

- 两个近似数x_1^*和x_2^*，其误差限分别为$\varepsilon(x_1^*)$和$\varepsilon(x_2^*)$，则

$$\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) = \varepsilon(x_1^*) + \varepsilon(x_2^*)$$

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

$$\varepsilon\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) \approx \frac{|x_1^*|\varepsilon(x_2^*) + |x_2^*|\varepsilon(x_1^*)}{|x_2^*|^2} \quad (x_2^* \neq 0)$$

- 当自变量有误差时，计算函数值也会产生误差，其误差限可用**Taylor**展开式来估计

一元函数的误差估计

- 设$f(x)$是一元函数，x的近似值为x^*，以$f(x^*)$近似$f(x)$，根据Taylor展开

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

  - 其中ξ介于x与x^*之间
  - 上式取绝对值，得

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

- $f'(x^*)$与$f''(x^*)$的比值不太大，误差限$\varepsilon(f(x^*))$近似为

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

多元函数的误差估计

- 当f为多元函数时，计算$A = f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$
- 如果$x_1, x_2, \cdots, x_n$的近似值为$x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*$，则$A$的近似值为$A^* = f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$
  - 函数值A^*的误差$e(A^*)$由Taylor展开得

$$e(A^*) = A^* - A = f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*) - f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$$

$$\approx \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)}{\partial x_k} \right) (x_k^* - x_k) = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* e_k^*$$

多元函数的误差估计

- 当f为多元函数时，计算$A=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$
- 如果$x_1,x_2,\cdots,x_n$的近似值为$x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*$，则A的近似值为$A^*=f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$
  - A^*的误差限为

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

  - A^*的相对误差限

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

多元函数的误差估计

- **例1.5** 已测得某场地长l的值为$l^* = 110\ \text{m}$，宽d的值为$d^* = 80\ \text{m}$，已知$|l - l^*| \le 0.2\ \text{m}$，$|d - d^*| \le 0.1\ \text{m}$，试求面积$S = ld$的绝对误差限和相对误差限
  - 因$\frac{\partial S}{\partial l} = d,\ \frac{\partial S}{\partial d} = l$，由多元函数误差限公式，知

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

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

$\varepsilon(l^*) = 0.2\ \text{m}$，$\varepsilon(d^*) = 0.1\ \text{m}$

多元函数的误差估计

- **例1.5** 已测得某场地长l的值为$l^* = 110\ \mathrm{m}$，宽d的值为$d^* = 80\ \mathrm{m}$，已知$|l - l^*| \le 0.2\ \mathrm{m}$，$|d - d^*| \le 0.1\ \mathrm{m}$，试求面积$S = ld$的绝对误差限和相对误差限
  - 绝对误差限为

$$\varepsilon(S^*) \approx (80 \times 0.2 + 110 \times 0.1)\ \mathrm{m}^2 = 27\ \mathrm{m}^2$$

  - 相对误差限为

$$\varepsilon_{\mathrm{r}}(S^*) = \frac{\varepsilon(S^*)}{|S^*|} = \frac{\varepsilon(S^*)}{l^* d^*} \approx \frac{27}{8800} = 0.31\%$$

目录

- 研究对象与特点
- 误差来源与误差分析
- 误差的基本概念
- 误差分析的方法与原则

误差分析面临的挑战

- 实际工程或科学计算问题往往要运算千万次
  - 每步都作误差分析是不可能的
  - 误差积累有正有负，绝对值有大有小，都按最坏情况估计得到的结果比实际误差大得多
- 概率分析法
  - 将数据和运算中的舍入误差视为适合某种分布的随机变量，然后确定计算结果的误差分布
- 误差定性分析
  - 数值稳定性：运算过程舍入误差不增长的计算公式是数值稳定的，否则是不稳定的

误差定性分析

- 例1.1中 方案（A）：数值不稳定的
- 例1.1中 方案（B）：数值稳定的
- 研究一个计算公式是否稳定
  - 假定初始值有误差ε_0，中间不再产生新误差，考察由ε_0引起的误差积累是否增长，如不增长就认为是稳定的，否则是不稳定的
  - 对于稳定的计算公式，不具体估计舍入误差积累也可相信它是可用的，误差限不会太大
  - 不稳定的公式通常就不能使用，如要使用，其计算步数也只能很少，并且注意控制累计误差

