计算方法

Computational Methods，Numerical Methods

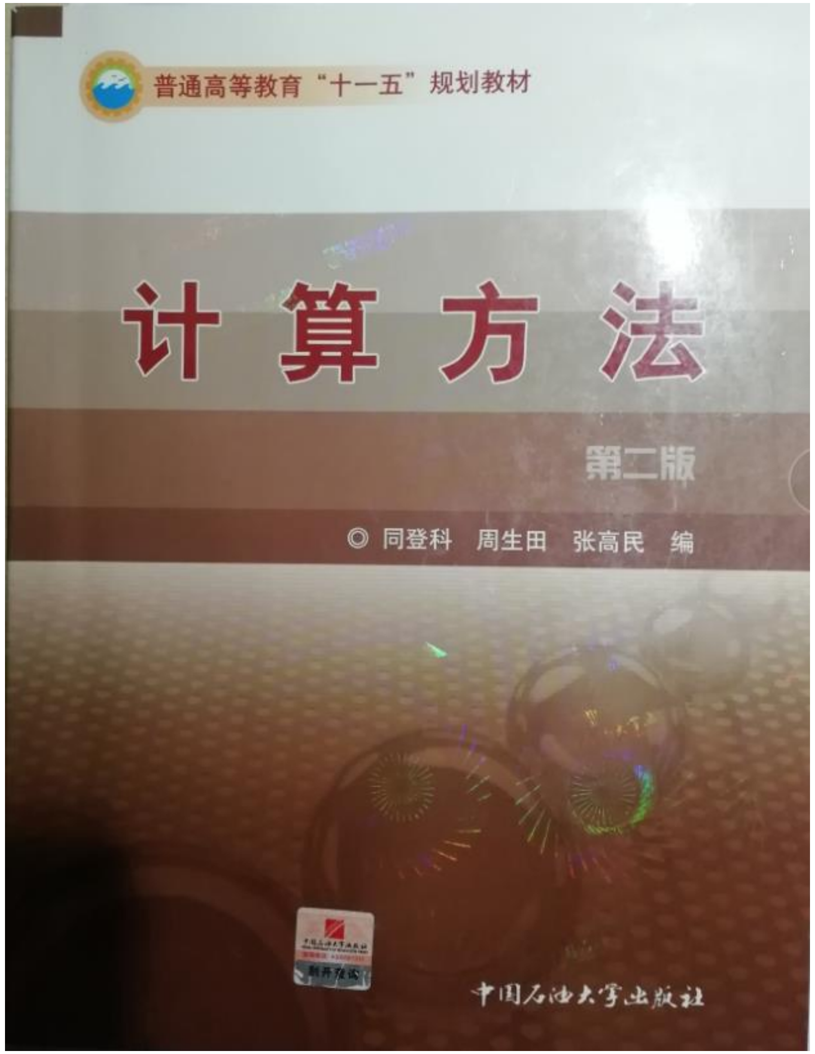
计算机科学系

课程介绍

- 刘玉杰
- QQ： 503120700
- Email： liuyujie@upc.edu.cn

课程介绍

- 教材：《计算方法》，中国石油大学出版社，同登科等编著
- 参考书
  - 计算方法典型题分析题解
    - 封建湖　车刚明 编　西北工业大学出版社
  - 数值分析复习与考试指导
    - 李庆扬　　高等教育出版社
  - 数值计算方法　第二版
    - 李维国　石油大学出版社



课程介绍

- 课程评价(Grading Policies)
  - 期末考试成绩 (70%)
  - 平时成绩 (30%)
    - 考勤
    - 作业
    - 课堂测试
    - 上机

第一章绪论

§0 计算方法

- 计算机能做什么?
- 计算机基本能力有哪些?
  - 数：整型、浮点型（有限位的数）
  - 基本运算:加、减、乘、除和逻辑运算
- 所以,
- 计算机能做的计算是**有限的**，而实际应用要求它做的事儿是**无限的**
  - 要求复杂的计算，大规模的计算，大数据计算，AI，CV等
- 如何弥补这**有限**跟**无限**之间的鸿沟呢?

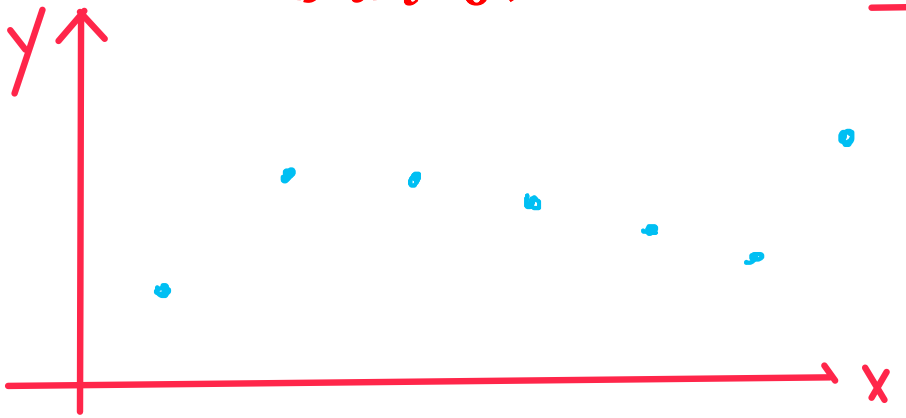
计算方法

§0 计算方法

- 计算方法是利用计算工具求解复杂问题的基本方法。
- 计算方法作为一门学科，要解决的基本问题
  - 如何把复杂的科技数值计算问题有效地转化为只有一定数位的数的四则运算问题。

