数值分析实验一

计 63 陈晟祺 2016010981

2019 年 5 月 12 日

0.1 上机题 1

0.1.1 实验概要

本题要求实现例 1.4，即分析一阶导数的差商近似带来的误差。我们知道，当步长为 h 时，总误差限为：

$$\varepsilon_{tot} = \frac{Mh}{2} + \frac{2\varepsilon}{h}$$

前一项随着 h 减小而减小，后一项则相反，当 $h = 2\sqrt{\varepsilon / M}$ 时总计算误差最小。其中的 M 为 $|f''(\varepsilon)|$ 的上界，而 ε 为双精度浮点数的机器精度。

当 $f(x) = \sin(x)$，在 $x = 1$ 点用差商计算导数。取 $M = 1$ 和 $\varepsilon \approx 10^{-16}$，绘制 ε_{tot} 随 h 的变化关系。

0.1.2 实验过程

首先导入必要的库和声明常数

```
In [1]: import numpy as np
        import matplotlib.pyplot as plt

        M = 1
        eps = 1e-16
```

定义不同的误差计算函数

```
In [2]: def truncate_error(h):
            return M * h / 2

        def round_error(h):
            return 2 * eps / h
```

```
def total_error(h):
    return truncate_error(h) + round_error(h)

def actual_error(h):
    approx = (np.sin(1 + h) - np.sin(1)) / h
    return np.abs(approx - np.cos(1))
```

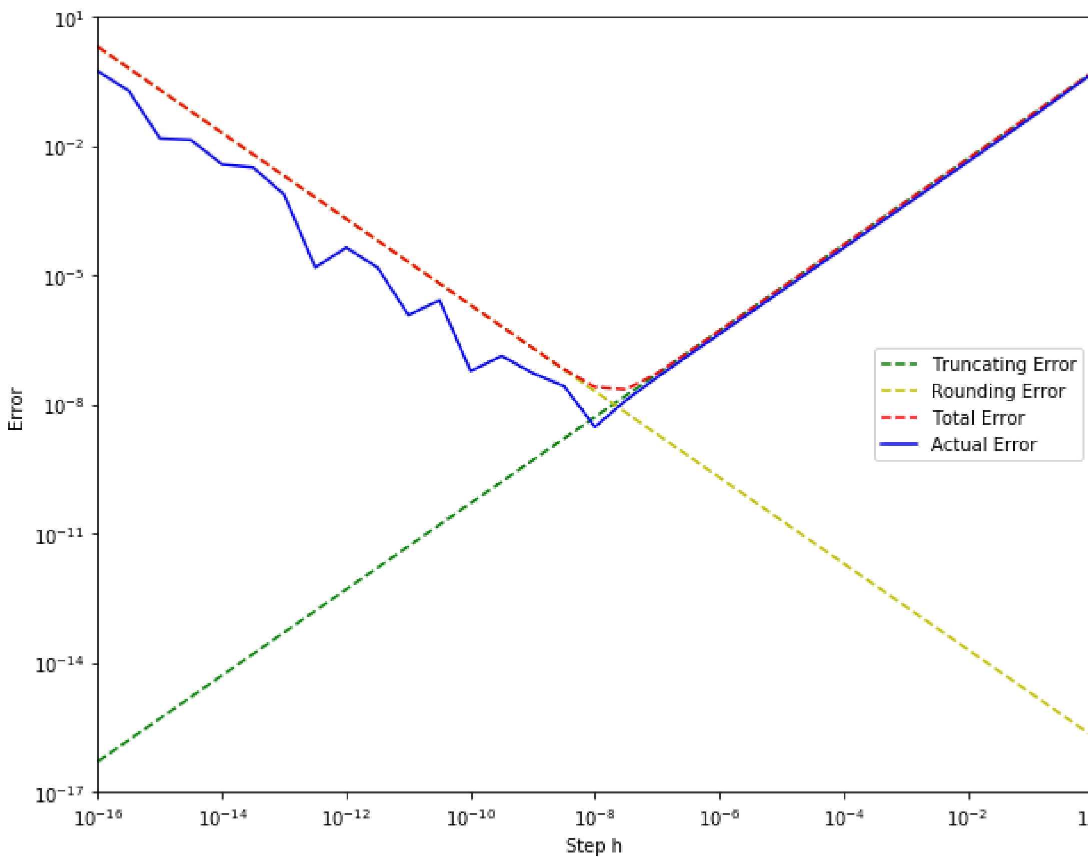
定义绘图区间并计算误差:

```
In [3]: x = [10 ** (-16.0 + i * 0.5) for i in range(33)]
```

```
In [4]: t_errors = list(map(truncate_error, x))
        r_errors = list(map(round_error, x))
        tot_errors = list(map(total_error, x))
        act_errors = list(map(actual_error, x))
```

