

地球物理计算方法

主讲教师：高建军

地球物理与信息技术学院

课程信息

课程号：DR103123

课时：48学时

考核：考勤+作业+提问(30%)+课程设计(10%)+期末(60%)

联系方式：13811267996（微信同号），教5楼-104室

课件邮箱：geoph2010@163.com

PWD：geo*****s

参考教材

- 1、《数值分析简明教程》（第二版），王能超，高等教育出版社，2003.；
- 2、《计算方法简明教程》，王能超，高等教育出版社；
- 3、《数值分析》，李庆扬，王能超，易大义编，第5版，清华大学出版社，2008.；
- 4、《数值计算方法》，关治，陆金甫主编，清华大学出版社，2010.。

课程内容

第0章：绪论

第1章：函数插值与拟合

第2章：数值积分

第3章：常微分方程的数值解法

第4章：方程求根的迭代法

第5章：线性代数方程组的迭代解法

第6章：线性代数方程组的直接解法

课程目标

- **课程目标1：**学习和学习和掌握数值算法的基本概念和原理，了解数值计算与地球物理工程问题求解之间的联系，能从复杂地球物理工程问题中归纳出数学模型并用适当的数值算法进行求解。（权重0.5）
- **课程目标2：**对求解地球物理工程问题所用的数值算法能选用合适的计算机编程语言进行程序设计和算法实现，并对数值解的收敛性和稳定性进行适当的评价和分析。（权重0.3）
- **课程目标3：**能为地球物理勘查数据资料的分析、处理和正反演提供数值算法支撑，能撰写数值实验课程报告，分析和评价解的合理性。（权重0.2）

课程目标与毕业要求关系

	毕业要求2	毕业要求4	毕业要求5
课程目标1	√		
课程目标2		√	
课程目标3			√

- **毕业要求2：问题分析能力**，能够应用数学及自然科学知识基本原理并结合文献来研究分析地球物理勘查领域的复杂工程问题；
- **毕业要求4：科学研究能力**，能够根据技术方案**采用科学的技术手段**、实验方法，安全的开展模拟实验和工程实践。能够正确采集、处理模拟实际数据，对处理结果进行分析和解释，并通过信息综合得到合理有效的结论。
- **毕业要求5：使用现代工具能力**，掌握计算机编程语言，并能设计开发用于解决复杂工程问题的算法。


第0章：绪 论

第0章：绪 论

1. 计算方法
2. 算法设计
3. 地球物理数值计算
4. 误差分析


1. 计算方法

1.1 为什么要学习计算方法？

(1) 计算 $\sqrt{115}=?$  $x^2 - c = 0, f(x) = x^2 - c$, 采用牛顿迭代法求解,

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)},$$

$$x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{c}{x_k} \right)$$

(2) 计算 $\cos 1=?$  $f(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!} + R_{2n+1}(x)$

$$= P_{2n+1}(x) + R_{2n+1}(x)$$

$$\cos x \approx P_{2n+1}(x)$$

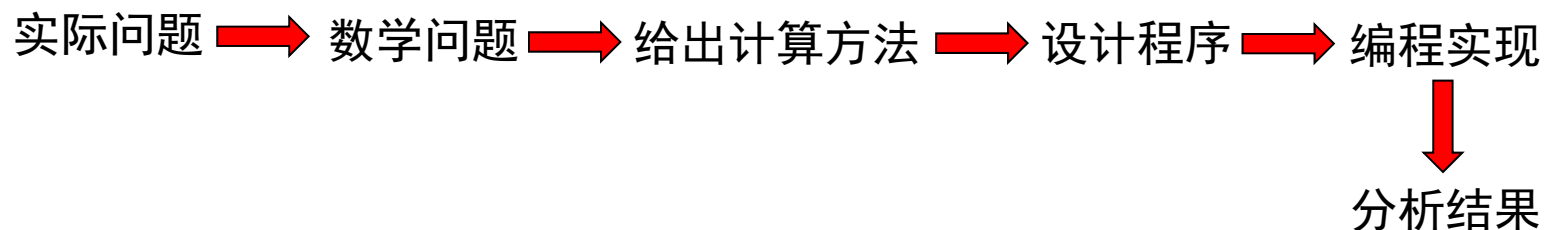
(3) 计算 $f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 = 0$ 的根。

(注: n 次多项式至多有 n 个根; $n \geq 5$ 时方程的根无解析表达式)

1. 计算方法

1.2 什么是计算方法？

解决工程实际问题的思路：



(数值) 计算方法：也称作数值计算方法或数值分析，将待求解的数学模型化简成一系列的算术运算和逻辑运算，以便在计算机上求解，并对算法的稳定性、收敛性和计算误差进行分析。

1. 计算方法

1.2 什么是计算方法？

简单地讲，计算方法就是如何利用计算机有效地解决一个数学问题。

三个
方面
的
问
题

- (1) 有一个有效的数学方法—**计算公式**；
- (2) 有一个能实现该方法的计算机程序—**算法**；
- (3) 理论分析-数值解的**收敛性、稳定性、误差分析**。

1. 计算方法

1.3 计算方法的特点

- 面向计算机，能根据计算机特点提供切实可行的有效算法。
有可靠的理论分析，能任意逼近并达到精度要求，对近似算法要保证收敛性和数值稳定性，还要对误差进行分析；
- 要有好的计算复杂度，时间复杂度好是指节省时间，空间复杂度好是指节省存储量，这也是建立算法要研究的问题，它关系到算法能否在计算机上实现；
- 要有数值实验，即任何一个算法除了从理论上要满足上述两点外，还要通过数值试验证明算法是行之有效的。

1. 计算方法

1.4 计算方法的应用领域

领域：地球物理、天体物理、航空航天、大气科学、分子生物、天气预报、保险精算和工业仿真等。

注：2023年6月世界超级计算机排名：美国“Frontier（前沿）”每秒119.4亿亿次-美国能源部田纳西州橡树岭国家实验室（ORNL）。中国“神威-太湖之光”93.01亿亿次/秒-国家超级计算无锡中心，排名第7位。注：中科院软件所、清华大学和北京师范大学的联合研究团队在国家超级计算无锡中心应用“神威·太湖之光”计算机系统完成的“**千万核可扩展大气动力学全隐式模拟**”获得2016年由全球超级计算大会（ACM2016）颁发的“戈登·贝尔”奖，该奖是高性能计算应用领域的最高奖项，其中清华大学地球系统科学系付昊桓教授参与并获奖。2017年又凭借“非线性地震模拟”再次蝉联该奖。此外，1983年11月由国防科技大学研制成功的银河1号巨型计算机，为中国首台超级计算机，1亿次/秒。目前有8个国家超算中心。在量子计算方面，我国的“九章”一分钟完成任务，超级计算机需要一亿年。