1. 要避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法

- 用绝对值小的数作除数，舍入误差会增大
- 计算$\frac{x}{y}$，若$0 < |y| \ll |x|$

$$\varepsilon\left(\frac{x}{y}\right) \approx \frac{|x|\varepsilon(y) + |y|\varepsilon(x)}{|y|^2} = \frac{|x|\varepsilon(y)}{|y|^2} + \frac{\varepsilon(x)}{|y|}$$

- 表明当$|y|$相对太小时，商的绝对误差可能很大

例1.6 （不合适）

- 线性组 $\begin{cases} 0.00001x_1 + x_2 = 1 \\ 2x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$ 的准确解为

$$x_1 = \frac{200000}{399999} = 0.50000125,$$

$$x_2 = \frac{199998}{199999} = 0.999995.$$

- 四位浮点十进制数下用消去法求解

$$\begin{cases} 10^{-4} \times 0.1000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.1000 & ① \\ 10^1 \times 0.2000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.2000 & ② \end{cases}$$

例1.6（续）

$$\begin{cases} 10^{-4} \times 0.1000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.1000 & ① \\ 10^1 \times 0.2000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.2000 & ② \end{cases}$$

- ① $/(10^{-4} \times 0.1000/2)$，得

$$10^1 \times 0.2000x_1 + 10^6 \times 0.2000x_2 = 10^6 \times 0.2000 \quad ③$$

- ③ − ②，消除x_1，得

$$10^6 \times 0.2000x_2 - 10^1 \times 0.1000x_2 = (10^6 - 10^1) \times 0.2000$$

- 精度有限，忽略小数字

$$\begin{cases} 10^{-4} \times 0.1000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.1000 & ① \\ 10^6 \times 0.2000x_2 = 10^6 \times 0.2000 \end{cases}$$

- 由此解出$x_1 = 0$，$x_2 = 1$，显然严重失真

例1.6（续）

$$\begin{cases} 10^{-4} \times 0.1000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.1000 & ① \\ 10^1 \times 0.2000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.2000 & ② \end{cases}$$

- ②−①，消除x_2，得

$$10^1 \times 0.2000x_1 - 10^{-4} \times 0.1000x_1 = 10^1 \times 0.1000$$

- 精度有限，忽略小数字

$$\begin{cases} 10^1 \times 0.2000x_1 = 10^1 \times 0.1000 & \\ 10^1 \times 0.2000x_1 + 10^1 \times 0.1000x_2 = 10^1 \times 0.2000 & ② \end{cases}$$

- 由此解出$x_1 = 0.5$，$x_2 = 1$，基本正确

本例子阐述的是：大数“吃掉”小数

2. 要避免两相近数相减

- 两相近数相减会导致有效数字严重损失
  - 例$x = 532.65$，$y = 532.52$都有五位有效数字，但$x - y = 0.13$只有两位有效数字
- 令$z = y - x$，则$\varepsilon(z) = \varepsilon(y) + \varepsilon(x)$

$$\varepsilon_r(z) = \frac{\varepsilon(z)}{|z|} = \frac{\varepsilon(y) + \varepsilon(x)}{|z|}$$

$$= \frac{|y|}{|z|}\varepsilon_r(y) + \frac{|x|}{|z|}\varepsilon_r(x)$$

  - 当$y \approx x$时，$z \approx 0$，相对误差限会很大

例1.7

- 计算$A=10^7(1-\cos 2^\circ)$
  - 由于$\cos 2^\circ=0.9994$，直接计算得

    $$A=10^7\left(1-\cos 2^\circ\right)=10^7(1-0.9994)=6\times 10^3$$

    只有1位有效数字
  - 若利用$1-\cos x=2\sin^2\frac{x}{2}$计算，则有

    $$A=10^7\left(1-\cos 2^\circ\right)=2\times\left(\sin 1^\circ\right)^2\times 10^7=6.13\times 10^3$$

    有3位有效数字，其中 $\sin 1^\circ=0.0175$

解决方案

1. 改变计算公式

- 如果x_1和x_2很接近

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

- 当x很大时

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

- 若$f(x) \approx f(x^*)$，可用 Taylor 展开

$$f(x) - f(x^*) = f'(x^*)(x - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2}(x - x^*)^2 + \cdots$$