绘制误差图象:

```
In [5]: fig, ax = plt.subplots(figsize=(10,8))
        ax.set_xscale("log", nonposx='clip')
        ax.set_xlim((1e-16,1e0))
        ax.set_xlabel('Step h')
        ax.set_yscale("log", nonposy='clip')
        ax.set_ylim((1e-17,1e1))
        ax.set_ylabel('Error')
        plt.plot(x, t_errors, 'g--', label='Truncating Error')
        plt.plot(x, r_errors, 'y--', label='Rounding Error')
        plt.plot(x, tot_errors, 'r--', label='Total Error')
        plt.plot(x, act_errors, 'b', label='Actual Error')
        plt.legend()
        plt.show()
```



0.1.3 实验结论

上图与例 1.4 的图象吻合得很好，可以看到 $h = h_0 = 10^{-8}$ 时，实际误差的确是最小的；而离这一最优步长越远，误差就越大。由此可知，例 1.4 给出了一种比较精确的差商近似导数的误差估计方法。在实际中使用差商法时，我们应该选取这一使误差最小的步长值，以得到更精确的结果。

0.2 上机题 3

0.2.1 实验概要

本次要求使用单精度浮点数计算调和级数并在值不再变化时记录 n，将其与理论分析的结论进行比较。然后使用双精度浮点数评估单精度浮点数计算结果的误差，并估计当 n 为何值时不再发生变化。

0.2.2 实验过程

首先找到使单精度计算结果不再变化的 n 值，并进行验证

In [6]:
```python
n = 1
sum = np.float32(0)

while True:
    new_sum = np.float32(sum + 1 / np.float32(n))
    if new_sum == sum:
        break
    n += 1
    sum = new_sum

print('Summation stops at {} with n = {}'.format(sum, n))
```

```
Summation stops at 15.403682708740234 with n = 2097152
```

In [7]:
```python
sum == np.float32(sum + 1 / np.float32(n + 1))
```

Out[7]:
```
True
```

根据理论分析，我们可以知道，当

$$\frac{1}{n} \leq \frac{1}{2}\varepsilon_{\text{mach}} \sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{k}$$

时，结果值将停止变化。我们可以计算得到这一 n 值：

In [8]:
```python
n = 1
sum = 0
eps = 6e-8

while True:
    n_rec = 1 / np.float64(n)
    if n_rec <= eps * sum / 2:
        break
    sum += n_rec
    n += 1

print(n)
```

```
2195967
```

可以看到理论值比估计值略大，这是由于机器精度是近似值，并且在这一计算过程中也产生了截断误差导致的。

使用双精度浮点数再次计算值，并比较误差：

```
In [9]: n = 1
        sum_32 = 0
        sum_64 = 0

        while n <= 2097152:
            sum_64 += 1 / np.float64(n)
            sum_32 = np.float32(sum_32 + 1 / np.float32(n))
            n += 1

        dif_abs = np.abs(sum_64 - sum_32)
        dif_rel = dif_abs / sum_64

        print('Absolute error: {:.3f}, relative error: {:.3%}'.format(dif_abs, dif_rel))
```

```
Absolute error: 0.270, relative error: 1.787%
```

如果使用双精度浮点数进行计算，可以估算停止时的 n。调和级数此时可以近似为 $\ln n+\gamma+\frac{1}{2n}$，其中 γ 为欧拉常数。则不等式转化为：

$$\frac{1}{n} \leq \frac{1}{2}\varepsilon_{\text{mach}}(\ln n+\gamma+\frac{1}{2n})$$

使用 SciPy 对上面的方程进行数值求解：

```
In [10]: from scipy.optimize import fsolve

         def stop(n):
             eps = 1e-16
             gamma = 0.57721566490153286060651209008240243104215933593992
             return eps * (np.log(n) + gamma + 1 / (2 * n)) / 2 - 1 / n

         r = fsolve(stop, [1.])
         print(r)
```

```
[  5.78556829e+14]
```

使用 Linpack 测试可知我计算机的浮点性能峰值大约为 120 GFLOPS，而每次累加一项需要两个浮点运算，因此理论上的运算时间大约为：

```
In [11]: r[0] * 2 / (120 * 1e9) / 3600 # in hours
```

```
Out[11]: 2.6785038364037499
```

考虑到实际 CPU 性能表现、操作系统的调度、计算程序控制流转移开销等额外因素，这一估计应当是严重偏小的。如果以非零开销抽象语言（如 Python、MATLAB）等实现，则运算时间还会进一步地增加。

0.2.3 实验结论

本实验中，通过计算调和级数的和，我体会到了浮点数运算中 "大数吃小数" 的现象。机器精度越高，这类问题就越不容易发生。在实际计算中，一定要注意此类问题，以免导致结果错误或无穷循环等异常情况。