计算方法发展趋势：云计算、人工智能（机器学习）和量子计算

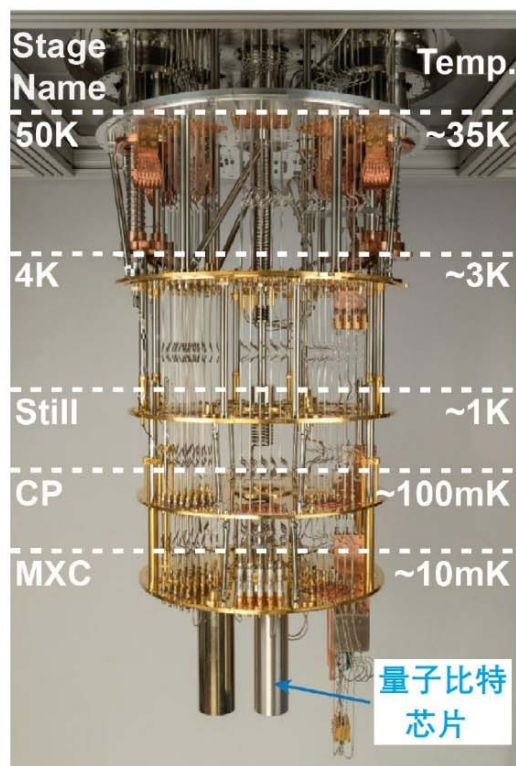
1. 计算方法

1.5 计算方法发展的趋势

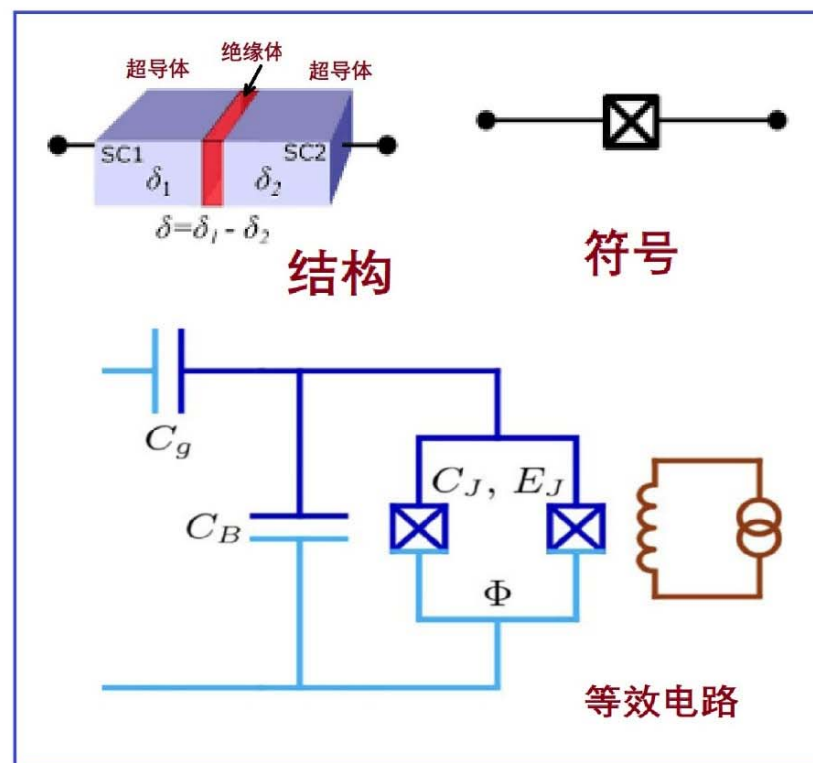
云计算、人工智能（机器学习）和量子计算



世界第一台商用量子计算机
IBM Q System one（简称：大吊灯，2019）



a, IBM 超导量子计算机



b, 约瑟夫森结量子比特

目前超导的实现需要极低温，这就是为什么目前的量子计算机看起来像个大冰箱。最上部温度大概**40 K**，然后随着高度，一级一级往下降。量子芯片放在冰箱的最底层，温度接近绝对零度，即零下**273度**，那是量子比特达到超导需要的温度，此外还有用于控制的精密电子仪器，及完成整个计算必须的经典计算机等。**a**是**IBM2017年**公布的**50个**量子比特的原型机，看起来像个漂亮的大吊灯。图**b**为超导量子计算机的原理基于约瑟夫森效应。



2023年12月IBM最新发布的超导量子芯片

2023年12月4日，IBM在量子峰会上，发布了两款量子芯片、一台量子计算机、一个量子编程软件、自动量子编程的AI模型以及未来10年的量子计算机发展路线图【12】。此前IBM已发布了Eagle（鸢，127量子比特）、Osprey（鱼鹰，433量子比特）两种量子芯片，这次发布首台千比特量子处理器Condor（秃鹰）注：拥有1121个以蜂窝状排列的超导量子比特、最高性能的133量子比特的量子处理器Heron、发布首款模块化量子计算机IBM Quantum System Two、推出了Qiskit1.0等新一代软件栈计划，表示现在开始转变思路，专注于提高机器的纠错能力，而不是扩大机器的规模。IBM人类文明可能已再次处于大突破的巨变前夜。