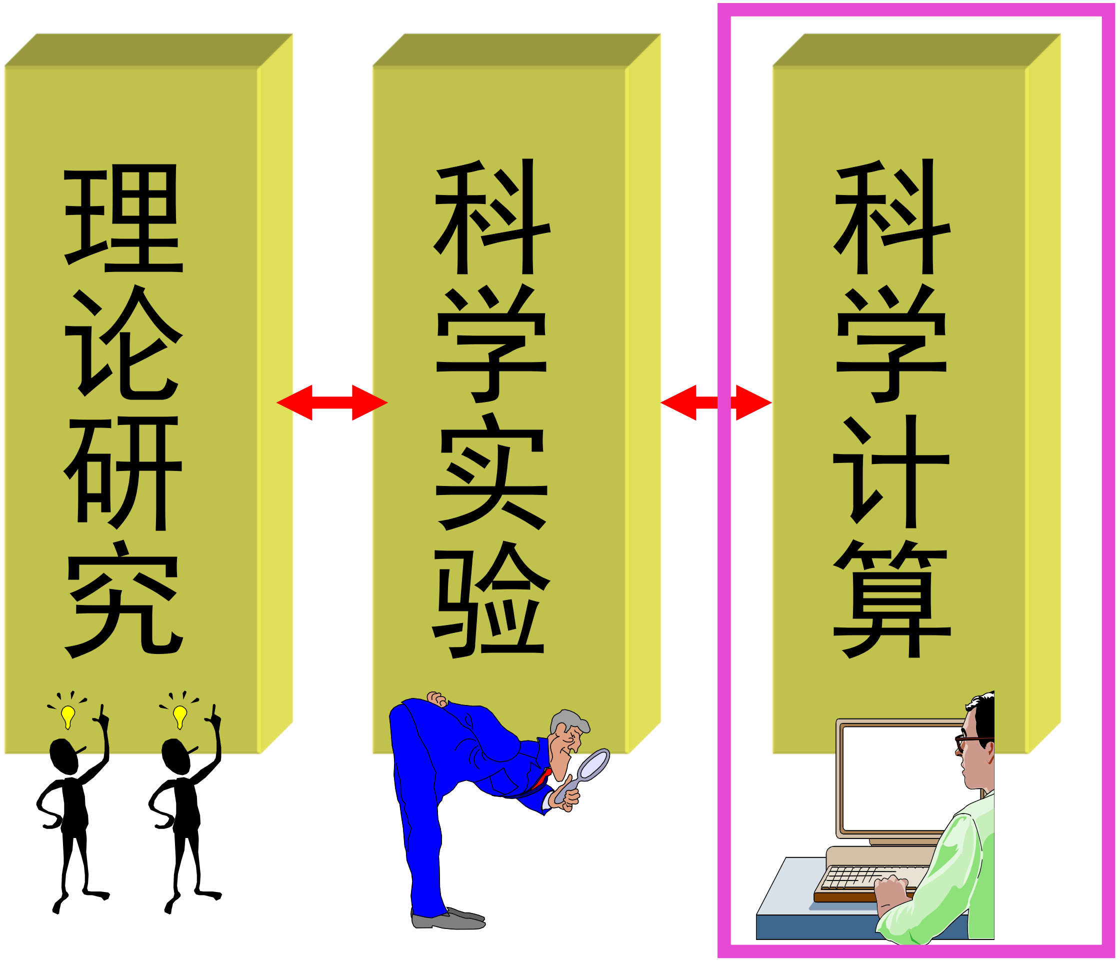
§0 计算方法

- 跟数学方法是不完全相同的
- 如一阶微分方程初值问题
- $\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = 2x \\ y(0) = 1 \end{cases}$
- 求函数$y = y(x)$的解析表达式，采用的是数学方法，这样的问题是数学问题
- 求函数$y = y(x)$在某些点$\{x_i\}_{i=0}^{M}$的近似函数值$\{y_i\}_{i=0}^{M}$，采用的是数值计算方法，这样的问题是数值问题



§0 计算方法

■诺贝尔奖得主Kenneth G. Wilson提出现代科学研究的**三大支柱**



21世纪信息社会的两个主要特征：

"计算机无处不在"

"数学无处不在"

21世纪信息社会对科技人才的要求：

--会用数学解决实际问题

--会用计算机进行科学计算

计算方法

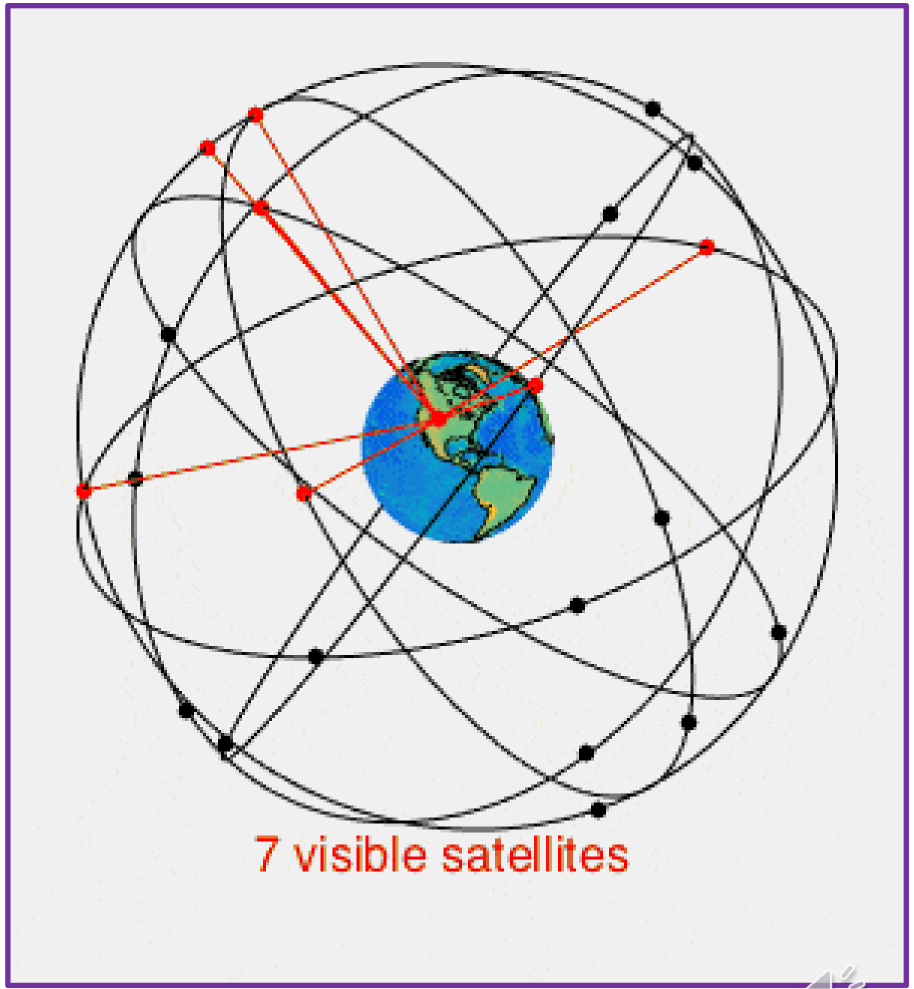
§0 计算方法

- 应用广泛 (以计算机相关方向为例)
  - 人工智能、机器人控制：矩阵特征值、奇异值分解、常微分方程数值解、最小二乘拟合
  - 计算机图形学CAD：函数插值、逼近、微分方程数值解
  - 集成电路CAD（EDA）：大规模线性方程组求解、常微分方程、偏微分方程
  - 系统软件、编译、网络等方向：线性方程组求解、非线性方程组求解
  - 高性能计算：用数值算法来评测机器性能
  - 电力系统仿真、大气仿真，。。。。。。

