数值计算方法

第一章 数值分析与科学计算引论

天津大学智算学部

第一章数值分析与科学计算引论

1. 科学计算简介
2. 数值分析研究的对象与特点
3. 《数值计算方法》内容简介
4. 误差与有效数字
5. 误差的传播

科学计算简介

什么叫科学计算?

- 科学计算：利用计算机再现、预测和发现客观世界运动规律和演化特征的全过程。科学计算为解决科学和工程中的数学问题利用计算机进行的数值计算。

科学计算					
基于 物理模型	研究 计算方法	设计 可行算法	研制 应用程序	开展 模拟计算	分析 计算结果

- 计算数学：数值计算、数值分析、数值计算方法、数值逼近
- 计算数学已经发展成为现代意义下的计算科学，亦称科学计算

科学计算的地位

当代科学研究的三大支柱

纯粹数学

- 代数、几何、分析
- 概念的抽象性
- 逻辑的严密性
- 结论的确定性

计算数学

- 理论与计算结合，着重数学问题的数值方法及其理论与软件实现
- 应用的广泛性

科学计算的意义

- 大学学习的内容主要包括
  - 科学知识的学习
  - 掌握知识的科学方法的学习
- 学生的能力包括
  - 获取新知识的能力
  - 概括能力
  - 建模能力
  - 分析能力
  - 计算能力
  - 动手能力
  - 表达能力等

数学脑力劳动包括:

- 定理证明
- 公式推导
- 数值计算

科学计算的意义（2）

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$|\boldsymbol{A}| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

$$= \sum_{i_1 i_2 \cdots i_n} (-1)^r (i_1 i_2 \cdots i_n) a_{1 i_1} a_{2 i_2} \cdots a_{n i_n}$$

- 方法1：直接计算

  每个加项计算n-1次乘法，一共n!项，计算|A|共需要

  $$S_1 = n!(n-1)$$

  次乘法运算。

- 方法2：高斯消元法

  $$S_2 = (n-1) + \frac{1}{6} n(n-1)(2n-1)$$

- 对比：

  $$n = 20$$
  $$S_1 = 4.62 \times 10^{19}$$
  $$S_2 = 2489$$

科学计算的意义（3）

- 最理想的结果，可以找到数学问题的解析解
- 在大部分情形下，求解数学问题的解析解很困难，或者解析解很复杂，不利于计算、分析。
- 举例：求解 $$\int_0^1 \sin\frac{1}{x}dx$$
- 牛顿-莱布尼兹公式：
$$\int_a^b f(x)dx = F(a) - F(b)$$
- F(x)理论上存在，但实际中无法找到解析表达

数值分析研究的对象与特点

数值分析研究的主要对象

- 数值分析是计算数学的一个主要部分，计算数学是数学学科的一个分支，主要亚久用计算机求解的各种数学问题的数值及算法及其理论与软件实现

实际问题 → 数学模型 → 数值计算方法 → 程序设计 → 上机计算

重点内容

数值分析的特点

- 面向计算机
- 可靠的理论分析，保证收敛性、稳定性
- 良好的计算复杂性
- 数值实验

课程内容简介

课程内容简介

- CH1 数值计算方法绪论
- CH2 插值法
- CH3 函数逼近与曲线拟合
- CH4 数值积分与数值微分
- CH5 线性方程组的直接解法
- CH6 线性方程组的迭代解法
- CH7 非线性方程（组）的数值解法
- CH8 常微分方程初值问题数值解法
- CH9 深度学习中的数值问题