1. 计算方法

1.5 计算方法发展的趋势

云计算、人工智能和量子计算

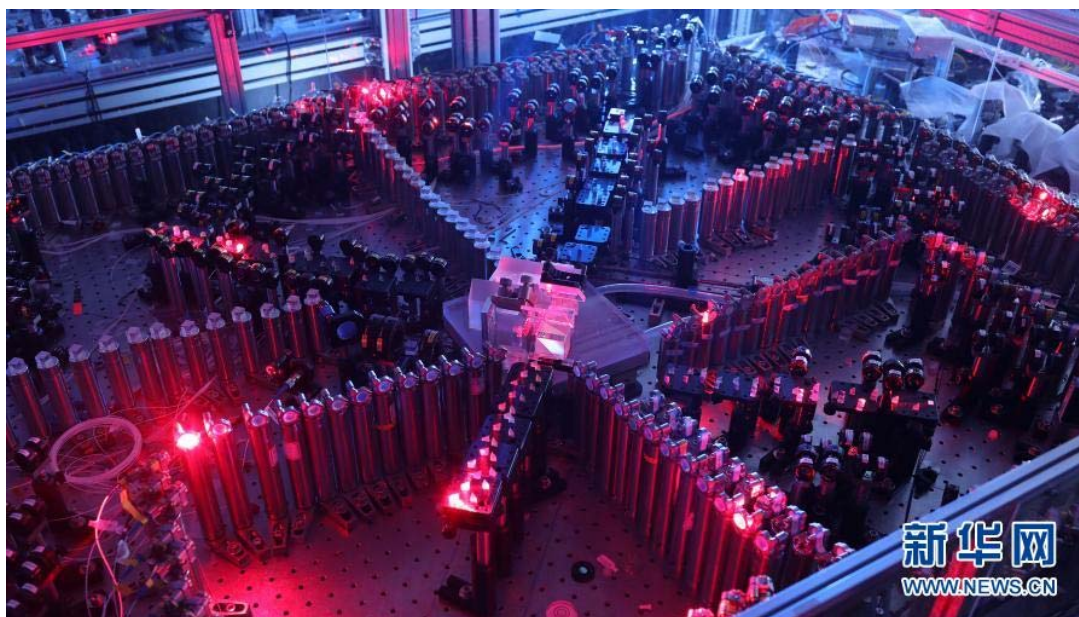


谷歌悬铃木量子计算机（53个有效量子比特，2019）

1. 计算方法

1.5 计算方法发展的趋势

云计算、人工智能和量子计算



中国九章量子计算原型机（76个光子，2020）

潘建伟：中国“九章”比谷歌“悬铃木”快100亿倍、比超算“富岳”快100万亿倍。当求解5000万个样本的高斯玻色取样问题时，“九章”需200秒，而目前世界上最快的超级计算机“富岳”需6亿年；当求解100亿个样本时，“九章”需10小时，“富岳”需1200亿年。

第0章：绪 论

1. 计算方法

2. 算法设计

3. 地球物理数值计算

4. 误差分析

2. 算法设计

2.1 什么是算法？

算法的含义：给出已知的量，通过给定的运算次序，经过有限次的基本运算，得出所求的未知量的解，这种完整的运算步骤称为算法。

2.2 算法设计的原则

1.有穷性(Finiteness): 算法的有穷性是指算法必须能在执行有限个步骤之后终止；

2.确切性(Definiteness): 算法的每一步骤必须有确切的定义；

3.输入项(Input): 一个算法有0个或多个输入，以刻画运算对象的初始情况，所谓0个输入是指算法本身定出了初始条件；（100内是否存在能同时被2,3,5,7整除的数？）

4.输出项(Output): 一个算法有1个或多个输出，以反映对输入数据加工后的结果。没有输出的算法是毫无意义的；

5.可行性(Effectiveness): 算法中执行的任何计算步骤都是可以被分解为基本的可执行的操作步，即每个计算步都可以在有限时间内完成（也称之为有效性）。

2. 算法设计

2.3 算法设计例子

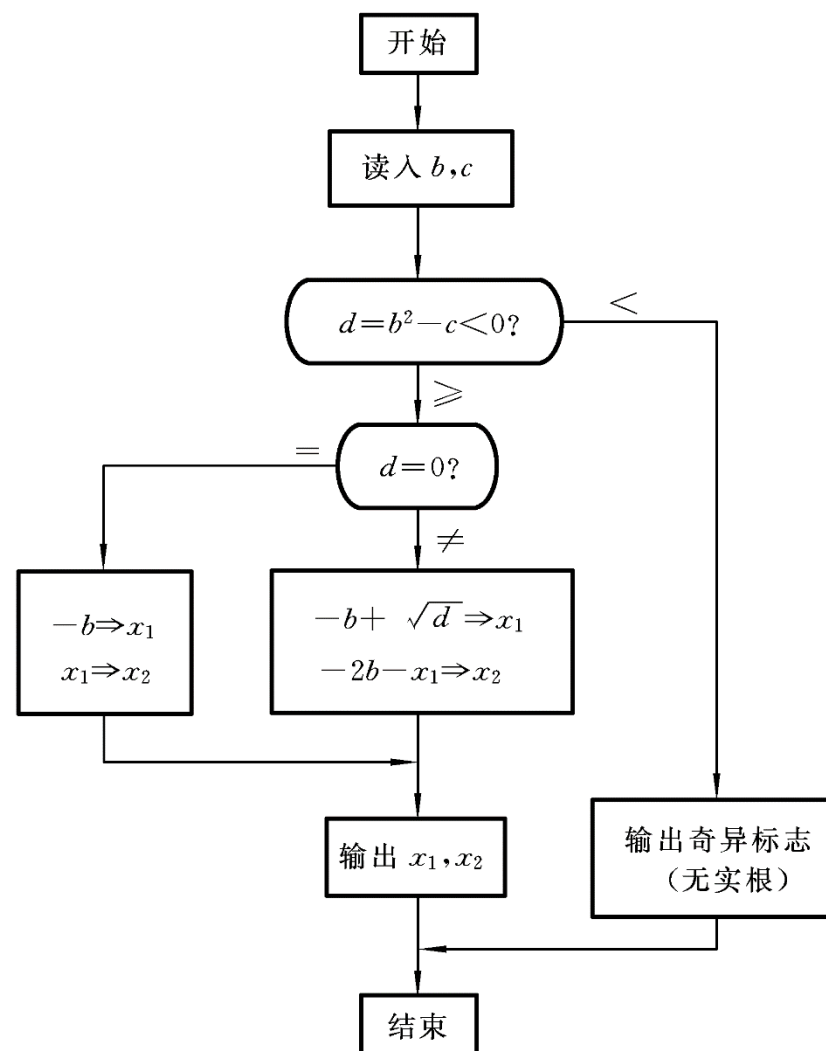
(1) 二次方程求实根

$$x^2 + 2bx + c = 0$$

根的判别式: $d = b^2 - c$

1. 无实根, $d < 0$
2. 有重根, $d = 0$
3. 有互异实根, $d > 0$

方程的根: $x_{1,2} = -b \pm \sqrt{b^2 - c}$



方程求根算法流程图

2. 算法设计

2.3 算法设计例子

在 x 给定时求多项式 $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n$ 的值。

➤ 直接逐项求和

令 $t_k = x^k, u_k = a_0 + a_1x + \cdots + a_kx^k$,

$$\text{则有, } \begin{cases} t_k = xt_{k-1} \\ u_k = u_{k-1} + a_k t_k \end{cases}, k = 1, 2, \cdots, n \quad (5)$$

取初值,

$$t_0 = 1, u_0 = a_0 \quad (6)$$

反复执行(5)式 n 次, 最终得到的 u_n 就是 $P(x)$.

