数值分析

Numerical Analysis

上海电力学院 数理学院

第一章 科学计算与Matlab

§1 科学计算的意义

1. 引言

- 《数值分析》是信息与计算科学专业的一门主要专业基础课程，同时也是许多理工科本科、研究生专业的专业课。
- “数值分析”又称为“数值计算方法”，它以各类数学问题的数值解法作为研究对象，并结合现代计算机技术为解决科学与工程中遇到的各类数学问题提供算法。

§1 科学计算的意义

- 随着计算机和数值计算方法的飞速发展，各学科领域从定性分析阶段走向定量分析阶段，同时新的计算性学科分支纷纷兴起，如计算物理、计算力学、计算化学、计算生物学、计算材料学、计算气象学等，而数值计算方法是借助计算机进行科学研究和解决实际问题的一种重要手段。

- 本课程是一门既有系统理论又有较强实践性的应用数学课，在航天航空、地质勘探、天气预报、水利工程、机械制造、桥梁设计等领域都有数值计算方法的踪影。

§1 科学计算的意义

📖教材 (Text Book)

现代数值数学和计算 同济大学计算数学教研室 编著

📖 参考书目 (Reference)

- 数值分析 李庆扬、王能超、易大义 编著
  北京：清华大学出版社, 2006, 7.
- 现代数值计算方法 肖悠南, 赵来军, 党林立编著
  北京: 北京大学出版社, 2003, 7.
- 数值分析基础 关治, 陆金甫编著
  北京: 高等教育出版社,1998, 5.