2. 增加有效位数进行运算

- 采用双倍字长，增加计算时间和内存

3. 要防止大数“吃掉”小数

- 大数“吃掉”小数的现象，影响结果可靠性
  - 参加运算的数有时数量级相差很大
  - 计算机位数有限，如不注意运算次序

- 解决方案
  - 按绝对值由小到大的顺序累加
  - 合理分组，保证数量级大致相同

例1.8

- 在五位十进制计算机上，计算

$$A = 52492 + \sum_{\mathrm{i}=1}^{1000} \delta_i$$

其中$0.1 \le \delta_i \le 0.9$

- 把运算的数写成规格化形式，有

$$A = 0.52492 \times 10^5 + \sum_{\mathrm{i}=1}^{1000} \delta_i$$

- 计算时要对阶，若取 $\delta_i = 0.9$，对阶时$\delta_i = 0.000009 \times 10^5$，在五位的计算机中表示为0

例1.8（续）

- 因此得到下面的不可靠结果

$$A = 0.52492 \times 10^5 + 0.000009 \times 10^5 + \cdots + 0.000009 \times 10^5$$

$\triangleq 0.52492 \times 10^5$ （$\triangleq$表示机器中相等）

- 如果先把数量级相同的1000个δ_i相加，最后再加上52492，这时有

$$0.1 \times 10^3 \le \sum_{i=1}^{1000} \delta_i \le 0.9 \times 10^3$$

$$0.001 \times 10^5 + 0.52492 \times 10^5 \le A \le 0.009 \times 10^5 + 0.52492 \times 10^5$$

$$52592 \le A \le 53392$$

4. 简化计算步骤、减少运算次数

- 减少运算次数
  - 节省计算机的计算时间，还能减小舍入误差
  - 是数值计算必须遵从的原则
- **例1.9** 计算x^{255}的值
  - 逐个相乘，要用254次乘法
  - 写成

$$x^{255}=x\cdot x^2\cdot x^4\cdot x^8\cdot x^{16}\cdot x^{32}\cdot x^{64}\cdot x^{128}$$

只需要14次乘法运算

秦九韶算法

- 例：计算多项式

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

  - 直接结算$a_k x^k$再逐项相加，一共需做

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

    次乘法和n次加法

  - 秦九韶算法

$$P_n(x) = (\ldots((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \cdots + a_1)x + a_0$$

秦九韶算法

- 例：计算多项式

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

  - 直接结算$a_k x^k$再逐项相加，一共需做

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

    次乘法和n次加法

  - 秦九韶算法：n次乘法和n次加法

$$\begin{cases} S_n = a_n \\ S_k = xS_{k+1} + a_k, \qquad (k = n-1, n-2, \ldots, 0) \\ P_n(x) = S_0 \end{cases}$$

秦九韶算法

- 秦九韶（约公元1202年－1261年），南宋末年人，出生于鲁郡（今山东曲阜一带人）

  秦九韶聪敏勤学，宋绍定四年（公元1231），秦九韶考中进士，先后担任县尉、通判、参议官、州守等职。

  他在政务之余，以数学为主线进行潜心钻研，且应用范围至为广泛：天文历法、水利水文、建筑、测绘、农耕、军事、商业金融等方面。

  秦九韶是我国古代数学家的杰出代表之一，他的《数书九章》概括了宋元时期中国传统数学的主要成就，尤其是系统总结和发展了高次方程的数值解法与一次同余问题的解法，提出了相当完备的“正负开方术”和“大衍求一术”。对数学发展产生了广泛的影响。

https://baike.baidu.com/item/%E7%A7%A6%E4%B9%9D%E9%9F%B6%E7%AE%97%E6%B3%95/449196

秦九韶算法

宋淳祐四至七年（公元1244至1247），秦九韶在湖州为母亲守孝三年期间，把长期积累的数学知识和研究所得加以编辑，写成了举世闻名的数学巨著《数书九章》。 书成后，并未出版。原稿几乎流失，书名也不确切。后历经宋、元，到明建国，此书无人问津，直到明永乐年间，在解缙主编《永乐大典》时，记书名为《数学九章》。又经过一百多年，经王应麟抄录后，由王修改为《数书九章》。

19世纪初，英国数学家威廉·乔治·霍纳重新发现并证明，后世称作**霍纳算法**（Horner's method、Horner scheme）。但是，19世纪英国传教士伟烈亚力Alexander Wylie. (1815–1887) 最早对霍纳的发明权提出质疑。……

他被国外科学史家称为是“他那个民族，那个时代，并且确实也是所有时代最伟大的数学家之一。

总结

- 研究对象与特点
  - 面向计算机、有可靠理论、容易计算、有实验
- 误差来源与误差分析
  - 截断误差、舍入误差
- 误差的基本概念
  - 误差限、相对误差限、有效数字、误差估计
- 误差分析的方法与原则
  - 数值稳定、四个原则