利用递推式(5)的总计算量为 $2n$ 次乘法。

2. 算法设计

2.3 算法设计例子

➤ 秦九韶算法

若将 $P(x)$ 重新写为,

$$\begin{aligned} p(x) &= (a_n x^{n-1} + a_{n-1} x^{n-2} + \dots + a_1) x + a_0 \\ &= ((a_n x^{n-2} + a_{n-1} x^{n-3} + \dots + a_2) x + a_1) x + a_0, \quad (7) \\ &= (\dots (a_n x + a_{n-1}) x + \dots + a_2) x + a_1) x + a_0 \end{aligned}$$

设计递推表达式,

$$\begin{cases} v_k = v_{k-1} x + a_{n-k}, k = 1, 2, \dots, n, \\ v_0 = a_n \end{cases} \quad (8)$$

改算法计算 $P(x)$ 只需要 n 次乘法, 相比于前一种算法, 计算量节约了一半。

注: 秦九韶(1208年—1268年), 字道古, 汉族, 祖籍鲁郡(今河南省范县), 出生于普州(今四川资阳市安岳县南宋著名数学家, 与李冶、杨辉、朱世杰并称宋元数学四大家。1247年完成著作《数书九章》, 其中的大衍求一术(一次同余方程组问题的解法, 也就是现在所称的中国剩余定理)、三斜求积术和秦九韶算法(高次方程正根的数值求法)是有世界级意义的重要贡献。

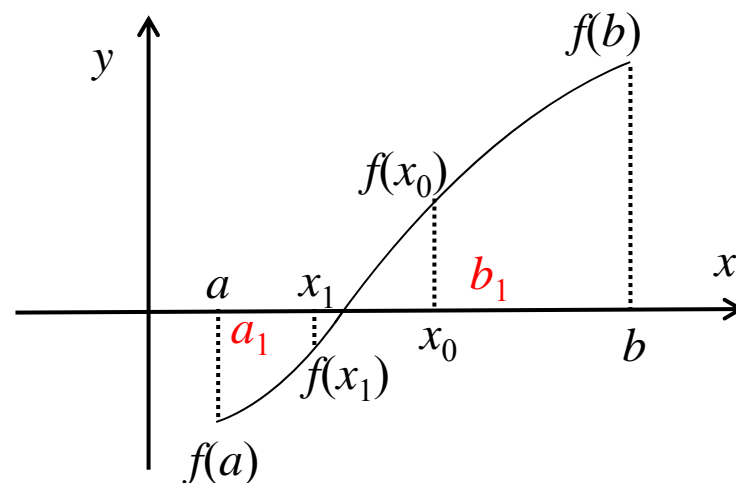
2. 算法设计

2.3 算法设计例子

(3) 非线性方程求根的二分法

设函数 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续, $f(a)f(b)<0$, 根据连续函数性质, $f(x)$ 在 $[a,b]$ 内一定有实的零点, 即方程 $f(x)=0$ 在 $[a,b]$ 内一定有实根。现假定它在 $[a,b]$ 内有唯一单实根 x^* 。

二分法的基本思想：逐步将有根区间分半，通过判别函数值的符号，进一步搜索有根区间，使其充分小，从而求出满足精度的根 x^* 的近似值。



2. 算法设计

2.3 算法设计例子

(3) 方程求根的二分法

第一步：计算 $f(x)$ 在端点处的值 $f(a), f(b)$.

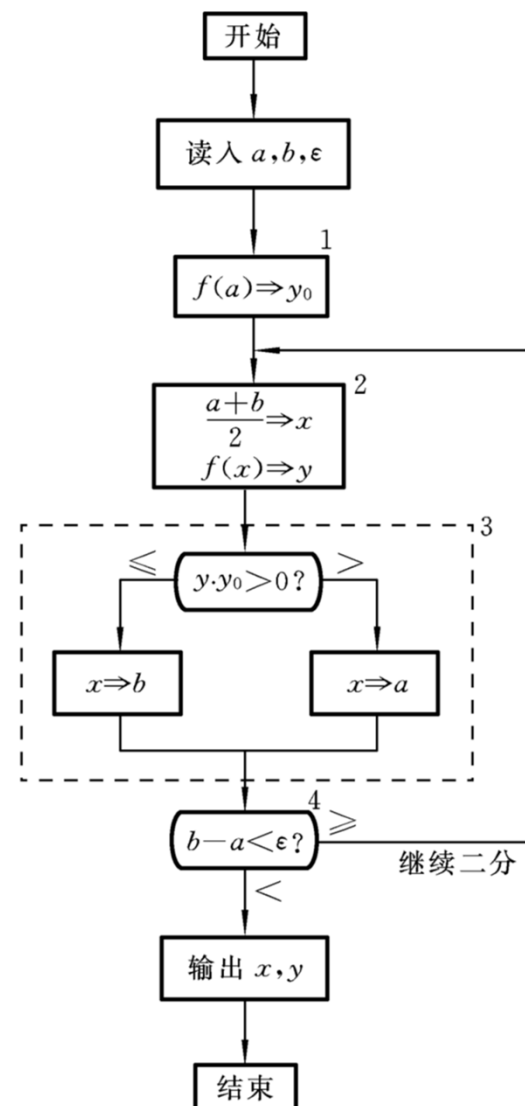
第二步：计算 $f(x)$ 在中点处的值 $x = \frac{a+b}{2}, f(\frac{a+b}{2})$

第三步：若 $f(x) = 0$ 则取 $x^* = x = \frac{a+b}{2}$

若 $f(x) \times f(a) < 0$, 则取 $a_1 = a, b_1 = \frac{a+b}{2}$

若 $f(x) \times f(b) < 0$, 则取 $a_1 = \frac{a+b}{2}, b_1 = b$

重复步骤2和步骤3.