§1 科学计算的意义

例：线性方程组的求解

$$Ax = b \quad \Rightarrow \quad \text{Cramer法则}: x_i = D_i / D$$

$$n = 20,$$

计算量 9.7×10^{20} 次运算

100亿/秒，算3000年，而Gauss消元法2660次

理论与实际的差别，可行性的重要性

例如：理论"零"与实际"零"是有差别的

§1 科学计算的意义

例：数值微、积分

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx = ?$$

- 解析解？
  - 不能应用牛顿-克莱姆法则求出，因为被积函数的原函数不是初等函数。
- 可方便，快速求得数值解

例 非线性方程求根

考查 $f(x) = xe^{x} - 1$

$f(0) = -1 < 0,\ f(1) = e - 1 > 0.$

$f(x)$在$(0,1)$之间有一根，可证存在 唯一根

该根如何求出？

- 只是给出存在性，有点可惜！
- 可用数值方法求出根

§1 科学计算的意义

- 微分方程数值解：很多初值问题没有解析解，可采用相应的算法得到数值解
- 插值与最小二乘拟合

本课程主要研究计算机解决数学问题的数值方法和理论

§1 科学计算的意义

2. 解决具体的科学、工程问题的过程

实际问题

↓

数学模型

↓

数值方法

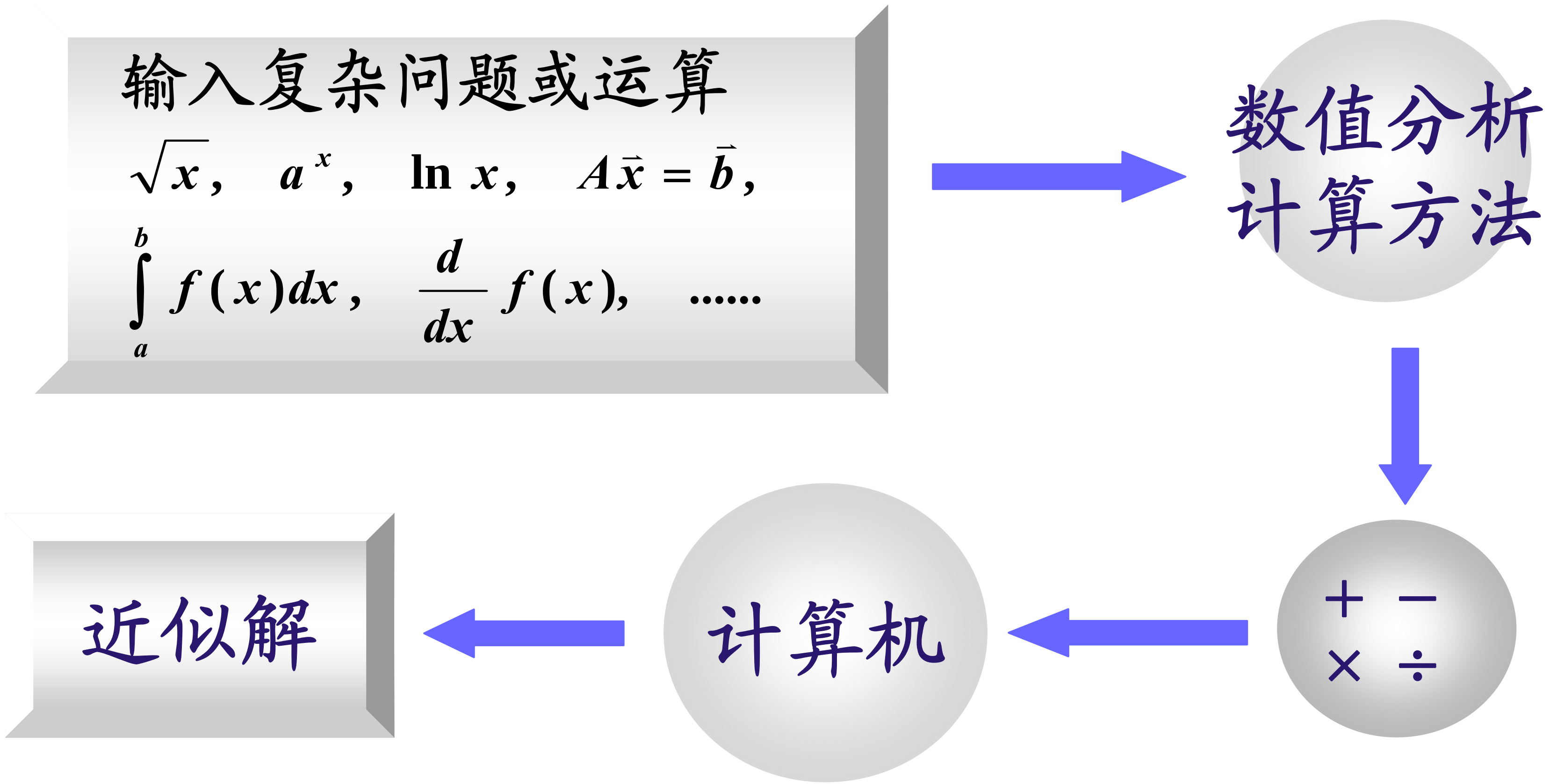
↓

计算机求结果

随着计算机的飞速发展，数值分析方法已深入到计算物理、计算力学、计算化学、计算生物学、计算经济学等各个领域。本课仅限介绍最常用的数学模型的最基本的数值分析方法。

数值计算方法是一种研究并解决数学问题的数值近似解方法

§1 科学计算的意义



输入复杂问题或运算
$\sqrt{x}$, a^x, $\ln x$, $A\vec{x}=\vec{b}$,
$\int_a^b f(x)dx$, $\frac{d}{dx}f(x)$, ……
数值分析
计算方法
$+$ $-$
$\times$ $\div$
计算机
近似解

3. 计算方法的特点

计算方法连接了模型到结果的重要环节

- ❑ **理论性**

✓理解方法的**建立思想、步骤和有关分析**

✓会套用公式进行简单应用，并**进行修改和创建公式**

- ❑ **实践性**

✓**上机编写程序实现计算方法**，第19-20周实习

❖具体例子

例：计算 $$S_n=\int_0^1\frac{x^n}{x+5}dx,\quad n=0,1,2,\cdots,8$$

公式一： $$S_n=\frac{1}{n}-5S_{n-1}$$

$$S_0=\int_0^1\frac{1}{x+5}dx=\ln 6-\ln 5\approx 0.182 \overset{\text{记为}}{=\!=} I_0^*$$

则初始误差 $|E_0|=|I_0-I_0^*|<0.5\times10^{-3}$

$$\int_0^1\frac{x^n}{1+5}dx<S_n<\int_0^1\frac{x^n}{0+5}dx$$

$$\therefore \frac{1}{6(n+1)}<S_n<\frac{1}{5(n+1)}$$

❖程序设计

```
S0=0.182      %0.18232155679395
S1=S0;
for k=1:8
   S1(k+1)=1/k-5*S(k);
end
S1'
```