§0 计算方法

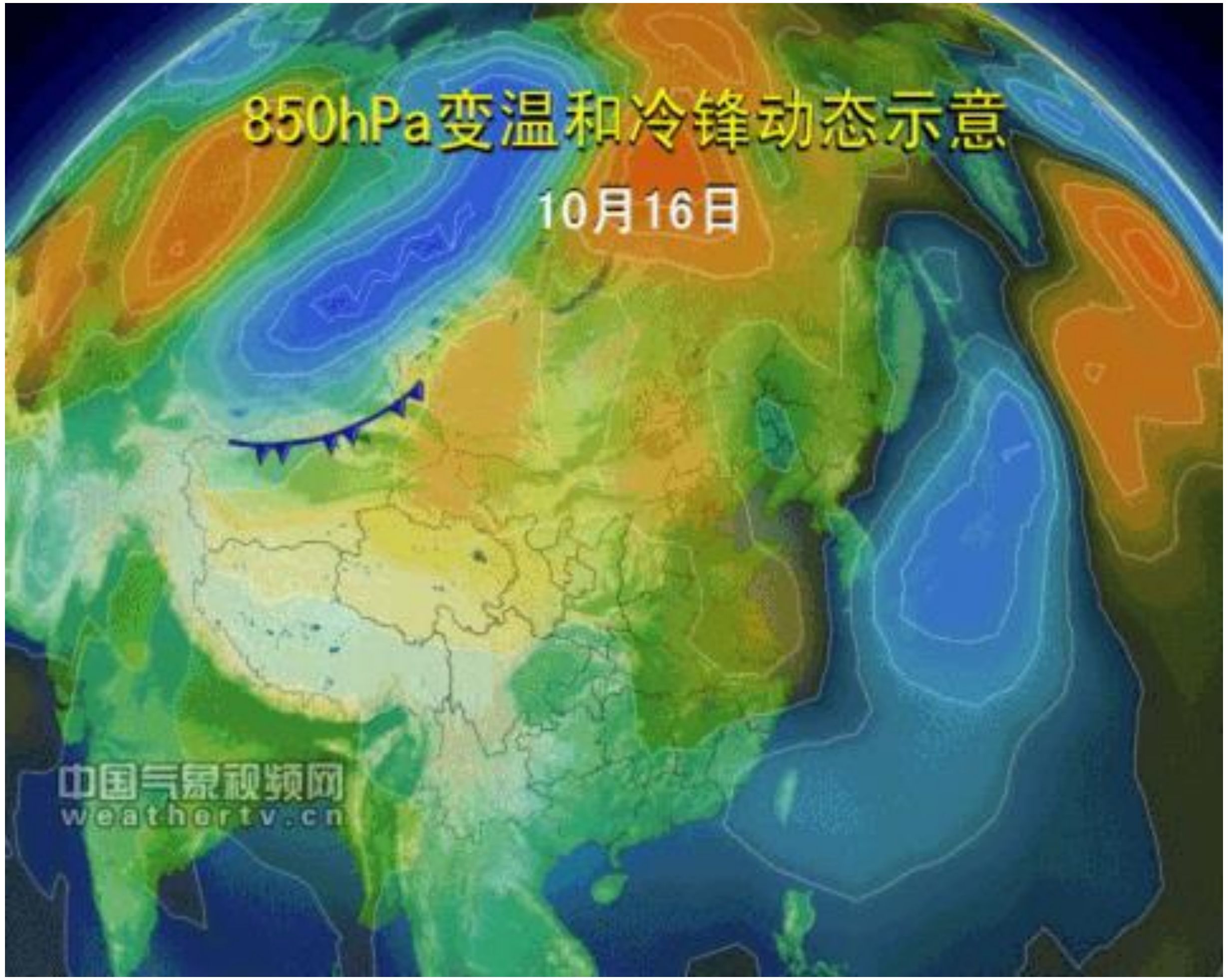
- 北斗卫星导航系统（BeiDou Navigation Satellite System，BDS)
- 卫星发送信号(x_i, y_i, z_i, t_i) $i = 1,2,\cdots,n$
- 导航仪(x, y, z, t)接收信号
- 至少可以同时收到4颗以上卫星发射的信号

$$\begin{cases}
\sqrt{(x-x_1)^2+(y-y_1)^2+(z-z_1)^2}-(\mathrm{t}_1\text{-}\mathrm{t})\cdot c=0 \\
\sqrt{(x-x_2)^2+(y-y_2)^2+(z-z_2)^2}-(\mathrm{t}_2\text{-}\mathrm{t})\cdot c=0 \\
\sqrt{(x-x_3)^2+(y-y_3)^2+(z-z_3)^2}-(\mathrm{t}_3\text{-}\mathrm{t})\cdot c=0 \\
\sqrt{(x-x_4)^2+(y-y_4)^2+(z-z_4)^2}-(\mathrm{t}_4\text{-}\mathrm{t})\cdot c=0 \\
\sqrt{(x-x_5)^2+(y-y_5)^2+(z-z_5)^2}-(\mathrm{t}_5\text{-}\mathrm{t})\cdot c=0 \\
\sqrt{(x-x_6)^2+(y-y_6)^2+(z-z_6)^2}-(\mathrm{t}_6\text{-}\mathrm{t})\cdot c=0
\end{cases}$$