二分法求根算法流程图

2. 算法设计

2.3 算法设计例子

(4) 循环矩阵与向量乘法 (设计的算法尽可能减小计算量)

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 8 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 1 & 8 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 8 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 \\ 3 & 2 & 1 & 8 & 7 & 6 & 5 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 8 & 7 & 6 & 5 \\ 5 & 4 & 3 & 2 & 1 & 8 & 7 & 6 \\ 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 & 8 & 7 \\ 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 & 8 \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 2 \\ 3 \\ -5 \\ 6 \\ -2 \end{bmatrix} \quad c = \begin{bmatrix} 8 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{bmatrix}$$

计算 $y = \mathbf{C}x$, 若直接计算 \mathbf{C} 和 x , 计算量 $8 \times 8 = 64$ 次,
若采用快速算法 $y = \text{IFFT}(\text{FFT}(c) .* \text{FFT}(x))$, 则计算量为
 $8 \log_2 8 = 24$ 次.

2. 算法设计

2.3 算法设计例子

(5) Toeplitz矩阵和Hankel矩阵的优化存储（设计的算法尽可能节约存储量）

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 4 & 3 & 2 & 1 \\ 5 & 4 & 3 & 2 \\ 6 & 5 & 4 & 3 \\ 7 & 6 & 5 & 4 \end{bmatrix} \quad t = [1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7]$$

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 4 & 5 & 6 \\ 4 & 5 & 6 & 7 \end{bmatrix} \quad h = [1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7]$$

若直接存储**Toeplitz**矩阵 \mathbf{T} ，需要存储16个元素，若用 t 表示 \mathbf{T} ，只需存储7个元素。

同理，若直接存储**Hankel**矩阵 \mathbf{H} ，需要存储16个元素，若用 h 表示 \mathbf{H} ，

只需存储7个元素。

2. 算法设计

互联网大厂2019届校招薪酬

来源: 100offer

公司	研发			算法		
	白菜价	sp	ssp	白菜价	sp	ssp
阿里	24w	27~30w	60w	26w	29~32w	40~72w
腾讯	20~23w	26~31w	40w+	30w	35~40w	45~70w
百度	22~23w	28w	/	25w	29w	47w
字节跳动	32w	35~41w	个例差距大, 原则上不封顶	32w	35~41w	个例差距大, 原则上不封顶
美团	22w	26~29w	31~35w	/	26~30w	50w
滴滴	24~27w	30~32w	/	30w	35w	40w
华为	21~24w	22~26w	/	25~29w	31~44w	41~46w
行业平均	22~24w	26~32w	35~60w	25~30w	30~44w	40~72w

公司	薪酬	说明	年总包 (单位: 万, 含加班费和股票折现, 不含房补餐补等)			
			30	50	100	150
阿里巴巴	月薪X16	12+1+3 年终90%的人能到3个月	P5	P6	P7	P8
腾讯	月薪X16	12+1+1+2	5级	6级	7级	8级
百度	月薪X15	12+3 (年终平均3个月)	T3	T4	T5	T6
字节跳动	月薪X15	12+3 (大小周1.2倍加班费)	1-2	2-1	2-2	3-1
京东	月薪X14	12+2	T3	T4	T5	T6
滴滴	月薪X15	12+3	D5	D6	D7	D8
美团	月薪X15.5	12+0.5x2+2.5 (年终平均2.5月)	1-3	2-1	2-2	2-3



第0章：绪 论

1. 计算方法
2. 算法设计
3. 地球物理数值计算
4. 误差分析

3. 地球物理数值计算

地球物理学：运用物理学的方法理解、解释地球的内部构造、组成、动力学以及与地球表面地质现象的关系。

- 地震学方法-速度、密度
- 重力学方法-密度（重力异常）
- 地磁学方法-磁化率（磁异常）
- 地电学方法-电阻率、极化率

3. 地球物理数值计算

利用地球物理方法解决地球科学问题，内容主要包含两个部分：

地球物理正演问题

给定：模型参数值（源）



确定：理论响应（场）

地球物理反演问题

给定：位场观测值（场）



确定：地质模型参数（源）

反演步骤

Step1: 观测数据

Step2: 对原始数据进行预处理（涉及本门课）

Step3: 建立反演计算的目标函数

Step4: 确定计算方法（求解，涉及本门课）

Step5: 程序设计（涉及本门课）

Step6: 上机实现，得出结果（涉及本门课）

Step7: 根据反演的物理参数解释地质问题

正演问题-波动方程为例

物理方程:
$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - v(x, z)^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = \delta(x - x_0) \delta(z - z_0) f_s(t)$$

初始条件:
$$\begin{cases} u(x, z, 0) = \varphi_1(x, z) \\ \frac{\partial u(x, z, 0)}{\partial t} = \varphi_2(x, z) \end{cases} \quad \begin{aligned} &X_1 \leq x \leq X_2 \\ &Z_1 \leq z \leq Z_2 \\ &0 \leq t \leq T \end{aligned}$$

边界条件: $u|_{\Omega} = \psi(t)$

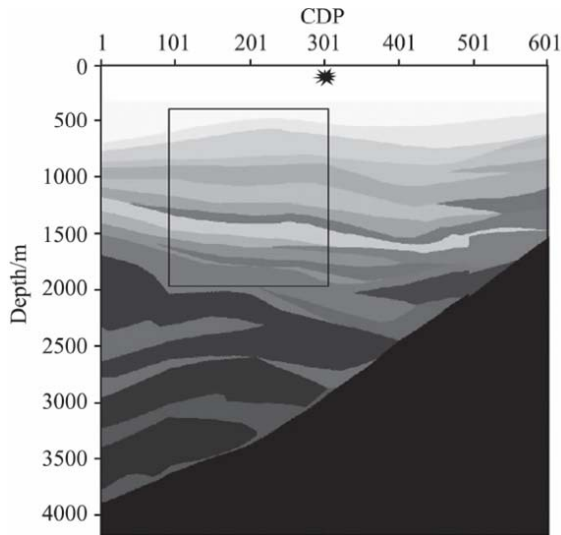
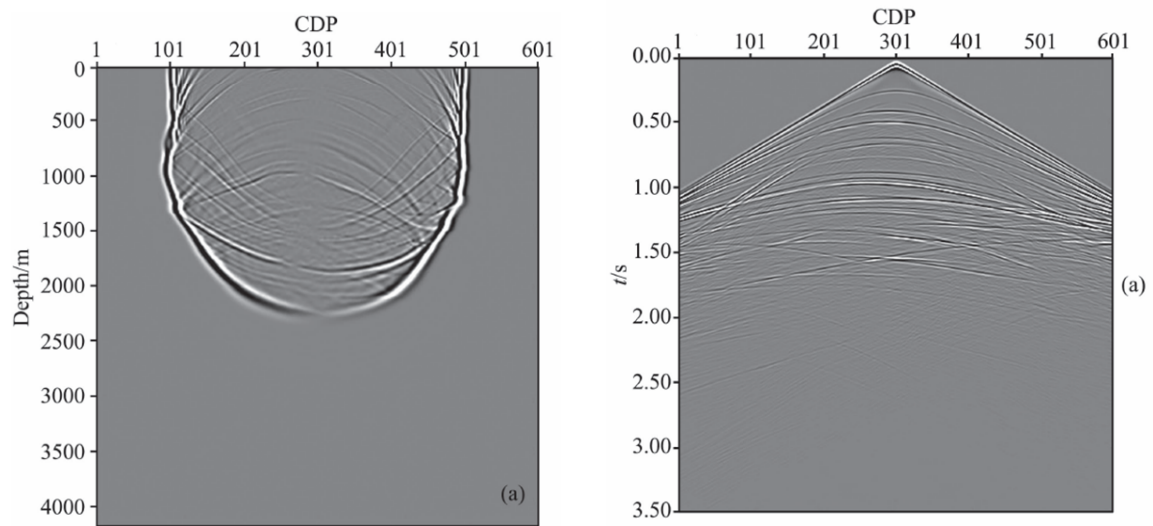