❖ 公式一的计算结果

```
Ans=
   0.182000000000
   0.090000000000
   0.050000000000
   0.083333333333
  -0.166666666667
  1.033333333333
  -5.000000000000
   25.142857142858
  -125.589285714292
```

在计算机上根据数学公式编程不一定得到正确的需要的结果

❖具体例子

例：计算 $$S_n=\int_0^1\frac{x^n}{x+5}dx,\quad n=0,1,2,\cdots,8$$

公式二： $$S_{n-1}=\frac{1}{5n}-\frac{1}{5}S_n,n=8,7,\cdots,1$$

$$\because \frac{1}{6(n+1)}<S_n<\frac{1}{5(n+1)}$$

$$S_8=\left(\frac{1}{6\times 9}+\frac{1}{5\times 9}\right)\Big/2\approx 0.020$$

❖程序设计

```
clear
S8=0.020
S1=zeros(9,1);%0.18232155679395
S1(9)=S8;
for k=8:-1:1
    S1(k)=1/k/5-1/5*S1(k+1);
end
S1(end:-1:1,1)
```

❖ 公式二的计算结果

```
S1 =

   0.18232155977143
   0.08839220114286
   0.05803899428571
   0.04313836190476
   0.03430819047619
   0.02845904761905
   0.02437142857143
   0.02100000000000
   0.02000000000000
```

计算结果

n	I_n	$\tilde{I}_n^{(1)}$	$\bar{I}_n^{(2)}$
0	0.182321	0.182	0.1823
1	0.088392	0.090	0.08839
2	0.058039	0.050	0.058038
3	0.043138	0.083	0.043138
4	0.034306	-0.1666	0.034308
5	0.028468	1.0333	0.028459
6	0.024324	-5.0000	0.02437
7	0.021236	25.1428	0.021
8	0.018836	-125.5892	0.020

§1 科学计算的意义

- 误差将不可回避
- 需要分析算法的稳定性

§2 误差基础知识

1. 误差来源

- 模型误差—— 从实际问题建立的数学模型往往都忽略了许多次要的因素（如空气阻力）,因此产生的误差.
- 观测误差—— 一般数学问题包含若干参数,他们是通过观测得到的，受观测方式、仪器精度以及外部观测条件等多种因素，不可能获得精确值，由此而来产生的误差称为观测误差。

注：它们均属于原始误差

§2 误差基础知识

- 截断误差—— 在求解过程中，往往以近似替代，化繁为简，从而产生的误差。

  注：属方法误差，由算法本身引起的

- 舍入误差 ——在计算机上运算时受机器字长的限制，一般必须进行舍入，从而产生的误差。

  注：计算机表示数据引起

2. 绝对误差

设x^*为精确值，x为近似值，称

$$|\Delta x| = e = |x^* - x|$$

为误差或绝对误差。

$|e|$的上限记为ε，称为绝对误差限 /*accuracy*/。

工程上常记为$x^* = x \pm \varepsilon$

注：e理论上讲是唯一确定的，可能取正，也可能取负。$\varepsilon > 0$不唯一，当然ε越小越具有参考价值。

绝对误差

例如：$f(x)=\ln(x+1)$ 作**Taylor**展开，

$$=\sum_{i=1}^{n}\frac{(-1)^{i-1}}{i}x^{i}+\frac{(-1)^{n}x^{n+1}}{(n+1)(1+\theta x)^{n+1}}\ ,\ 0<\theta<1$$

舍弃，即为绝对误差

例：近似计算 $\int_0^1 e^{-x^2}dx$ $= 0.747\ldots\ldots$

解法之一：将 e^{-x^2} 作Taylor展开后再积分

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

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

取 $\int_0^1 e^{-x^2}dx \approx S_4$，

则 $R_4 = \frac{1}{4!}\times\frac{1}{9} - \frac{1}{5!}\times\frac{1}{11} + \cdots$ 称为截断误差

由截去部分 /* excluded terms */ 引起

这里 $|R_4| < \frac{1}{4!}\times\frac{1}{9} < 0.005$

$$S_4 = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{10} - \frac{1}{42} \approx 1 - 0.333 + 0.1$$