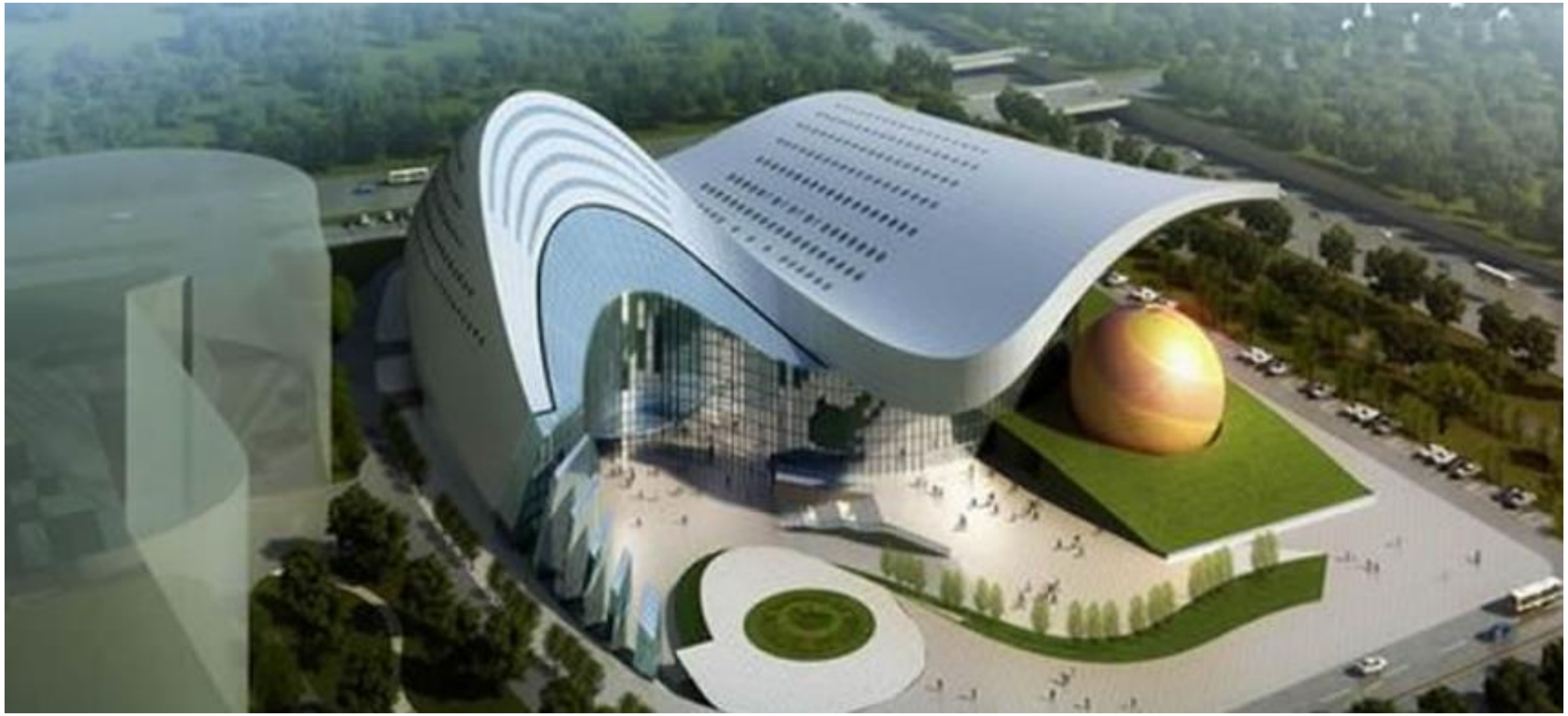
§0 计算方法

- 天气预报



§0 计算方法

□计算机辅助设计



§0 计算方法

- 学习应用于科学与工程领域的各种数值计算方法
- 能够根据实际问题要求，选用合适的计算方法设计解决方案
- 解决方案在计算机上可计算，能够达到相应精度要求，并且具有良好的计算复杂性
- 能够使用相应工具软件(Matlab)实现解决方案，给出数值计算结果。

§0 计算方法

- 主要研究内容
- 1、**数值逼近，插值与拟合**、FFT、**数值积分与微分**
- 2、数值代数，代数基础、**线性代数方程组的解法**、**非线性代数方程（组）的解法**、特征值与特征向量
- 3、常**微分方程数值解**，ODE、PDE和有限元法
- 4、最优化方法，无约束优化与有约束优化方法
- 5、现代计算方法：融进了机器学习计算、仿生计算、网络计算、以数据为核心的计算和各种普适计算、非线性科学计算等内容。

第一章 绪论

- 计算方法的研究对象和任务
- 误差与有效数字
- 数值计算中应注意的几个问题

§1计算方法的研究对象和任务

◻计算方法（数值算法）步骤

实际问题	求$\sqrt{2}$
⇩	⇩
模型设计	求解$x^2=2$
⇩	⇩
算法设计	牛顿法$x_{k+1}=\frac{1}{2}\left(x_k+\frac{2}{x_k}\right)$
⇩	⇩
程序实现	程序实现
⇩	⇩
上机运行	上机运行
⇩	⇩
结果输出	结果: $x_0=1, x_1=1.5, x_2=1.417, \cdots$
⇩	⇩
解释验证	解释验证

§1计算方法的研究对象和任务

□计算方法（数值算法）特点

- 处理连续数学的量(实数量)，问题中常涉及微分、积分和非线性。被求解的问题一般没有**解析解**、或**理论上无法通过有限步**计算求解
  - □无解析解：$33x^5+3x^4-20x^3+3x^2-9x-99=0$
  - □有解析解，但需无限步计算：sin(x)
  - □更多的实际应用问题通过数值模拟来解决
- 目标：寻找迅速完成的(迭代)算法，评估结果的准确度