图7 陡坡带砂砾岩体速度模型



王润秋等.地震波正演模拟的任意差分精细积分方法.石油地球物理勘探,2003,38(3):252-257.

王润秋, 贾晓峰, 胡天跃.高精度有限差分地震波正演方法.应用地球物理.2004,1(2):69-74.

张慧,李振春.基于双变网格算法的地震波正演模拟.地球物理学报,2011,54 (1) :77-86.

反演问题-全波形反演为例

物理方程:
$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - v(x, z)^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = \delta(x - x_0) \delta(z - z_0) f_s(t)$$

波场残差: $\delta(\mathbf{d}) = \mathbf{d}^{obs} - \mathbf{d}^{cal}$, \mathbf{d}^{obs} 表示实际野外观测道记录, \mathbf{d}^{cal} 表示正演得到的波场记录
对波场残差求极小,

$$\min E(v) = \min \|\delta(\mathbf{d})\|_2^2$$

得到反演速度的迭代公式,

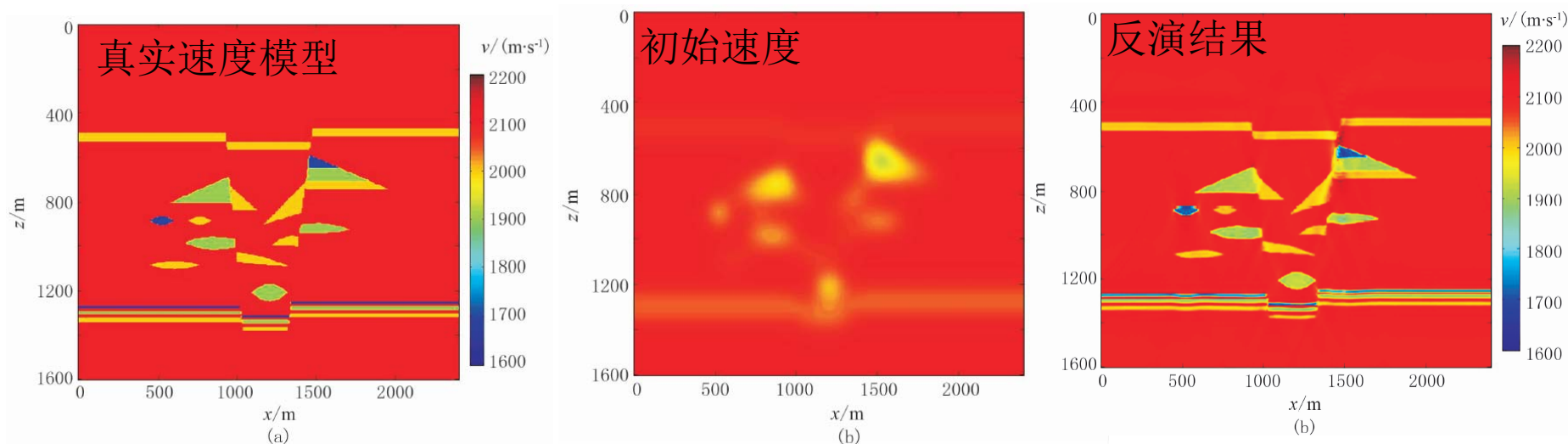
$$v^{k+1} = v^k - \alpha^k \nabla E(v^k)$$

α^k 表示第 k 次迭代步长.

迭代停止条件,

$$\frac{\|E(v^{k+1}) - E(v^k)\|_2^2}{\|E(v^k)\|_2^2} < \varepsilon$$

苗永康. 基于L-BFGS算法的时间域全波形反演. 石油地球物理勘探. 2015, 50 (3) :469-474.



地球物理学中的数值计算

- 数据处理

(插值或拟合、**FFT**、矩阵求解、数值积分)

- 数值模拟

(微分方程求解)

- 物理参数反演计算

(线性方程组求解)

第0章：绪 论

1. 计算方法
2. 算法设计
3. 地球物理数值计算
4. 误差分析

4. 误差分析

误差分析必要性

例1：求解方程 $x^2 - (10^5 + 1)x + 10^5 = 0$

$$\begin{cases} x^2 + 2bx + c = 0 \\ x_{1,2} = -b \pm \sqrt{b^2 - c} \end{cases}$$

准确解为： $x_1 = 10^5, x_2 = 1$;

数值近似解（5位有效数字）：

$$b = -\frac{1}{2} \times (10^5 + 1) = -(0.5 + 0.000005) \times 10^5 = -0.500005 \times 10^5 \equiv -\frac{1}{2} \times 10^5, c = 10^5$$

\equiv 表示对阶，两个浮点数相加减，小数点位数必须对齐；

$$b = -\frac{1}{2} \times (10^5 + 1) \equiv -\frac{1}{2} \times 10^5,$$

$$\sqrt{b^2 - c} = \sqrt{\left(-\frac{1}{2} \times 10^5\right)^2 - 10^5} = 10^5 \times \sqrt{0.25000 - 0.00001} \equiv \frac{1}{2} \times 10^5$$

因此， $x_1 = -b + \sqrt{b^2 - c} \equiv 10^5, x_2 = -b - \sqrt{b^2 - c} \equiv 0$.