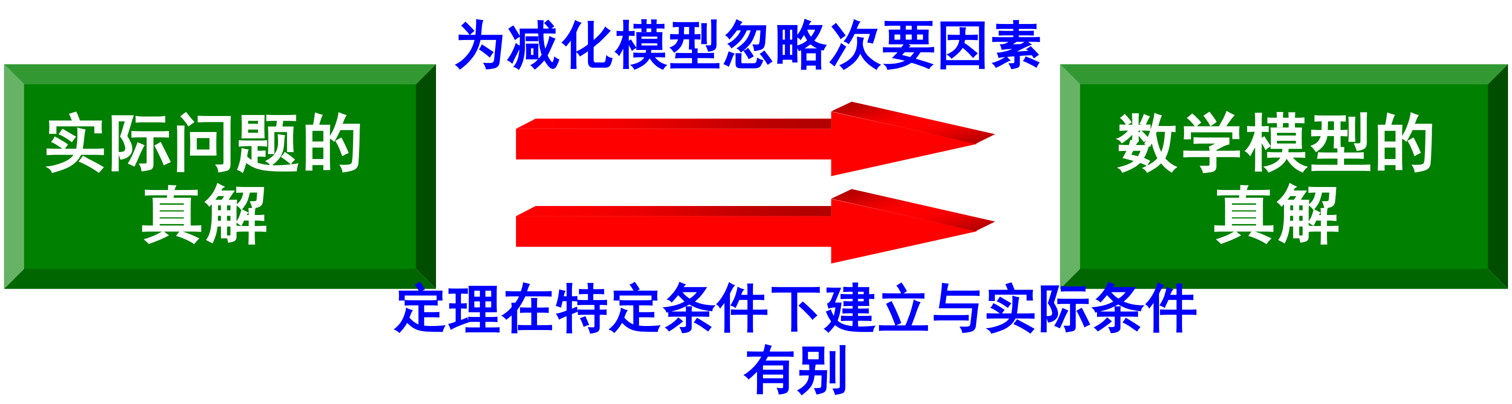
误差与有效数字

误差的来源

- 在用数值方法求解过程中可能产生的误差主要有以下几类:
- 模型误差
- 观测误差
- 截断误差
- 舍入误差

模型误差

- 用数学方法解决一个具体的实际问题，首先要建立数学模型，这就要对实际问题进行抽象、简化，因而数学模型本身总含有误差，这种误差叫做模型误差
- 数学模型是指那些利用数学语言模拟现实而建立起来的有关量的描述
- 数学模型的准确解与实际问题的真解不同



观测误差

- 在数学模型中通常包含各种各样的参变量，如温度、长度、电压等，这些参数往往是通过观测得到的，因此也带来了误差，这种误差叫观测误差。
- 数学模型中的参数和原始数据，是由观测和试验得到的
- 由于测量工具的精度、观测方法或客观条件的限制,使数据含有测量误差,这类误差叫做观测误差或数据误差
- 根据实际情况可以得到误差上下界
- 数值方法中需要了解观测误差,以便选择合理的数值方法与之适应

截断误差

▶精确公式用近似公式代替时,所产生的误差叫截断误差
例如, 函数f(x)用泰勒(Taylor)多项式。

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

近似代替，则数值方法的截断误差是

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1} \qquad （\xi\text{介于}0\text{与}x\text{之间}）$$

▶截断误差的大小直接影响计算结果的精度和计算工作量,是数值计算中必须考虑的一类误差

舍入误差

- 在数值计算中只能对有限位字长的数值进行运算
- 需要对参数、中间结果、最终结果作有限位字长的处理工作，这种处理工作称作舍入处理
- 用有限位数字代替精确数，这种误差叫做舍入误差，是数值计算中必须考虑的一类误差。

误差

- 例如在计算时用3.14159近似代替π，产生的误差

  R= π-3.14159=0.0000026···就是舍入误差。

- 上述种种误差都会影响计算结果的准确性。

- 因此需要了解与研究误差，在数值计算中将着重研究截断误差、舍入误差，并对它们的传播与积累作出分析

绝对误差与绝对误差限

▶ 定义：绝对误差，绝对误差限

准确值：x　　　　近似值：x^*

误差（绝对误差）：近似值与准确值之差

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

由于无法知道 x 准确值，无法计算 e^* 准确值

误差限（绝对误差限）：误差绝对值的上界

$$|e^*| = |x^* - x| \le \epsilon^*$$

$$x^* - \epsilon^* \le x \le x^* + \epsilon^*$$

$$x = x^* \pm \epsilon^*$$

误差无处不在

$$\begin{cases} x_1+\dfrac{1}{2}x_2+\frac{1}{3}x_3=\dfrac{11}{6} \\ \dfrac{1}{2}x_1+\dfrac{1}{3}x_2+\dfrac{1}{4}x_3=\dfrac{13}{12} \\ \dfrac{1}{3}x_1+\dfrac{1}{4}x_2+\dfrac{1}{5}x_3=\dfrac{47}{60} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1+0.50x_2+0.33x_3=1.8 \\ 0.50x_1+0.33x_2+0.25x_3=1.1 \\ 0.33x_1+0.25x_2+0.20x_3=0.78 \end{cases}$$

准确解

将方程组系数舍入成两位有效数字

$$x_1=x_2=x_3=1$$

$$x_1=-6.22, x_2=38.25, x_3=-33.65$$

病态问题

相对误差

- 相对误差：误差与准确值的比值

$$e_r^* = \frac{e^*}{x} \approx \frac{e^*}{x^*}$$

理论式　　　　　　　　　　应用式

- 相对误差限：相对误差绝对值的上界 ϵ_r^* ,即 $|e_r^*| \leq \epsilon_r^*$

$$\epsilon_r^* = \frac{\epsilon^*}{|x^*|}$$

有效数字

- 定义：若近似值 x^* 的误差是某一位的半个单位，该位到 x^* 的第一位共有n位，就说 x^* 有n位**有效数字**。
- 例：取 $\pi = 3.1415926535\cdots$ 的近似值3.14, 3.141, 3.1416, 分别有几位有效数字?
- 解析：先看3.14中的最后一位。如果这是有效位，则真实值 π 应该落在它的前后半个单位的区间内，即 $\pi \in [3.14 - 0.01\times\frac{1}{2}, 3.14 + 0.01\times\frac{1}{2}] = [3.135, 3.145]$。可以看到，该条件是成立的，因此3.14有3位有效数字。

