科学计算的基本概念

数值分析关注的几个概念

部分数学基础知识

误差的有关概念

算术运算的误差估计

数值分析关注的几个概念

- **准确性**：结果可信吗？

　对于复杂问题，很少能够计算出问题的确切答案，因此我们必须了解数值方法产生了多少误差，以及如何控制（甚至减少）这些误差。

- **效率**：该数值算法是否占用过多的计算机时间和计算资源？

　计算过程的两种工作方式，一种是快速但准确性低，另一种是慢速但准确性高。

数值分析关注的几个概念

- **稳定性：** 该方法对于相似数据是否产生相似结果？

如果我们更改少量数据，就会得到截然不同的结果——我们就说该方法是不稳定的；否则称为稳定的方法。

由于不稳定的方法往往会产生不可靠的结果，所以数值分析追求能进行有效计算又非常稳定的方法。

数值分析关注的几个概念

- **误差分类：**

模型误差：建立数学模型时所引起的误差；

观测误差：测量工具的限制或在数据的获取时随机因素所引起的物理量的误差。

截断误差：求解数学模型时，用简单代替复杂，或者用有限过程代替无限过程所引起的误差。

舍入误差：计算机表示的数的位数有限，通常用四舍五入的办法取近似值，由此引起的误差。

部分数学基础知识

1.一元函数 $y=f(x)$的Taylor 公式

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

$$+\frac{f^{(n)}(x^*)}{n!}(x-x^*)^n+\frac{(x^*-x)^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi).$$