§1计算方法的研究对象和任务

- 任务
- 数值方法设计
- 分析有关的数学理论和具体实现
  - 误差
  - 稳定性、收敛性
  - 计算工作量，存储量和适应性

§1计算方法的研究对象和任务

- 什么是“好的”数值计算方法?
  - ✓误差小 — 误差分析
  - ✓耗时少 — 复杂度分析
  - ✓抗干扰 — 稳定性分析

§1计算方法的研究对象和任务

◻数值方法的设计原则

1. 可靠性分析
2. 计算复杂性分析

§1计算方法的研究对象和任务

□可靠性分析

- ■收敛性：方法的可行性
- ■稳定性：初始数据等产生的误差对结果的影响
- ■误差估计：运算结果不能产生太大的偏差且能够控制误差

□计算复杂性

- ■便于编程实现：逻辑复杂度要小
- ■计算量要小：时间复杂度要小，运行时间要短
- ■存贮量要尽量小：空间复杂度要小

第一章 绪论

- ☐计算方法的研究对象和任务
- ☐误差与有效数字
- ☐数值计算中应注意的几个问题

§2误差与有效数字

□误差的类型

- ■模型误差(Modeling Error)
- ■观测误差（数据误差）(Measurement Error)
- ■截断误差（方法误差）(Truncation Error）
- ■舍入误差(Roundoff Error)

□绝对误差(Absolute error)和相对误差(Relative error)

□有效数字(Significant Digits)

一、误差类型

□模型误差

忽略次要因素！

■建立近似数学模型产生的误差

■如物理上，建立计算模型时，忽略摩擦、空气阻力等

□观测误差（数据误差）

人或测量工具引起！

■观测手段和工具限制等带来的误差

观测工具最小 一半

一、误差类型

- 例：设某金属棒在温度t时的长度为l_t，在0℃时，金属棒的长度为l_0，则在温度为t℃时，有如下经验公式：

真实

$$l_t \approx L_t = l_0(1+\alpha t+\beta t^2)$$

α、β为参数，经测量可估计为：

$$\alpha = 0.001253 \pm 10^{-6}$$
$$\beta = 0.000068 \pm 10^{-6}$$

- 模型误差?$l_t - L_t$
- 观测误差? 10^{-6}

测α, β时

一、误差类型

算法本身引起!

- 截断误差（方法误差）
  - 模型的准确解与数值方法的准确解间的误差
- 把$\sin(x)$展开成级数
  - $\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots\cdots$
  - 当x趋于0时，用前三项近似代替$\sin(x)$的值，即$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!}$
- 求导数时，用 $\frac{\Delta y}{\Delta x}$ 近似代替$\frac{dy}{dx}$

一、误差类型

计算机物理原因引起!

□舍入误差

■受计算机字长限制而导致的误差，称为舍入误差，需“四舍五入”。

□ $\frac{1}{3}=0.33333333$

$\pi=3.14159265$

$\sqrt[2]{2}=1.41421356$

$(0.9999)_{10}\approx(\qquad\qquad)_2$

$(0.1111111111)_2=(0.9990234375)_{10}$

在数值计算方法中，主要研究截断误差和舍入误差（包括初始数据的误差）对计算结果的影响！

一、误差类型

- 例1.1：用球表面积公式计算地球表面积。
  - 将地球近似成球体　　模型误差
  - 取半径$r \approx 6370km$　　数据误差
  - 将π的值取到有限位 (如3.14)　　舍入误差
  - 计算$4\pi r^2$ (用到乘法)　　舍入误差

$4\pi r^2$

二、绝对误差和相对误差

- 绝对误差与绝对误差限
- 定义：设x^*是精确值x的近似值，称
- $$\varepsilon(x) = x^* - x$$
- 为近似值x^*的绝对误差。
- $$|\varepsilon(x)| = |x^* - x| \le \varepsilon^*$$
- 称ε^*为x^*的绝对误差限，由上式得：
- $$x^* - \varepsilon^* \le x \le x^* + \varepsilon^*$$
- 即：$x = x^* \pm \varepsilon^*$

精确值

近似值

绝对误差限

二、绝对误差和相对误差

- 问题：绝对误差能反映近似数的精确程度吗?
- 绝对误差不能完全反映近似值的准确程度
- 如 $x_1 = 10 \pm 1$　　$x_2 = 10000 \pm 1$
- 尽管其绝对误差限相同，但x_2的精确度要比x_1大得多

- 问题：还要考虑什么因素?

二、绝对误差和相对误差

- 相对误差与相对误差限
- 定义：称绝对误差与准确值之比
- $\varepsilon_{\mathrm{r}}(x)=\dfrac{\varepsilon(x)}{x}=\dfrac{x^*-x}{x}, x\neq 0$为近似值$x^*$的相对误差

- 通常，采用$\varepsilon_{\mathrm{r}}(x)=\dfrac{\varepsilon(x)}{x^*}, x^*\neq 0$
- $|\varepsilon_{\mathrm{r}}(x)|=\left|\dfrac{x^*-x}{x^*}\right|\leq \varepsilon_r^*, x^*\neq 0,$
- 称ε_r^*为近似值x^*的相对误差限

三、有效数字

□定义(1)：设x^*是精确值x的近似值，若$|x^* - x| \le \frac{1}{2} \times 10^{-n}$，则称用$x^*$近似表示$x$时，精确到小数点后第$n$位；

□从小数点后第n位到最左边非零数字之间的一切数字称为有效数字

□例$x = 0.0004608172$; $x^* = 0.0004608295$

□ $|x^* - x| = 0.0000000123 \le 0.00000005 = \frac{1}{2} \times 10^{-7}$

□精确到小数点后第（n= 7）位

□有效数字: 4，6，0，8

三、有效数字

- 定义(2)：设x^*是精确值x的近似值，将其写成如下形式：$x^* = \pm 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m$，
- 其中：x_1：1-9之间的一切数字；
- $x_2\cdots x_n$：0-9之间的一切数字；
- m：为整数
- 若x^*的绝对误差限为$|x^*-x| \le \frac{1}{2}\times 10^{m-n}$
- 则称用x^*近似表示x时，有n位有效数字，$x_1x_2\cdots x_n$是x^*的有效数字。

三、有效数字

①规范化　②确定m值　④确定误差限

③ $\frac{1}{2}10^{m-n}$　⑤ n　⑥ 有效数字

- 例1.2：用3.14表示π，求其有效数字
- $3.14 = 0.314 \times 10^1$　　　对照$x^* = \pm 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m$
- $m = 1$
- $|\pi - 3.14| = |3.1415926535\cdots - 3.14| = 0.0015926535\cdots \le 0.005 = \frac{1}{2}\times 10^{-2} = \frac{1}{2}\times 10^{1-3} = \frac{1}{2}\times 10^{m-n}$
- $m = 1$
- $n = 3$
- 有3位有效数字，3,1,4

