科学计算(Scientific Computing)

第一章 误差

任课老师: Xiao-liang Cheng(程晓良)

Department of Mathematics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, P.R. China.

2023. 2 .28

科学计算

1. 教材和参考书

科学计算

科学计算

科学计算

科学计算

1. 教材和参考书
2. 误差的来源
3. 绝对误差,相对误差和有效数字
4. 误差的传播
5. 减少误差的一些方法与数值稳定性

科学计算

1. 教材和参考书
2. 误差的来源
3. 绝对误差,相对误差和有效数字
4. 误差的传播
5. 减少误差的一些方法与数值稳定性
6. MATLAB软件介绍

教材和参考书

- 徐翠薇, 孙绳武. 计算方法引论(第4,5版). 北京:高等教育出版社,2015.
- 周铁, 徐树方, 张平文, 李铁军. 计算方法. 北京:清华大学出版社,2006.
- 叶兴德,程晓良,陈明飞,薛莲, 数值分析基础, 浙江:浙江大学出版社,2008.
- 林成森, 数值分析, 北京:科学出版社,2006.
- 王能超, 计算方法–算法设计及其Matlab实现，北京:高等教育出版社，2005.
- 朱建新,李有法, 数值计算方法，高等教育出版社，2012.

课堂安排

1. 作业，每周一次，20%, 包括理论分析、算法及数据处理;
2. 上机作业四次，春、夏学期结束各交两个作业，20%;
3. 期末考试，60%.

上机作业(数值实验报告)要求交纸质版:

- 问题;
- 公式与算法;
- 程序;
- 数据结果;
- 结论.

科学计算的重要性

- 计算数学是一门随着计算机发展而形成的学科, 研究如何应用计算机有效地求解各类计算问题的方法和理论, 其中涉及的计算问题主要来源于科学研究和工程设计,因此叫科学计算。
- 大规模科学计算的发展水平是国家综合国力的重要标志.
- 现代科学的发展已使科学研究逐步从实验模拟、理论推理转向数值模拟的方向发展. 科学计算已逐渐成为科学家们在各自研究活动中有力工具和关键手段，算法的发展和计算机硬件的发展具有同样重要的作用.
- 科学计算是一个多学科交叉的应用基础学科，需要数学家、工程师和计算机科学家进行跨学科和跨行业的协作研究.

科学计算的重要性

- 大数据时代，算法是基础.
- 信息处理（如建立重要数据库、数据分析、网络安全等）变得越来越重要，对培养掌握现代科学技术的综合人才有较大的帮助.
- 信息化已成为当今世界发展的重要趋势，也是衡量一个国家现代化水平的重要标志。信息科学可以理解为信息获取、传输、处理与控制的科学。
- 教育部1998年颁布的普通高等院校专业目录中，"信息与计算科学专业"被列为数学类下的一个新专业。
- 目前国内几乎所有的综合性大学（约400所）都有信息与科学计算专业，每年招收3万名左右的本科生, 而在各科研单位和产业部门也广泛分布着一支从事这方面研究和应用的活跃的专业队伍。

科学计算对基础数学的作用

- 数值模拟对基础数学研究起辅助作用;(解的存在性问题)
- 数值计算(符号证明)可以完成定理的证明(四色问题);
- 数值方法提供一些定理的证明;(Picard证明)
- 数值计算可以否定或加强某些猜测;(数论等,Riemann猜想)
- 科学计算是数学的一种新的研究手段.

科学计算的一般策略

寻求某个计算问题解的一般策略是将复杂或困难的问题用同解或至少解相近的简单问题代替. 这种方案包括:

- 用有限维空间代替无限维空间;
- 用有限过程代替无限过程，如用有限和代替积分或无穷级数，用有限差分代替导数;
- 用代数方程代替微分方程;
- 用线性问题代替非线性问题;
- 用低阶方程组代替高阶方程组;
- 用简单函数，如多项式代替复杂函数;
- 用简单结构的矩阵代替一般矩阵.

实际问题$\longrightarrow$数学模型$\longrightarrow$数值方法$\longrightarrow$实际问题

误差的来源

误差一般有如下几种类型:

- 模型误差
  在建立数学模型时,往往只考虑主要因素, 而忽略次要因素. 因而数学模型常含有误差,这种误差叫做模型误差.
  例如,自由落体运动的数学模型,只考虑地球的引力而忽略月球的引力,甚至忽略空气的阻力.

误差的来源

误差一般有如下几种类型:

- 模型误差
  在建立数学模型时,往往只考虑主要因素, 而忽略次要因素. 因而数学模型常含有误差,这种误差叫做模型误差.
  例如,自由落体运动的数学模型,只考虑地球的引力而忽略月球的引力,甚至忽略空气的阻力.
- 测量误差
  测量工具本身只有一定的精度,以及在读取测量数据时也有一定的误差,因此得到的测量数据是物体的近似数据,测量数据常含有误差,这种误差叫做测量误差.
  例如,医生在测量病人的体温时,得到38.6 度,这是一个精确到小数点后一位的数据,是符合医学精度的数据.