  对于3.141，如果最后一位是有效位，则应有 $\pi \in [3.141 - 0.001\times\frac{1}{2}, 3.141 + 0.001\times\frac{1}{2}] = [3.1405, 3.1415]$。可以看到，该条件不满足，因此3.141只有3位有效数字。

  同理可分析3.1416有5位有效数字

有效数字

▶若有数字x, 经过四舍五入后得到其近似值

$x^* = \pm a_1.a_2a_3\cdots a_n \times 10^m$ 其中，$a_1,\cdots,a_n$ 分别为0,1,···,9中的数字，且a1≠0，m为整数，则x^*的有效位数就是从最后一位到第一个非0位的位数，即为有n位效数字。并且$|x - x^*| \le \frac{1}{2} \times 10^{m-n-1}$

▶此结论可以反应绝对误差限与有效数字位数的关系。

误差的传播

加减法的误差

- 加减法的绝对误差

$$(x \pm y) - (x^* \pm y*) = (x - x^*) \pm (y - y^*)$$

- 即有：

$$e^*(x \pm y) = e^*(x) \pm e^*(y)$$

- 相对误差的加法：

$$e_r^*(x+y) = \frac{e^*(x)+e^*(y)}{x+y} = e_r^*(x)\frac{x}{x+y} + e_r^*(y)\frac{y}{x+y}$$

- x与y同号时，相对误差在 $e_r^*(x)$ 和 $e_r^*(y)$ 之间。
- 当x与y异号时，相对误差可能会变大。特别当接近0，或者说两个接近的数相减时，相对误差会变大，表现出来有效数字会减小。如86.034-86.032=0.002，由5位有效数字变为1位有效数字。

乘除法的误差

- 由于 $xy - (x^*y^*) = x(y - y^*) + y^*(x - x^*)$
- 所以 $e^*(xy) = xe^*(y) + y^*e^*(x) \approx xe^*(y) + ye^*(x)$
- 相对误差：

$$e_r^*(xy) = \frac{e^*(xy)}{xy} = \frac{e^*(y)}{y} + \frac{e^*(x)}{x}\frac{y^*}{y} \approx e*_r(x) + e_r^*(y)$$

- 对于除法，有

$$e^*(\frac{x}{y}) = \frac{x}{y} - \frac{x^*}{y^*} = \frac{xy^* - x^*y}{yy^*} \approx \frac{1}{y}e^*(x) - \frac{x}{y^2}e^*(y)$$

$$e_r^*(\frac{x}{y}) \approx e_r^*(x) - e_r^*(y)$$

- 当 $|y| \ll |x|$，$\frac{x}{y}$ 舍入误差可能会增大很多。

数值计算应注意的问题

- 1. 避免两个相近的数相减
- 例：计算 $A = 10^7(1-\cos 2^\circ)$ 的值
- 方法1：查表得 $\cos(2^\circ) \approx 0.994$，所以，

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

解只有1位有效数字

- 方法2：由于 $1-\cos x = 2\sin^2\dfrac{x}{2}$,所以，

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

解具有2位有效数字。

数值计算应注意的问题

- 1. 避免两个相近的数相减
- 通过改变计算公式减少有效数字的损失
- 若有 $x \approx y$，则使用 $\log x - \log y = \log \dfrac{x}{y}$ 代替左边
- 若x很大时，则使用

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

- 一般情况下，当 $f(x) \approx f(y)$ 时，可以泰勒展开：

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

取右端有限项近似左端

数值计算应注意的问题

- 2. 避免大数“吃”小数
- 计算机在进行运算时，首先要把参加运行的数对阶，即把两数都写成绝对值小于1而阶码相同的数。如 $a=10^9+1$ 必须改写成$a=0.1\times10^{10}+0.0000000001\times10^{10}$。若计算机只能表示8位小数，则算出$a=0.1\times10^{10}$ 。这种情况有时允许，有时不允许。