1) 规范
2) m
3) 限
4) $10^{m-n} \times \frac{1}{2}$
5) n
6) S

三、有效数字

- **例1.3：求下列近似数x_1^*，x_2^*的有效数字**
- **设$x = 0.98632, x_1^* = 0.98, x_2^* = 0.99$**
- **解：** 1) $x_1^* = 0.98 = 0.98 \times 10^0$
- $m = 0$
- $|x - x_1^*| = |0.98 - 0.98632| = 0.00632 \leq 0.05$
- $= \frac{1}{2} \times 10^{-1} = \frac{1}{2} \times 10^{0-1} = \frac{1}{2} \times 10^{\mathrm{m-n}}$
- $m = 0$
- $n = 1$
- **有1位有效数字，9**

三、有效数字

- 例1.3(2)
- 解：2) $x_2^* = 0.99 = 0.99 \times 10^0$
- $m = 0$
- $|x - x_2^*| = |0.99 - 0.98632| = 0.00368 \leq 0.005$
- $= \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \frac{1}{2} \times 10^{0-2} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$
- $m = 0$
- $n = 2$
- 有2位有效数字，9,9
- 注意：近似数x^*的所有数位上的数不一定都为有效数字

三、有效数字

- 注意
- 凡是经过四舍五入得到的数字都为有效数字
- $\pi=3.1415926\cdots$
- 则3.14，3.142，3.1416，3.14159中，所有数字均为有效数字

3　4　5　6

三、有效数字

- 例1.4：定义函数$g(x)=10^7\times(1-\cos x)$，试使用4位数学用表计算$g(2^\circ)$的近似值。
- 解：算法(1)
- 查表得$\cos 2^\circ \approx 0.9994$，
- 则$g(2^\circ)=10^7\times(1-\cos 2^\circ)$
- $\approx 10^7\times(1-0.9994)$
- $=6000$

三、有效数字

- 例1.4 定义函数$g(x)=10^7\times(1-\cos x)$，试使用4位数学用表计算$g(2^\circ)$的近似值。
- 解：算法(2)
- $\because\ g(x)=10^7\times(1-\cos x)\equiv 10^7\times 2\times\sin^2\frac{x}{2}$
- 查表得$\sin\frac{2^\circ}{2}=\sin 1^\circ\approx 0.0175$, $=0.175\times10^{-1}$
- 则$g(2^\circ)=10^7\times 2\times\sin^2 1^\circ$
- $\approx 10^7\times 2\times(0.0175)^2$
- $=6125$

算法(1)(2)都用相同数学用表，表的每一个数都准确到小数后第四位，答案为什么不一致?谁的答案较正确呢?

三、有效数字

- 例1.4 定义函数$g(x)=10^7\times(1-\cos x)$，试使用4位数学用表计算$g(2^\circ)$的近似值。
- 分析：令 $t_1=10^7\times(1-A)$，其中$A=\cos x$
- $t_2=10^7\times2\times B^2$，其中$B=\sin\frac{x}{2}$
- 查的三角函数表得到的四位数字，准确到小数点后第三位，第四位是经过“4舍5入”得到的，设A^*是A的近似值，B^*是B的近似值，所以
- $|A-A^*|\le\frac{1}{2}\times10^{-4}$
- $|B-B^*|\le\frac{1}{2}\times10^{-4}$

三、有效数字

□例1.4

□分析：令 $t_1 = 10^7 \times (1 - A)$，其中$A = \cos x$

□ $t_2 = 10^7 \times 2 \times B^2$，其中$B = \sin\frac{x}{2}$

□$\because$ $t_1^* = 10^7 \times (1 - A^*)$ $\therefore \varepsilon(t_1^*) = t_1^* - t_1 = 10^7 \times (A - A^*)$

□ $t_2^* = 10^7 \times 2 \times B^{*2}$ $\varepsilon(t_2^*) = t_2^* - t_2 = 10^7 \times 2 \times \left(B^2 - B^{*2}\right)$

□$\therefore \varepsilon_r(t_1^*) = \frac{\varepsilon(t_1^*)}{|t_1^*|} = \frac{|10^7 \times (A - A^*)|}{|10^7 \times (1 - A^*)|} \le \frac{|A - A^*|}{|1 - A^*|} \le \frac{\frac{1}{2} \times 10^{-4}}{1 - 0.994} \approx 8.3\%$

□$\varepsilon_r(t_2^*) = \frac{\varepsilon(t_2^*)}{|t_2^*|} = \frac{|10^7 \times 2 \times (B^2 - B^{*2})|}{|10^7 \times 2 \times B^{*2}|} = \frac{|(B + B^*)(B - B^*)|}{|B^{*2}|} \approx \frac{|(2B^*)(B - B^*)|}{|B^{*2}|} = \frac{|2(B - B^*)|}{|B^*|} \le$

$\frac{2 \times \frac{1}{2} \times 10^{-4}}{0.0175} \approx 0.57\%$

□所以：算法（2）的答案更精确

$10^7(1-\cos 2)$的准确值是6091.73

四、误差与有效数字的关系

- 定理1：设x^*是x的具有n位有效数字的近似数，且可以表示成$x^* = \pm 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m$，则：
- 1. 绝对误差限

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

- 2. 相对误差限

$$\varepsilon_r \leq \frac{1}{2 \times x_1} \times 10^{-(n-1)}$$

四、误差与有效数字的关系

- 定理1b：设x^*是x的近似数，且可以表示成$x^* = \pm 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m$，若$x^*$的相对误差限满足

$$\varepsilon_r \leq \frac{1}{2(x_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$$

- 则x^*至少具有n位有效数字

五、数值运算的误差估计

- 1. 四则运算误差
- 设两个近似数x_1^*和x_2^*，其误差限分别为$\varepsilon(x_1^*)$和$\varepsilon(x_2^*)$，则进行四则运算后的误差限
- $\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) = \varepsilon(x_1^*) \pm \varepsilon(x_2^*)$
- $\varepsilon(x_1^* \times x_2^*) \approx |x_1^*|\varepsilon(x_1^*) + |x_2^*|\varepsilon(x_2^*)$
- $\varepsilon(x_1^*/x_2^*) \approx \dfrac{|x_1^*|\varepsilon(x_2^*)+|x_2^*|\varepsilon(x_1^*)}{|x_2^*|^2} \quad (|x_2^*| \neq 0, x_2^* \neq 0)$