误差的来源(续)

- 截断误差
  在数学模型中常常有一些方程或表达式无法直接在计算机上计算, 用易于计算的近似方程和近似表达式来代替, 此时会产生误差. 截断误差是指原来表达式的准确值与近似公式的准确值的差. 例如, 如果用$(x-\frac{1}{3!}x^3)$ 代替$\sin x$. 则利用Taylor 公式得到截断误差为:
  $$\sin x-(x-\frac{1}{3!}x^3)=\cos(\xi)x^5.$$
  当$|x|$ 比较小时,这样代替还是可以的.

误差的来源(续)

- 截断误差
  在数学模型中常常有一些方程或表达式无法直接在计算机上计算,用易于计算的近似方程和近似表达式来代替, 此时会产生误差.
  截断误差是指原来表达式的准确值与近似公式的准确值的差.
  例如, 如果用$(x-\frac{1}{3!}x^3)$ 代替$\sin x$. 则利用Taylor 公式得到截断误差为:
  $$\sin x-(x-\frac{1}{3!}x^3)=\cos(\xi)x^5.$$
  当$|x|$ 比较小时,这样代替还是可以的.
- 舍入误差
  计算机处理的数据是有限位的,在计算过程中出现位数超过规定的数据时,要对该数据作四舍五入的处理,由此产生的误差称为舍入误差.

绝对误差

定义: 近似值与准确值的差称为绝对误差.

设x 是准确值, $\hat{x}$ 是近似值,则绝对误差=$\hat{x}-x$.
通常我们无法知道准确值,因此不能算出误差的准确值,只能估计出误差的绝对值不超过某个正数, 这个正数称为绝对误差限.

例: 求$\hat{x}=3.14$ 与π 的绝对误差限.

解: 由于$3.1415<\pi<3.1416$, 因此

$$|\hat{x}-\pi|\leq|3.14-3.1416|=0.0016$$

所以绝对误差限是0.0016 .

相对误差

只用绝对误差还不能说明数的近似程度,例如甲打字时每百个字错一个,乙打字时平均每千个字错一个, 他们的误差都是错一个,但显然乙要准确些.这就启发我们除了要看绝对误差大小外,还必须顾及量的本身.

定义: 绝对误差与准确值的比称为相对误差.

设x 是准确值, $\hat{x}$ 是近似值,则相对误差$e_r = \frac{\hat{x}-x}{x}$.

由于$\hat{x}$未知, 通常我们用$e_r = \frac{\hat{x}-x}{\hat{x}}$来代替.

相对误差限

我们无法知道准确值，也不能算出相对误差的准确值,只能估计出相对误差的绝对值不超过某个正数，这个正数称为相对误差限(界).

例: 求$\hat{x} = 3.14$ 与π 的相对误差限.

解: 由于$3.1415 < \pi < 3.1416$，因此

$$\left|\frac{\hat{x}-\pi}{x}\right| \leq \left|\frac{3.14-3.1416}{3.1415}\right| < 0.0006$$

所以相对误差限是0.0006 .

有效数字

定义: 若一个数的误差不大于该数某位数字的半个单位,则从左边第一个非零数字起到这一位数字止都是该数的有效数字. 其个数称为该数有效数字的位数.

例如, $\pi = 3.14159265\cdots$,则π 的3 位有效数字是3.14 ; π 的4 位有效数字是3.142 .

注意: 有效数字的最后一位要对后面的数字作四舍五入处理.

有效数字与绝对误差、相对误差的关系

设x^*具有n位有效数字，即

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

其中$a_1 \neq 0$,

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

则相对误差满足不等式

$$|e_r^*| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1},$$

其中a_1为x^*的第一个非零数字.

若相对误差满足

$$|e_r^*| \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-n+1},$$

其中a_1为x^*的第一个非零数字, 则它至少具有n位有效数字.

误差的传播

- 基本算术运算结果的误差界.