数值计算应注意的问题

- 例：求二次方程 $x^2-(10^9+1)x+10^9=0$ 的根。
- 利用因式分解，此方程两根为 $x_1=10^9, x_2=1.$
- 使用求根公式进行数值计算时，有

$$x=\frac{10^9+1\pm\sqrt{(10^9+1)^2-4\times10^9}}{2}$$

若用8位小数计算机运算，有 $10^9+1\approx10^9$

$\sqrt{(10^9+1)^2-4\times10^9}\approx10^9$，得 $x_1=10^9, x_2=0$

为避免此情况出现，使用

$$x_2=\frac{10^9+1-\sqrt{(10^9+1)^2-4\times10^9}}{2}=\frac{2\times10^9}{10^9+1+\sqrt{(10^9+1)^2-4\times10^9}}$$

$$\approx\frac{2\times10^9}{10^9+10^9}=1$$

数值计算应注意的问题

▶3. 简化计算，减少运算次数，提高效率

▶例： 多项式求值的秦九韶算法

设 $p(x)=a_0x^n+a_1x^{n-1}+\cdots+a_{n-1}x+a_n$,求 x^* 处的值 $p(x^*)$

若直接计算每一项，则需要乘法次数为：

$$\sum_{i=0}^{n}(n-i)=1+2+\cdots+n=\frac{n(n+1)}{2}$$

若将其表示为 $p(x)=\underbrace{(\cdots(}_{\text{n个括号}}a_0x+a_1)x+\cdots+a_{n-1})x+a_n$

则可使用如下形式进行计算：

乘法次数?

$$\begin{cases} b_0 &= a_0, \\ b_i &= b_{i-1}x^*+a_i, i=1,2,\cdots,n \end{cases}$$

数值稳定性

- 用一个算法计算，由于初始数据误差在计算中传播使计算结果误差增长很快，就是数值不稳定的
- 例：计算 $I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n e^x dx (n=0,1,\cdots)$
- 解：由分部积分公式 $\int udv = uv - \int vdu$，可得

$$I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n de^x = e^{-1}x^n e^x\Big|_0^1 - e^{-1}n\int_0^1 x^{n-1}e^x dx = 1 - nI_{n-1}$$

所以，其递推公式为：

$$\begin{cases} I_n &= 1 - nI_{n-1} \\ I_0 &= 1 - e^{-1} \end{cases}$$

易知：

$$e^{-1}\int_0^1 x_n e^0 dx = \frac{e^{-1}}{n+1} < I_n < e^{-1}\int_0^1 x_n e^1 dx = \frac{1}{n+1}$$

数值稳定性

- 方法1，先算出I_0,再算$I_1, I_2, \cdots$，将计算结果用$\tilde{I}_n$表示，使用如下公式计算：

$$\begin{cases} \tilde{I}_0 & = & 1 - e^{-1} \\ \tilde{I}_n & = & 1 - n\tilde{I}_{n-1}, n = 1, 2, \cdots \end{cases}$$

n	$\tilde{I}_n$		n	$\tilde{I}_n$
0	0. 6321 ↓		5	0. 1480 ↓
1	0. 3679		6	0. 1120
2	0. 2642		7	0. 2160
3	0. 2074		8	– 0. 7280
4	0. 1704		9	7. 552

数值稳定性

▶方法2：取n=9，由 $\frac{e^{-1}}{n+1} < I_n < \frac{1}{n+1}$,得 $\frac{e^{-1}}{10} < I_9 < \frac{1}{10}$
取 $I_9 \approx \frac{1}{2}(\frac{e^{-1}}{10} + \frac{1}{10}) = 0.0684$, 结果用I_n^* 表示， 用以下公式计算：

$$\begin{cases} I_9^* = 0.0684 \\ I_{n-1}^* = \frac{1}{n}(1 - I_n^*), n = 9, 8, \cdots, 1 \end{cases}$$

n		I_n^*(用 (B) 计算)	n		I_n^*(用 (B) 计算)
0		0. 6321	5		0. 1455
1		0. 3679	6		0. 1268
2		0. 2643	7		0. 1121
3		0. 2073	8		0. 1035
4		0. 1708 ↑	9		0. 0684 ↑

数值稳定性

- 分析：第一种方法中，$\tilde{I}_n = 1 - n\tilde{I}_{n-1}$，第n步的计算误差与第n-1步的误差有关系$E_n = -nE_{n-1}, n = 1, 2, \cdots$

容易得到

$$E_n = (-1)^n n! E_0$$

当n=8时，若有$|E_0| = 0.5 \times 10^{-4}$，则$E_8 = 8! \times |E_0| > 2$

说明所计算已无有效数字。

第二种方法中，$I_{n-1}^* = \frac{1}{n}(1 - I_n^*)$，同样分析可得，第0步误差与第n步误差有 $|E_0^*| = \frac{1}{n!}|E_n^*|$

所以虽然 $|E_9^*|$ 较大，但由于误差逐步缩小，故计算是可信的。

小结

- 绝对误差与相对误差
- 有效数字
- 误差在运算过程中的传播
- 数值计算中应注意的问题
- 算法的数值稳定性