五、数值运算的误差估计

- 2.函数误差(一元函数)
- 设有一元函数$y=f(x)$
- 自变量的准确值为x，则计算出准确y值
- 由于数据误差，输入自变量近似值为x^*，则计算出的函数的近似值 $y^*=f(x^*)$
- 则函数的计算误差为$y^*-y=f(x^*)-f(x)$

五、数值运算的误差估计

- **Taylor公式**
  - $f(x)=f(x^*)+f'(x^*)(x-x^*)+\frac{f''(x^*)}{2!}(x-x^*)^2+\cdots+\frac{f^n(\xi)}{n!}(x-x^*)^n$
  - 取$n=2$，则有$f(x)=f(x^*)+f'(x^*)(x-x^*)+\frac{f''(\xi)}{2!}(x-x^*)^2$
- **则函数的计算误差为**
  - $y-y^*=f(x)-f(x^*)=f'(x^*)(x-x^*)+\frac{f''(\xi)}{2!}(x-x^*)^2$
- **取绝对值：**
  - $|y-y^*|=|f(x)-f(x^*)|\le|f'(x^*)(x-x^*)|+\left|\frac{f''(\xi)}{2!}(x-x^*)^2\right|$
- **$\therefore$ 近似值$y^*=f(x^*)$绝对误差限为：**
  - $\varepsilon(y^*)=\varepsilon\left(f(x^*)\right)\approx|f'(x^*)(x-x^*)|=|f'(x^*)||x-x^*|=|f'(x^*)|\varepsilon(x^*)$

五、数值运算的误差估计

- 3.函数误差(多元函数)
- 设有多元函数$y=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$
- 自变量的准确值为$x_1,x_2,\cdots,x_n$，计算出准确y值
- 自变量近似值为$x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*$，函数近似值$y^*=f(x_1^*,\ x_2^*,\ \cdots,\ x_n^*)$
- 则函数的计算误差为
- $\varepsilon(y^*)=y^*-y=f(x_1^*,\ x_2^*,\ \cdots,\ x_n^*)-f(x_1,x_2,\cdots,x_n)\approx \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f(x_1^*,\ x_2^*,\ \cdots,\ x_n^*)}{\partial x_k^*}\right)(x_k^*-x_k)=\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*\varepsilon_k^*$
- 误差限为$\varepsilon(y^*)\approx\sum_{k=1}^{n}\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*\right|\varepsilon_k^*$
- y^*的相对误差限：$\varepsilon_r^*=\varepsilon_r(y^*)=\frac{\varepsilon(y^*)}{|y^*|}\approx\sum_{k=1}^{n}\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*\right|\frac{\varepsilon_k^*}{|y^*|}$

五、数值运算的误差估计

- 例1.6：已测得某场地长l的值为$l^* = 110m$，宽d的值为$d^* = 80m$，已知$\varepsilon(l^*) \le 0.2m$，$\varepsilon(d^*) \le 0.1m$，试求面积$S$的绝对误差限和相对误差限。
- 解：$S = ld$ 则$\frac{\partial s}{\partial l} = d$，$\frac{\partial s}{\partial d} = l$
- $\varepsilon(S^*) \approx \left|\left(\frac{\partial s}{\partial l}\right)^*\right| \varepsilon(l^*) + \left|\left(\frac{\partial s}{\partial d}\right)^*\right| \varepsilon(d^*)$
- 其中$\left(\frac{\partial s}{\partial l}\right)^* = d^* = 80m$，$\left(\frac{\partial s}{\partial d}\right)^* = l^* = 110m$
- 绝对误差限
- $\varepsilon(S^*) \approx 110 \times 0.1 + 80 \times 0.2 = 27m^2$
- 相对误差限
- $\varepsilon_r(S^*) = \frac{\varepsilon(S^*)}{|S^*|} \approx \frac{27}{110 \times 80} = 0.31\%$

$S = l\,d$

d

第一章 绪论

- □计算方法的研究对象和任务
- □误差与有效数字
- □数值计算中应注意的几个问题

§3数值计算中应注意的几个问题

- 1、避免中间计算结果出现上(下)溢出
- 避免除数绝对值远远小于被除数的除法，浮点下溢出，舍入误差加大；
- 避免多个大数相加，浮点上溢出，误差加大。

§3数值计算中应注意的几个问题

- 例1.7：当x接近于0时，计算$\frac{1-\cos x}{\sin x}$

sinx → 0

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

§3数值计算中应注意的几个问题

- 2、避免两相近数相减 （损失有效数字）
- 例1.8： $x=532.65$，$y=532.52$，则$x-y=$ 0.13
- 减法计算未发生舍入，但其结果仅有2位有效数字
- 结果的有效数字位数的减少，意味着相对误差的放大，将给后续计算带来较大误差
- 抵消现象是发生信息丢失、误差变大的信号！

§3数值计算中应注意的几个问题

- 例1.9：对于充分大x，小的正数ε，计算$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}$，$\sqrt{x+\varepsilon}-\sqrt{x}$，$ln(x+\varepsilon)-ln(x)$，$\sin(x+\varepsilon)-\sin x$
- $\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$
- $\sqrt{x+\varepsilon}-\sqrt{x}=\frac{\varepsilon}{\sqrt{x+\varepsilon}+\sqrt{x}}$
- $ln(x+\varepsilon)-ln(x)=ln\left(\frac{x+\varepsilon}{x}\right)=ln\left(1+\frac{\varepsilon}{x}\right)$
- $\sin(x+\varepsilon)-\sin x=2\cos\left(x+\frac{\varepsilon}{2}\right)\sin\frac{\varepsilon}{2}$

§3数值计算中应注意的几个问题

- 例1.10：对于绝对值很小的x，计算$e^x - 1$
- $\because e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \cdots$
- $\therefore e^x - 1 = x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \cdots$