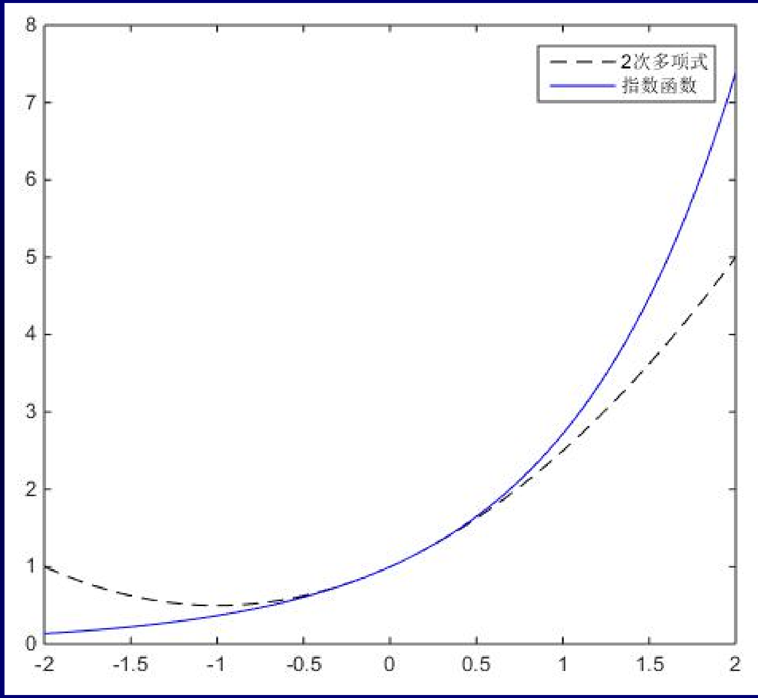
或

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

$$+\frac{f^{(n)}(x^*)}{n!}(x-x^*)^n+O(x^*-x)^n.$$

部分数学基础知识

1.一元函数 $y=f(x)$的Taylor 公式



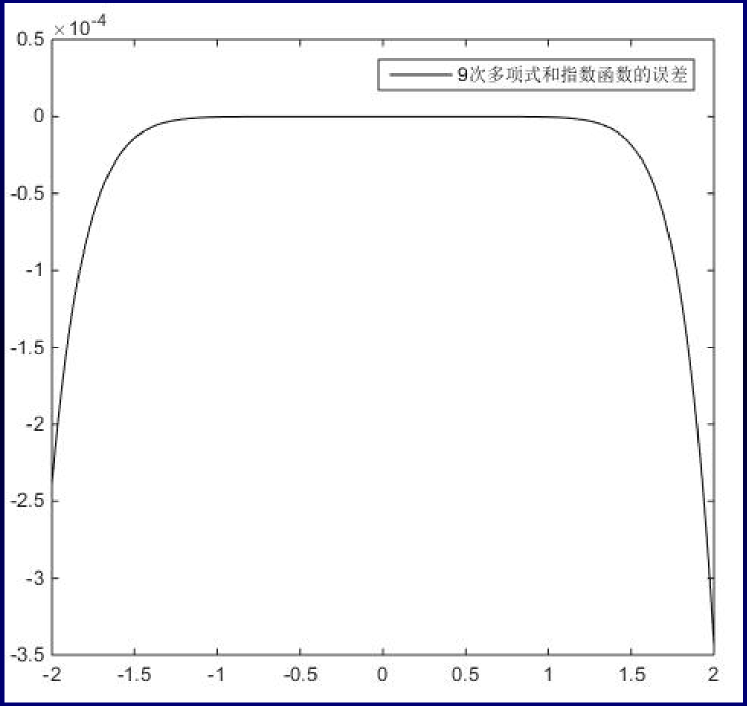


图1.1 e^x的多项式近似情况及误差

部分数学基础知识

2.一元函数 $y=f(x)$的中值定理

$$f'(\xi)=\frac{f(b)-f(a)}{b-a}.$$

或

$$f(x_1)-f(x_2)=f'(\xi)(x_1-x_2).$$

3.（中间值定理） 设$f\in C$（$[a，b]$），假设w是介于f（a）和f（b）之间的一个数值，也就是说，

$f(a)\le w\le f(b)$ 或者是 $f(b)\le w\le f(a)$，那么就存

$f(a)\le w\le f(b)$

在着一个点$c\in[a，b]$，满足 $f(c)=w$.

部分数学基础知识

4.（积分中值定理）一元函数 $y=f(x)$的积分中值定理：设f和g都在$C([a, b])$中，并假设g在区间$[a, b]$上的不会变号。则存在一个点$\xi\in [a, b]$使得

$$\int_a^b g(t)f(t)dt = f(\xi)\int_a^b g(t)dt.$$

部分数学基础知识

5.（离散平均值定理）设$f\in C$（$[a，b]$），并考虑和

$$S=\sum_{k=1}^{n}a_k f\left(x_k\right)$$

每个点$x_k\in[a，b]$且系数满足

$$a_k\ge 0,\quad \sum_{k=1}^{n}a_k=1$$

则存在一个点$\eta\in[a，b]$，使

$$f(\eta)=\sum_{k=1}^{n}a_k f\left(x_k\right)$$

部分数学基础知识

6.近似相等：如果两个量彼此近似相等，我们将使用符号“≈”表示这种关系。比如A≈B.

注：近似相等满足代数运算中的“等价关系”的传递，对称和反身性质

$$A \approx B,\quad B \approx C \Rightarrow A \approx C$$

$$A \approx B \Rightarrow B \approx A$$

$$A \approx A$$

部分数学基础知识

7.渐近阶：使用的一种所谓的“ O”表示法来表示“渐近”近似。比如：

若

$$|y - y_h| \le C\beta(h)$$

则记为

$$y = y_h + O(\beta(h)), \quad 当\ h \to 0.$$

其中

$$\lim_{h\to 0} \beta(h) = 0.$$

部分数学基础知识

8.数字精度对计算的影响

$$f(x)=\frac{e^x-1}{x}$$

k	x_k	$f(x)$	单精度	双精度
1	0. 500000000000000	1. 297442541400260	1. 297442436218300	1. 297442541400300
2	0. 250000000000000	1. 136101666750970	1. 136101722717300	1. 136101666751000
3	0. 125000000000000	1. 065187624534610	1. 065187454223600	1. 065187624534600
4	0. 062500000000000	1. 031911342685750	1. 031911849975600	1. 031911342685800
5	0. 031250000000000	1. 015789039971290	1. 015789031982400	1. 015789039971300
6	0. 015625000000000	1. 007853349547890	1. 007850646972700	1. 007853349547900
7	0. 007812500000000	1. 003916442425350	1. 003921508789100	1. 003916442425300
8	0. 003906250000000	1. 001955670616950	1. 001953125000000	1. 001955670617000
9	0. 001953125000000	1. 000977198593430	1. 000976562500000	1. 000977198593400
10	0. 000976562500000	1. 000488440234450	1. 000488281250000	1. 000488440234400
11	0. 000488281250000	1. 000244180366280	1. 000244140625000	1. 000244180366300
12	**0. 000244140625000**	**1. 000122080246910**	**1. 000000000000000**	**1. 000122080246900**
13	0. 000122070312500	1. 000061037639170	1. 000000000000000	1. 000061037639200
14	0. 000061035156250	1. 000030518200220	1. 000000000000000	1. 000030518200200