$|$舍入误差 /* Roundoff Error */$| < 0.0005\times 2 = 0.001$

$|$计算 $\int_0^1 e^{-x^2}dx$ 的总体误差$| < 0.005 + 0.001 = 0.006$

3. 相对误差

$$e_r = \left|\frac{e}{x^*}\right| = \left|\frac{x^* - x}{x^*}\right|$$

称为**相对误差**

例如：150分满考139，100分满考90，两者的绝对误差分别为11和10，优劣如何？

前者相对误差(150－139)/150=0.073，

后者相对误差(100-90)/100=0.100

4. 有效数字

引例 已知准确值a=3.1415926…是一个无限不循环小数，求截取不同位数后的近似值和误差界。

解：截取一位$x_1 = 3,$

$$e_1 = |a - x_1| \approx 0.14 < \frac{1}{2}\times 10^0;$$

截取三位$x_2 = 3.14,$

$$e_2 = |a - x_2| \approx 0.0016 < \frac{1}{2}\times 10^{-2};$$

截取五位$x_3 = 3.1416,$

$$e_3 = |a - x_3| \approx 0.0000074 < \frac{1}{2}\times 10^{-4}。$$

a的近似值的绝对误差都超不过本身末位数的半个单位

有效数字

- **定义1：** 当x的绝对误差限为某一位的半个单位，则这一位到第一个非零位的位数称为x的有效位数。进而确定具有几位有效数字。

- **定义2：**

用科学计数法，记 $x^* = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m$（其中 $a_1 \neq 0$）。若 $|x - x^*| \leq 0.5 \times 10^{m-n}$（即 a_n 的截取按四舍五入规则），则称 x^* 为有 n 位有效数字，精确到 10^{m-n}。

注：在数值计算中，尽可能多地保留近似数的有效数字，有效数字越多，相对误差越小，计算结果越精确。

有效数字

例: $\pi = 3.1415926535897932\cdots\cdots;\quad \pi^* = 3.1415$

问: π^*有几位有效数字？请证明你的结论。

证明: $\because\ \pi^* = 0.31415 \times 10^{1}$,

and $|\pi^* - \pi| < 0.5 \times 10^{-3} = 0.5 \times 10^{1-4}$

$\therefore\ \pi^*$有 4位有效数字，精确到小数点后第 3位。

方法2: $\left|\pi - \pi^*\right| = 0.0000926\cdots = 0.0926 \times 10^{-3}$

$\left|\pi - \pi^*\right| = 0.0000926\cdots = \cancel{0.926 \times 10^{-4}}$

有效数字

练习：设 $x=\sqrt{3}=1.7320508\ldots$

$x_1=1.73$, $x_2=1.7321$, $x_3=1.7320$是其近似值,

问它们分别有几位有效数字?

解：$e_1=\left|\sqrt{3}-x_1\right|\approx 0.0021<\dfrac{1}{2}\times 10^{-2}$ 3位

$e_2=\left|\sqrt{3}-x_2\right|\approx 0.00005=\dfrac{1}{2}\times 10^{-4}$ 5位

$e_3=\left|\sqrt{3}-x_3\right|\approx 0.000051<\dfrac{1}{2}\times 10^{-3}$ 4位

§3 数值计算应注意的问题

1. 数值稳定性分析

例： 计算 $$S_n=\int_0^1 \frac{x^n}{x+5}dx, \quad n=0,1,2,\cdots,8$$

✍ 公式一： $$S_n=\frac{1}{n}-5S_{n-1}$$

$$S_0=\int_0^1\frac{1}{x+5}dx=\ln 6-\ln 5\approx 0.182 \overset{\text{记为}}{=\!=} I_0^*$$

则初始误差 $|E_0|=|I_0-I_0^*|<0.5\times 10^{-3}$

考察第n步的误差 $|E_n|$，假设真值为S_n^*，计算值为S_n

$$|E_n|=|S_n-S_n^*|=|(\frac{1}{n}-5S_{n-1})-(\frac{1}{n}-5S_{n-1}^*)|$$
$$=5|E_{n-1}|=\cdots=5^n|E_0|$$