  设x, y是准确值, $\hat{x}, \hat{y}$是近似值,则误差近似地看做是相应的微分, 即

$$dx \approx \hat{x} - x, \quad dy \approx \hat{y} - y.$$

则

$$d(x \pm y) = dx \pm dy,$$

$$d(xy) = ydx + xdy,$$

$$d(\frac{x}{y}) = \frac{-xdy + ydx}{y^2}, \quad y \neq 0.$$

最后一式

$$\frac{\hat{x}}{\hat{y}} - \frac{x}{y} = \frac{-xdy + ydx}{y\hat{y}}.$$

误差的传播(续)

若把$d_r x$和$d_r y$看做是$\hat{x},\hat{y}$的相对误差界,即

$$d_r x = |dx/x| = |d(ln(x))|, \quad d_r y = |dy/y| = |d(ln(y))|,$$

则(例如)

$$d_r(x+y) = x/(x+y) \cdot dx/x + y/(x+y) \cdot dy/y \approx \max(d_r x, d_r y),\ xy > 0,$$

误差的传播(续)

- 函数求值的误差估计

$$\Delta f(x) \approx df(x) = f'(\hat{x})dx,$$

例如: 函数$y = x^n$,则

$$d_r y = d(ln(y)) = nd(ln(x)) = nd_r x.$$

- 计算机浮点运算的误差

机器精度, eps=2.220446049250313e-016.

减少误差的一些方法

由于舍入误差的影响,在数学上等价的二个表达式变得不等价. 例如, 计算表达式: $5/6-(1/2+1/3)=0$;在Matlab7.1 上计算,结果是: $5.5511151231257 83e-017$. 在设计计算程序时,要避免把二个实数表达式是否相等作为判别条件.

在数学上等价的二个表达式,在计算机上得到的结果可能是不同的.在数学上等价的若干个表达式中,选择计算精度高的表达式.

(1). 要避免两相近数相减

在数值运算中两相近数相减会使有效数字严重损失.
例如,计算$(\sqrt{x+1}-\sqrt{x})$,当x 很大时,如果直接计算,会使有效数字严重损失. 但是,如果对计算公式作一变换$\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$ 进行计算,就会保持较多的有效数字.

减少误差的一些方法(续1)

(2). 要防止大数“吃掉”小数

例如在五位十进制计算机上,计算

$$12345+\sum_{i=1}^{100}\frac{i}{500}$$

如果直接计算,结果是12345,只有3位有效数字;如果改变运算次序

$$\sum_{i=1}^{100}\frac{i}{500}+12345$$

得到12355,有5位有效数字.有效数字增加了2位.

减少误差的一些方法(续2)

(3). 注意简化计算步骤,减少运算次数

同样一个计算题,如果能减少运算次数,不但可节省计算机的计算时间,还能减少舍入误差.

例如,计算x^{14} 的值,如果逐个相乘要用13次乘法,但若写成$x^2x^4x^8$只要做5次乘法运算即可.

一般地,

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

(秦九韶算法或Horner算法):

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

```
P(x)=a(n);
for k=n:-1:1
P(x)=x*P(x)+a(k-1);
end
```

减少误差的一些方法(续3)

(4). 绝对值太小的数不宜作除数

如果在一个分数中,分母需要经过运算得到,其绝对值很小,如果直接计算,可能会使有效数字严重损失.
例如,计算$\frac{1.23}{\sqrt{x+1}-\sqrt{x}}$, 当$x$ 很大时,如果直接计算,会使有效数字严重损失.如果把计算公式变换为
$1.23(\sqrt{x+1}+\sqrt{x})$ 进行计算,就会保持较多的有效数字.

减少误差的一些方法(续4)

(5). 用稳定的计算公式

计算I_8:

$$I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n e^x\,dx, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

由分部积分,得到

$$I_n = 1 - nI_{n-1}, \quad n = 1, 2, \cdots$$

$$I_0 = 1 - e^{-1} \approx 0.6321$$

用四位小数计算,$I_8 \approx -0.728$显然是错误(正确应该是正数).
但是,估计$e^{-1}/20 \le I_{19} \le 1/20$, $I_{19} \approx \frac{1}{20}(1 + e^{-1})$, 四位小数计算, 用

$$I_{n-1} = \frac{1}{n}(1 - I_n), n = 19, 18, 17, \cdots, 9$$

可以发现得到I_8的误差不超过10^{-4}.

减少误差的一些方法(续5)

(6). 用有效的好算法 计算$ln\,2$ 用级数的方法,

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

取$x=1$,级数收敛(很慢!),

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

如果

$$\begin{aligned} ln\frac{1+x}{1-x} &= ln(1+x)-ln(1-x) \\ &= 2\Big(x+\frac{x^3}{3}+\frac{x^5}{5}+\cdots+\frac{x^{2n+1}}{2n+1}+\cdots\Big) \end{aligned}$$

取$x=1/3$,级数收敛(很快!),

$$ln\,2=2\Big(\frac{1}{3}+\frac{1}{3}(\frac{1}{3})^3+\frac{1}{5}(\frac{1}{3})^5+\cdots+\frac{1}{2n+1}(\frac{1}{3})^{2n+1}+\cdots\Big)$$

好的算法(软件)提高效率就想硬件速度提高同样重要!