§3数值计算中应注意的几个问题

- 3、避免大数吃小数
- 例1.11：在5位十进制计算机上，计算$A = 51234 + 0.9 + 0.9 + 0.9 + \cdots \ldots + 0.9$（假设有1000个0.9相加）
- 实际计算时，先将其写成规格化形式，然后对阶
- $A = 0.51234 \times 10^5 + 0.000009 \times 10^5 + \cdots \ldots . . + 0.000009 \times 10^5 = 0.51234 \times 10^5$
- **解决方法**
- 先把后面小数加起来，再加到大数上
- $0.9 + \cdots \ldots . . + 0.9 = 9 \times 10^2 = 0.00900 \times 10^5$
- $A = 0.51234 \times 10^5 + 0.00900 \times 10^5$

§3数值计算中应注意的几个问题

- 4、简化运算步骤，减少运算次数(减少舍入误差)
- 例1.12:
- $p_5(x) \ = \ a_5x^5 + a_4x^4 + a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$
- 若按逐个相乘 $a_5x.x.x.x.x$ 再相加需要15次乘法，5次加法
- $p_5(x) = ((((a_5x \ + a_4)x + a_3)x + a_2)x + a_1)x \ + a_0$
- 只需5次乘法，5次加法
- ------秦九韶算法

Corner

§3数值计算中应注意的几个问题

- 5、使用数值稳定的算法
- 定义：数值稳定性（Numerical Stability）
- 一个算法如果输入数据有扰动（即误差），而计算过程中舍入误差不增长,则称此算法是数值稳定的，否则此算法就称为不稳定的。
- 定义：病态问题（ill-posed problem）
- 对问题本身，如果输入数据有微小扰动，引起输出数据（即问题真解）的很大扰动，这就是病态问题

§3数值计算中应注意的几个问题

- 例1.13： 计算积分$I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx \ (n = 0,1,2,\cdots,9)$
- 解： 利用分部积分可得
- $I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx = x^n e^{x-1}|_0^1 - n\int_0^1 x^{n-1} e^{x-1}\,dx = 1 - nI_{n-1}$
- 得递推公式:
- $I_0 = \int_0^1 x^0 e^{x-1}\,dx = \int_0^1 e^{x-1}\,dx = 1 - e^{-1} \approx 0.6321$
- $I_n = 1 - nI_{n-1} \qquad n = 1,2,\cdots,9$

§3数值计算中应注意的几个问题

- 例1.13：　计算积分$I_n=\int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx\ \ (n=0,1,2,\cdots,9)$
- 递推公式：
- $I_0=\int_0^1 x^0 e^{x-1}\,dx\ =\int_0^1 e^{x-1}\,dx=1-e^{-1}\approx 0.6321$
- $I_n=1-nI_{n-1}\qquad n=1,2,\cdots,9$

思考：哪个环节出问题了？？

n	I_n	n	I_n
1	0.3679	6	0.1120
2	0.2642	7	0.2160
3	0.2074	8	-0.7280
4	0.1704	9	7.5520
5	0.1480		

- I_9的准确值约为0.0916

§3数值计算中应注意的几个问题

- 例1.13：计算积分$I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx \ (n = 0,1,2,\cdots,9)$
- 递推公式：
- $I_0 = \int_0^1 x^0 e^{x-1}\,dx = \int_0^1 e^{x-1}\,dx = 1 - e^{-1} \approx 0.6321$
- $I_n = 1 - nI_{n-1} \qquad n = 1,2,\cdots,9$
- 计算I_0的舍入误差为：
- $I_0 = 0.632120558\cdots$
- $\therefore\ I_0 \approx 0.6321 = I_0{}^*, \quad \varepsilon(I_0{}^*) \approx 0.2056 \times 10^{-4}$

§3数值计算中应注意的几个问题

- 例1.13：计算积分$I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx \ (n = 0,1,2,\cdots,9)$
- 递推公式（理论公式）
- $I_n = 1 - nI_{n-1} \qquad n = 1,2,\cdots,9$
- 计算公式（实际公式）
- $I_n{}^* = 1 - nI_{n-1}{}^* \qquad n = 1,2,\cdots,9$
- 则误差为：
- $I_n{}^* - I_n = -n(I_{n-1}{}^* - I_{n-1}) = (-1)^2 n(n-1)(I_{n-2}{}^* - I_{n-2}) = \cdots = (-1)^n n!\,(I_0{}^* - I_0)$
- $\therefore$ 计算I_9时，误差为$9!\,(I_0{}^* - I_0) = 9! \times 0.2056 \times 10^{-4}$

§ 3数值计算中应注意的几个问题

- 例1.13： 计算积分$I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx\ \ (n = 0,1,2,\cdots,9)$
- 递推公式改为：

  $I_n = 1 - nI_{n-1}$
- $I_{n-1} = \frac{1-I_n}{n} \qquad n = 9,\cdots,3,2$
- 优点：从后向前计算，则I_n中的误差下降为原来的1/n。所以若取n足够大，误差逐步减小，其影响愈来愈小。
- 问题：初值如何确定
- $I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx \le \int_0^1 x^n\,dx = \boxed{\frac{1}{n+1}}$

§3数值计算中应注意的几个问题

- 例1.13： 计算积分$I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx \ (n = 0,1,2,\cdots,9)$
- $I_{n-1} = \frac{1-I_n}{n} \qquad n = 9,\cdots,3,2$
- $I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx \le \int_0^1 x^n\,dx = \frac{1}{n+1}$

n	I_n	N	I_n
20	0.0000	13	0.0669
19	0.0500	12	0.0718
18	0.0500	11	0.0774
17	0.0528	10	0.0839
16	0.0557	9	0.0916
15	0.0590	8	0.1009
14	0.0627	7	0.1124

§3数值计算中应注意的几个问题

- □建立误差思维
- □做算法，写程序时，要时刻考虑浮点数等机器数的特点
  - ■不是致密的，是稀疏的
- □计算过程中存在舍入误差，误差会沿着计算流程扩散
- □计算数值是有范围的
- □所以可能会出现
  - ■理论上相等的，经过计算不相等了
  - ■理论上可计算的，在一定次数计算之后，变成不能计算（除零，下溢出）
  - ■理论上可计算的，在一定次数计算之后，超出表示范围（上溢出）

作业与实验

作业（书面作业）

P11：习题一：2，3，6

END