数值稳定性分析

可见初始的小扰动 $|E_0| < 0.5\times 10^{-3}$ 迅速积累，误差呈递增走势。

造成这种情况的是不稳定的算法 **/* unstable algorithm */**

我们有责任改变。

公式二: $S_n = \dfrac{1}{n} - 5\,S_{n-1} \quad \Rightarrow \quad S_{n-1} = \dfrac{1}{5n} - \dfrac{1}{5}S_n$

方法：先估计一个S_N，再反推要求的S_n ($n << N$)。

注意此公式与公式一在理论上等价。

$$\because \quad \frac{1}{6(n+1)} < S_n < \frac{1}{5(n+1)}$$

可取 $S_N^* = \dfrac{1}{2}\left[\dfrac{1}{6(N+1)} + \dfrac{1}{5(N+1)}\right] \approx S_N$

当 $N \to +\infty$ 时，$|E_N| = |S_N - S_N^*| \to 0$

数值稳定性分析

考察反推一步的误差：

$$|E_{N-1}| = \left| \left(\frac{1}{5N} - \frac{1}{5} S_N \right) - \left(\frac{1}{5N} - \frac{1}{5} S_N^* \right) \right| = \frac{1}{5} |E_N|$$

以此类推，对 $n < N$ 有：

$$|E_n| = \frac{1}{5^{N-n}} |E_N|$$

误差逐步递减，这样的算法称为稳定的算法 /* stable algorithm */

算法的稳定性会是一个非常重要的话题

§3 数值计算应注意的问题

2.有时候，模型本身就是病态

系数引入小变化，解产生大变化。例如：

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

$a = 0.99 \qquad x = 50.25$

$a = 0.991 \qquad x = 55.81$

3. 计算机数系

在实数系中，每一个实数可以有无穷位，不同的实数代表数轴上不同的点；

$$\sqrt{3}=1.732050808\cdots$$

在计算机数系中，每一个数只有有限位，只有部分有理数能被计算机数系中的数精确表示。

$\sqrt{3}$不能被计算机数系精确表示。

$36.83=0.3683\times 10^2=0.03683\times 10^3$

浮点数：这种允许小数点位置浮动的表示法称为数的浮点形式。

实数x的十进制浮点形式为

$$x=\pm 0.\underbrace{a_1 a_2 \ldots a_k \ldots}_{\text{尾数}}\times \underbrace{10}_{\text{基数}}{}^{\overbrace{c}^{\text{阶码}}}, \quad (1)$$

$a_i\in\{0, 1, 2, \ldots, 9\}$， $c\in Z$

$a_1\neq 0$, (1)称为x 的规格化的浮点形式

计算机数系

一般数制情况：　k位规格化机器数

$y = \pm 0.\ a_1\ a_2 \ldots\ a_k \times \beta^c$，　$\beta = 2, 8, 10, 16,$

$a_i \in \{0, 1, 2, \ldots, \beta - 1\}$，$L \le c \le U$, $a_1 \ne 0$

$F(\beta, k. L, U)$表示以上数集全体加数0，它是计算机中使用的有限离散数集(机器数系）。

$F(\beta, k, L, U)$中的数称为机器数。

F(10,4,-33,33)，　$y = \pm 0.\ a_1 a_2 a_3 a_4 \times 10^c$

若浮点数的阶码不在[L, U]内，则出现上溢或下溢。

4. 计算机中数的计算特点

(1) 加减法先对阶,后运算,再舍入

注：浮点数加法不满足结合律

例:在F(10,4,-33,33)的计算机上计算$1+10^4$

解: $1+10^4 = 0.1000\times10^1 + 0.1000\times10^5$

$= 0.00001\times10^5 + 0.1000\times10^5$

(对阶，靠高阶)

$= 0.10001\times10^5 = 0.1000\times10^5 = 10^4$（舍入）

(2) 乘除法先运算,再舍入

(3) 不在计算机数系中的数做四舍五入处理

5. 数值计算应注意的问题

（1）避免相近二数相减

例：$a_1 = 0.12345$，$a_2 = 0.12346$，各有5位有效数字。

而 $a_2 - a_1 = 0.00001$，只剩下1位有效数字。

几种经验性避免方法:

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

当 $|x| << 1$ 时：

$$1-\cos x = 2\sin^2\frac{x}{2};$$

$$e^x - 1 = x\left(1+\frac{1}{2}x+\frac{1}{6}x^2+\ldots\right)$$

数值计算应注意的问题

（2）避免小分母:分母小会造成浮点溢出 /* over flow */

避免量级相差太大的两数相除

数值计算应注意的问题

（3）避免大数吃小数

例：用单精度计算 $x^2-(10^9+1)x+10^9=0$ 的根。

精确解为 $x_1=10^9$，$x_2=1$（8位浮点数）

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

大数吃小数

在计算机内，10^9存为0.1×10^{10}，1存为0.1×10^{1}。做加法时，两加数的指数先向大指数对齐，再将浮点部分相加。即1的指数部分须变为10^{10}，则：$1=0.0000000001\times10^{10}$，取单精度时就成为：

$10^9+1=0.10000000\times10^{10}+0.00000000\times10^{10}=0.10000000\times10^{10}$

$$\Rightarrow x_1=\frac{-b+\sqrt{b^2-4ac}}{2a}=10^9,\quad x_2=\frac{-b-\sqrt{b^2-4ac}}{2a}=0$$

数值计算应注意的问题

✍算法2：先解出 $x_1=\dfrac{-b-sign(b)\cdot\sqrt{b^2-4ac}}{2a}=10^9$

再利用 $x_1\cdot x_2=\dfrac{c}{a}\ \Rightarrow\ x_2=\dfrac{c}{a\cdot x_1}=\dfrac{10^9}{10^9}=1$

注：求和时从小到大相加，可使和的误差减小。

例：10进制9位字长机器上分别计算

$$S_A=1+\frac{1}{2}+\cdots+\frac{1}{10^5}=12.0897874$$

$$S_B=\frac{1}{10^5}+\frac{1}{9999}+\cdots+1=13.0901128$$

数值计算应注意的问题

（4）简化计算步骤，减少计算量，避免误差积累

一般来说，计算机处理下列运算的速度为 $(+,-)>(\times,\div)>(\mathbf{exp})$

例：秦九韶算法计算多项式的值

时间复杂性和空间复杂性

例：计算高次幂 $x^{64} = x \cdot x^{2} \cdot x^{4} \cdot x^{8} \cdot x^{16} \cdot x^{32} \cdot x$

N=11 flops，

（5）选用稳定的算法

§3 数值计算应注意的问题

例：计算多项式$p(x)=3x^3+4x^2-2x+6$的值。

算法1: 由x计算出x^2, x^3后再算。

需乘法5次，加法3次，存储单元7个。

算法2: $p(x)=x[x(3x+4)-2]+6$

需乘法3次，加法3次，存储单元6个。

一般地，计算n次多项式的值

§3 数值计算应注意的问题

一般地，计算n次多项式的值

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

算法1、需乘法2n-1次，加法n次，存储单元n+4个。

算法2、秦九韶算法1247年 （又称为Horner算法1819）

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

有递推公式 需乘法n次，加法n次，存储单元n+3个。

$$\begin{cases} s_n=a_n \\ s_k=xs_{k+1}+a_k \\ P_n(x)=s_0 \end{cases} \qquad (k=n-1,\cdots,2,1,0)$$

§3 数值计算应注意的问题

- 评价一个算法好坏主要有两条标准：

1. 计算结果的精度（即误差大小）
2. 得到结果需要付出的代价

   时空复杂性：CPU时间（运算次数）和存储空间

§4 Matlab简介

- ❑陆续介绍

- ❑19-20周实习更为详尽的介绍

课程学习重点

1. 构造数值方法的原理

迭代法, 以直代曲, 化整为零, 外推法

2. 评价数值方法的好坏

研究数值方法的性态、可靠性、效率

3. 数值方法的计算机实现

平时积累和计算机集中实习

思考与练习

1. 设近似值T0=S0=35.70具有四位有效数字，计算中无舍入误差，试分别用下面的递推式计算T20和S20，所得结果是否可靠？

$$T_{i+1} = 5T_i - 142.8$$

$$S_{i+1} = \frac{1}{5}S_i - 142.8$$

2. 选用数值稳定性的算法计算

$$I_n = \frac{1}{e}\int_0^1 x^n e^x dx \ , \quad n = 0, 1, 2, ..., 20$$

提示： $$I_n = 1 - n\, I_{n-1}$$

思考与练习

3. 避免相近的两数相减

$$\arctan 5430 - \arctan 5439$$