➢误差的有关概念

假设某一数据的准确值为 x^*, 其近似值为 x，则称

$$e(x) = |x - x^*|$$

为 x 的绝对误差。

而称 $$e_r(x) = \frac{e(x)}{x^*} = \left|\frac{x - x^*}{x^*}\right|, \qquad (x^* \neq 0)$$

为 x 的相对误差。

也用 $$e_r(x) = \frac{e(x)}{x} = \left|\frac{x - x^*}{x}\right|, \qquad (x \neq 0)$$

如果存在一个适当小的正数 ε ，使得

$$e(x)=|x^*-x|\le\varepsilon$$

则称 ε 为**绝对误差限**。

如果存在一个适当小的正数 ε_r ，使得

$$e_r(x)=\left|\frac{e(x)}{x^*}\right|=\left|\frac{x-x^*}{x^*}\right|\le\varepsilon_r$$

称 ε_r 为**相对误差限**。

观察：

若 $\left|\frac{x-y}{x}\right|=1,$ 则两个数字差异较大，y的有效位数较少；

若 $\left|\frac{x-y}{x}\right|=0.123\times10^{-9}$ 则y比较接近x，y的有效数字较多.

定义 一个有n 位有效数字的数

$$x=\pm0.a_1a_2\cdots a_n\times10^m$$

则绝对误差限应满足：

$$e(x)=\left|x-x^*\right|\le\frac{1}{2}\times10^{m-n}$$

算术运算的误差估计

1.一元函数 $y=f(x)$误差分析(准确值 $y^*=f(x^*)$)

由Taylor 公式

$$f(x^*)-f(x)=(x^*-x)f'(x)+\frac{(x^*-x)^2}{2}f''(\xi)$$

$$|e(y)|=|y^*-y|\approx|x^*-x||f'(x)|\le|f'(x)|\varepsilon(x)$$

所以 $\varepsilon(y)\approx|f'(x)|\varepsilon(x)$

同理: $\varepsilon_r(y)\approx\left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right|\varepsilon_r(x)$

2.多元函数 $z=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$误差分析

$$\varepsilon(z)\approx\sum_{k=1}^{n}\left|\frac{\partial f}{\partial x_k}\right|\varepsilon(x_k)$$

数据误差对算术运算影响

(1) $$\varepsilon(x_1+x_2)\approx\varepsilon(x_1)+\varepsilon(x_2)$$

(2) $$\varepsilon(x_1\cdot x_2)\approx|x_1|\varepsilon(x_2)+|x_2|\varepsilon(x_1)$$

(3) $$\varepsilon(x_1/x_2)\approx\frac{|x_1|\varepsilon(x_2)+|x_2|\varepsilon(x_1)}{x_2^{\ 2}}$$

例1. 二次方程 $x^2-16x+1=0$, 取 $\sqrt{63}\approx 7.937$

求 $x_1=8-\sqrt{63}$ 使具有4位有效数

解: 直接计算 $x_1\approx 8-7.937=0.063$

$$\varepsilon(x_1)=\varepsilon(8)+\varepsilon(7.937)\ \le 0.0005$$

计算出的x_1 具有两位有效数

修改算法 $x_1=\dfrac{1}{8+\sqrt{63}}\approx\dfrac{1}{15.937}\approx 0.062747$

4位有效数

$$\varepsilon(x_1)=\frac{\varepsilon(15.937)}{(15.937)^2}\le\frac{0.0005}{(15.937)^2}\le 0.000005$$