避免大数“吃掉”小数，不宜用相差悬殊的数做加减运算；

4. 误差分析

例2： 求方程组的解

$$\begin{cases} x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = \frac{11}{6} \\ \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{3}x_2 + \frac{1}{4}x_3 = \frac{13}{12} \\ \frac{1}{3}x_1 + \frac{1}{4}x_2 + \frac{1}{5}x_3 = \frac{47}{60} \end{cases}$$

准确解为 $x_1 = x_2 = x_3 = 1$;

系数舍入近似为（小数点后三位）

$$\begin{cases} 1.000x_1 + 0.500x_2 + 0.333x_3 = 1.830 \\ 0.500x_1 + 0.333x_2 + 0.250x_3 = 1.080 \\ 0.333x_1 + 0.250x_2 + 0.200x_3 = 0.783 \end{cases}$$

解为：

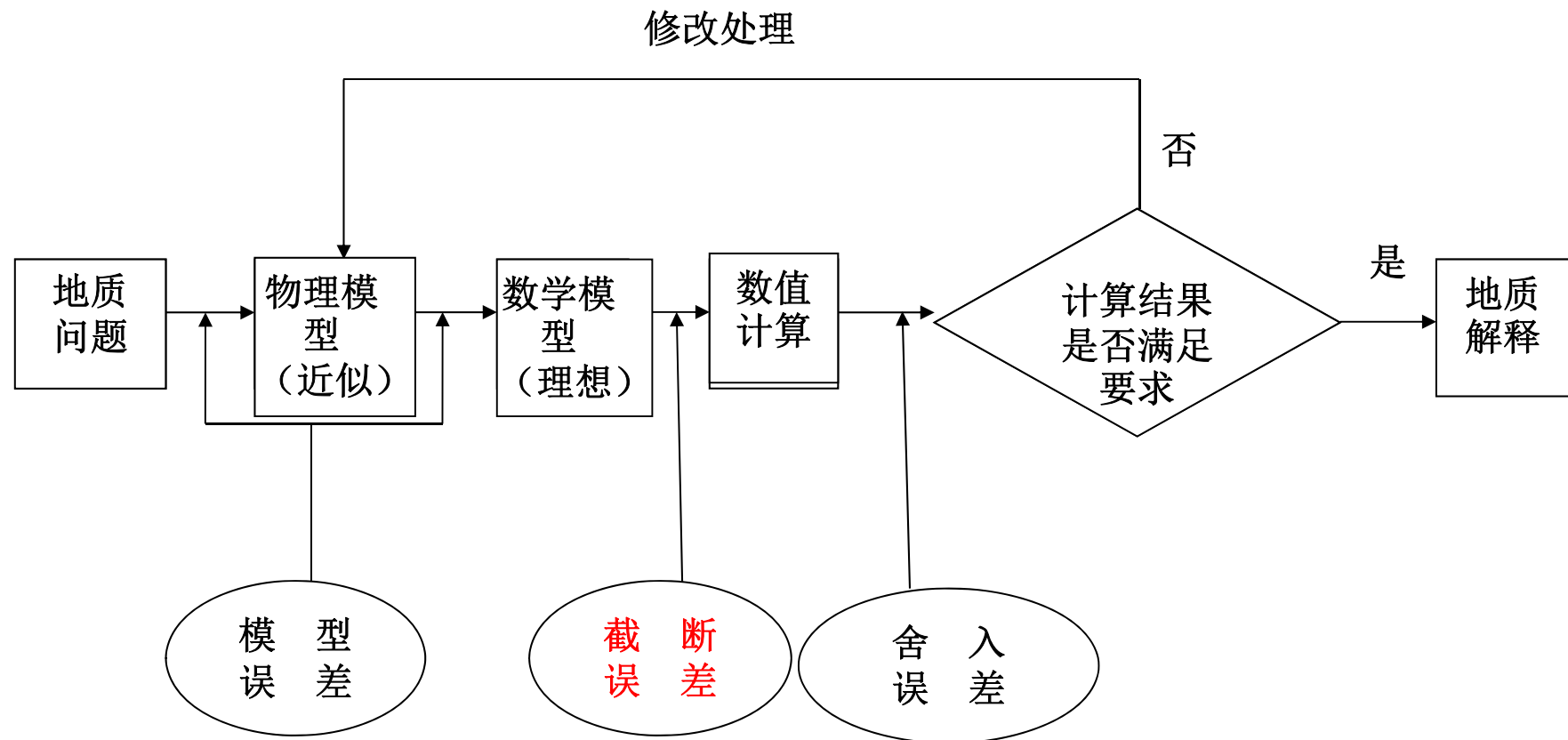
$$\begin{cases} x_1 = 1.090 \\ x_2 = 0.488 \\ x_3 = 1.490 \end{cases}$$

原因：计算机舍入误差引起，见P179页例2.

4. 误差分析

4.1 误差来源

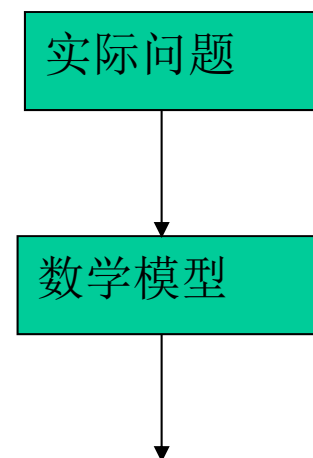
- ◆ 用计算机解决科学计算问题(地球物理)的过程如下:



4. 误差分析

1、模型误差

模型误差：由实际问题抽象和简化出数学模型时，会将复杂物理现象利用为数学表达式进行表征。此时，需要添加一些限制条件，并会忽略一些次要因素的影响，此时与实际问题存在误差。



4. 误差分析

2、观测误差

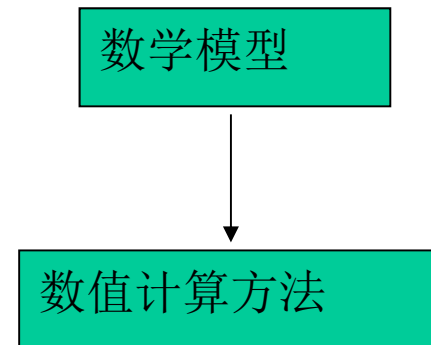
观测误差：由物理量观测产生的误差，在数学建模和具体计算过程中所用的数据是通过**观察和测量**得到的，由于**测量仪器精度**的限制，这些数据一般是近似的。