数值稳定性

对同一个问题,用不同的算法进行计算.舍入误差对计算结果的精确性影响较小的算法,具有较好的数值稳定性;反之就认为算法的稳定性较差,或者是不稳定的.

分析整个算法的舍入误差是十分复杂的工作. 一般设在算法的初始数据中有一定的误差,而中间的运算过程是精确进行的.这样可以简化误差分析的工作.

由于数值稳定性直接与算法有关,所以我们通过例子来分析算法的数值稳定性.

数值稳定性

例 分析下列计算

$$\begin{array}{l} x_{n+1} = 2.5x_n - x_{n-1} \\ x_1 = \frac{1}{3}\ ,\ x_2 = \frac{1}{6} \end{array} \tag{5.1}$$

的数值稳定性.

解 如果精确运算,得到$x_n = \frac{2}{3}(\frac{1}{2})^n$.
但是,如果对x_1, x_2 作微小的扰动,例如令

$$x_1 = \frac{1}{3} + \frac{2}{30000}\ ,\ x_2 = \frac{1}{6} + \frac{4}{30000}$$

则有$x_n = \frac{2}{3}(\frac{1}{2})^n + \frac{1}{30000}2^n$,这是一个发散数列.
所以本算法是数值不稳定的.

数值稳定性

一般地，如果初值

$$x_{n+1} = 2.5x_n - x_{n-1}$$
$$x_1 = \tfrac{1}{3} + \varepsilon_1\ ,\ x_2 = \tfrac{1}{6} + \varepsilon_2$$

则解

$$x_n = c_1(\frac{1}{2})^n + c_2 2^n,$$

$$c_1 = \frac{2}{3} + \frac{4}{3}(2\varepsilon_1 - \varepsilon_2), \quad c_2 = \frac{1}{6}(-\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2).$$

只要$c_2 \neq 0$, 数值算法就是不稳定的.

MATLAB软件: MATrix LABoratory

数学软件应具有的特性:

- 可靠性: 对简单问题总能正确运行.
- 稳健性: 一般能解决难的问题，只有在特定情况下才会失效.
- 精确度: 由问题和输入数据能产生精确的结果, 同时还能对所达到的精确度作出估计.
- 效率: 使解决问题所需的运行时间和存储接近最小.
- 可移植性: 新的计算环境下只需微小的改动.
- 维护性: 易于理解和修改.
- 适用性: 界面友好.
- 适应性: 求解问题广泛.

MathWorks, Inc. (www.Mathworks.com). 软件演示.

基本操作及特点

- 一切皆矩阵，变量是矩阵，函数是矩阵函数，运算是矩阵运算;
- Matlab是一个强大的数据处理的工具，也是一个很好的绘画工具;
- 强大的工具箱，直接调用各类求解器;
- 基本模块: "if-else-end", "for-end"或"while-end", 但要充分利用其矩阵计算的特性，尽量少用循环;
- 使用帮助命令; "help sum"显示函数"sum"的使用规则;
- 生成和运行M文件: 用任何文字编辑器输入filename.m的文件, 输入文件名后等价于在命令窗口输入文件中的这些命令;
- 建立自己的函数文件: "function y=filename(.,.,...)";
- 使用说明: "demo".

例:

$\gg A = [4, 6, 0; -3, -5, 0; -3, -6, 1];$

$\gg [v, d] = eig(A);$ v: 特征向量; d: 特征值;

$\gg b = [3, 3, -1]';$

$\gg x = A\backslash b;$

$\gg size(A),\ length(A) = max(size(A)),\ flipud(A);$

$\gg fliplr(A);$ 矩阵作左右翻转

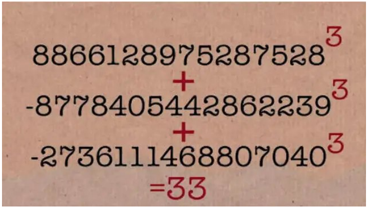
$\gg diag(A),\ diag(v);$

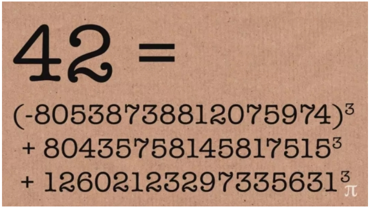
$\gg [X, Y] = meshgrid(x, y);\ Z = X.^2 + Y.^2;$

$\gg mesh(X, Y, Z),\ surf(X, Y, Z).$

练习

两个大数的加法和乘法的程序，验证下列式子:





练习

$x^3+y^3+z^3=3$第三组解是多少?这个58年难题被40万台电脑算出来了(2021年).

$$1^3+1^3+1^3=3;\quad 4^3+4^3+(-5)^3=3.$$

$$569936821221962380720^3+$$
$$(-569936821113563493509)^3+$$
$$(-472715493453327032)^3=3.$$