物理量数据：温度、长度、电位、电流、速度等。

4. 误差分析

3、截断误差

截断误差：计算机只能完成有限次算术运算和逻辑运算；在连续型数学问题向离散型数值算法转化过程中产生，用有限项近似无限项产生的误差。对无穷过程进行截断所带来的误差。



◆**截断误差（方法误差）：**近似解与精确解之间的误差。

4. 误差分析

例：用Taylor公式进行展开

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

近似代替函数 $f(x)$ ，则数值方法的截断误差是：

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1}$$

ξ 在0与 x 之间。

4. 误差分析

如常用的函数Taylor展开:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots$$

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots$$

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

4. 误差分析

4、舍入误差

舍入误差：由于计算机的字长有限，进行数值计算的过程中，对计算得到的中间结果数据要使用“四舍五入”或其他规则取近似值，因而使计算过程有误差。这种误差称为舍入误差。

数值计算是用计算机求解， 计算机不能做无限运算、 **不能准确表达一个实数。**

受计算机字长限制产生舍入误差，少量的舍入误差一般是微不足道的， 而计算机完成成千上万次运算，舍入误差的积累就变大，可能导致错误的结果。

例：用3.14159代替 π

4. 误差分析

4.2 绝对误差限

绝对误差限：设 x^* 为准确值， x 为 x^* 的一个近似值，

$$|x - x^*| \leq \varepsilon$$

ε 为近似值 x 的绝对误差限，也可以说 x 关于精度 ε 是准确的。

$|x - x^*|$ 称为绝对误差。

有效数字：如果近似值 x 的绝对误差限是它的某一位的半个单位，我们就说它准确到这一位，并且从这一位起直到前面第一个非零数字为止的所有数字均称为有效数字。具体说，对于 x^* 的近似值，

$$x = \pm 0.a_1a_2 \cdots a_n \times 10^m$$

其中， a_1, \dots, a_n 是0到9之间的自然数， $a_1 \neq 0$ ，如果误差，

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

则称近似值 x 有 l 位有效数字，或称 x 准确到第 l 位。

例： π 的近似值3.14和3.1416分别有3位和5位有效数字。

4. 误差分析

4.3 相对误差限

近似值 x 的绝对误差 $|x - x^*|$ 不足以刻画它的精度。例如，测量1000m的长度时发生1cm的误差，与测量1m的长度时发生1cm的误差，两者含义有很大区别。因此，除了绝对误差之外，还需要考察相对误差。若，

$$\frac{|x - x^*|}{|x|} \leq \varepsilon$$

则称 ε 为近似数 x 的相对误差限。

设 x 和 y 分别表示数 x^* 和 y^* 的近似值， $x-y$ 的相对误差，

$$\frac{|x - y - (x^* - y^*)|}{|x - y|} \leq \frac{|x - x^*| + |y - y^*|}{|x - y|} = \frac{|x - x^*|}{|x|} \cdot \frac{|x|}{|x - y|} + \frac{|y - y^*|}{|y|} \cdot \frac{|y|}{|x - y|}$$

当 x 和 y 相近时， $\frac{|x|}{|x - y|}$ 和 $\frac{|y|}{|x - y|}$ 都很大，此时 $x - y$ 的相对误差比 x 和 y 的

相对误差大得多。因此，避免两个相近数的近似数做减法。

4.4 有效数字与绝对误差的关系

当准确值 x^* 位数比较多时，常按四舍五入原则得到 x^* 的前几位近似值 x ，

例： $x^* = \pi = 3.14159265\dots$

取3位有效数字： $x_3 = 3.14$, $|x_3 - x^*| = 0.00159\dots < \varepsilon_3 = 0.002$,

取5位有效数字： $x_5 = 3.1416$, $|x_5 - x^*| = 0.0000074\dots < \varepsilon_5 = 0.000008$.

四舍五入原则的误差限：不超过末位数字的半个单位，即

$$|\pi - 3.14| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$
$$|\pi - 3.1416| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

有效数字的位数越多，
其绝对误差限也就越小。

4.5 有效数字与相对误差的关系

1. 已知有效数字时求相对误差的表达式

当近似值 x 具有 l 位有效数字时,

$$|x| \geq a_1 \times 10^{m-1}, (\text{注: } x = \pm 0.a_1 a_2 \cdots a_n \times 10^m)$$

相对误差

$$|\varepsilon_r(x)| = \left| \frac{x - x^*}{x} \right| = \frac{|x - x^*|}{|x|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-l}}{a_1 \times 10^{m-1}} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-l+1}$$

故相对误差限为: $\varepsilon_r = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-l+1}$

有效数字的位数反映了近似值的相对精确度。

4.5 有效数字与相对误差的关系

2. 已知相对误差求有效数字位数

已知近似数 $x = 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m$ 的相对误差为,

$$|\varepsilon_r| \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-l+1}$$

则该近似数 x 有 l 位有效数字。

证明：近似数 x 满足 $|x| \leq (a_1 + 1) \times 10^{m-1}$,

$$\begin{aligned} \text{绝对误差 } |x - x^*| &= \frac{|x - x^*|}{|x|} \times |x| = |\varepsilon_r| \times |x| \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-l+1} \times (a_1 + 1) \times 10^{m-1} \\ &= \frac{1}{2} \times 10^{m-l} \end{aligned}$$

根据有效数字的定义知近似数 x 有 l 位有效数字。

4.5 有效数字与相对误差的关系

例1: 已知近似数 x 有2位有效数字, 求其相对误差限。

解: 由 $l = 2$, 相对误差 $\varepsilon_r(x) = \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{-l+1} = \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{-1}$,

x 的第一位有效数字 α_1 并未给出,

当 $\alpha_1 = 1$ 时, $\varepsilon_r(x) = \frac{1}{2} \times 10^{-1} = 5\%$,

当 $\alpha_1 = 9$ 时, $\varepsilon_r(x) = \frac{1}{18} \times 10^{-1} = 0.56\%$.

例2: 已知近似数 x 的相对误差限为0.3%, 求 x 有几位有效数字?

解: 由 $|\varepsilon_r| \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-l+1}$ 得 $\frac{3}{1000} = \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-l+1}$,

当 $a_1 = 1$ 时, 两边取以10为底的对数, $l = 4 - \log_{10} 12 = 2.92$,

当 $a_1 = 9$ 时, 两边取以10为底的对数, $l = 3 - \log_{10} 6 = 2.22$,

所以, x 至少有2为有效数字。

第0章：绪 论

作业：8, 9, 10