数值分析与计算软件

第 1 课

刘帆

南京大学工程管理学院

2020 年 2 月 17 日

- 一个普通问题：$x^2 - 2 = 0$ 的非负解是什么？

- 一个普通问题：$x^2 - 2 = 0$ 的非负解是什么?
- 一个不彻底的回答：$\sqrt{2}$。

0. 引言

- 一个普通问题：$x^2 - 2 = 0$ 的非负解是什么?
- 一个不彻底的回答：$\sqrt{2}$。
- 一个新的问题：$\sqrt{2}$ =?

0. 引言

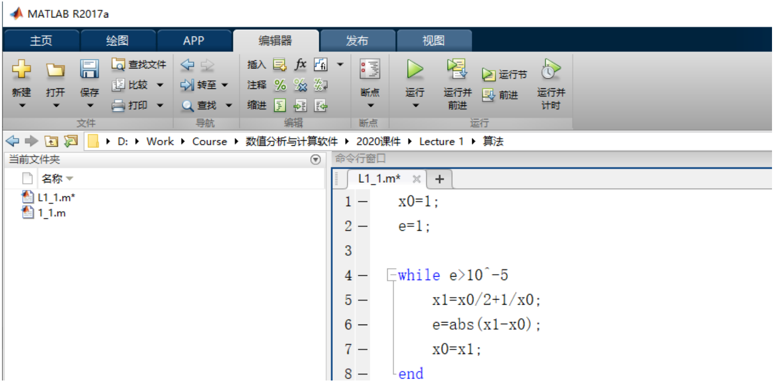
- 用数值的方法求：$x^2 - 2 = 0$ 的非负解。

- 用数值的方法求：$x^2 - 2 = 0$ 的非负解。

Algorithm 2 求 $\sqrt{2}$ 的不动点迭代算法

1: **Initialize** $x_0 = 1$, $e = 1$
2: **while** $e > 10^{-5}$ **do**
3: Compute $x_1 = \frac{x_0}{2} + \frac{1}{x_0}$; $e = |x_1 - x_0|$
4: Let $x_0 = x_1$
5: **end while**
6: **Output** x_0.

- 程序设计：用 Matlab 实现



- 计算机计算：用 Matlab 实现

循环	0	1	2	3	4
x_0	1	1.5	1.4166667	1.4142157	1.4142136
e	1	0.5	0.0833333	0.0024510	2.12389981e^{-6}

- 计算机计算：用 Matlab 实现

循环	0	1	2	3	4
x_0	1	1.5	1.4166667	1.4142157	1.4142136
e	1	0.5	0.0833333	0.0024510	2.12389981e−6

- 结果分析：在保留 8 位有效数字的情况下，用计算器直接计算 $\sqrt{2}$，等于 1.4142136。

- 数值分析也称为数值计算方法，它是研究用计算机求解数学问题的数值方法及其理论，是计算数学的主体部分.

- 数值分析也称为数值计算方法，它是研究用计算机求解数学问题的数值方法及其理论，是计算数学的主体部分.
- 数值分析的内容包括函数的数值逼近、数值微分与数值积分、非线性方程数值解、数值线性代数、常微和偏微数值解等。

- 数值分析也称为数值计算方法，它是研究用计算机求解数学问题的数值方法及其理论，是计算数学的主体部分.
- 数值分析的内容包括函数的数值逼近、数值微分与数值积分、非线性方程数值解、数值线性代数、常微和偏微数值解等。
- 数值分析有如下四个特点。

- 面向计算机，要根据计算机的特点提供切实可行的有效算法。

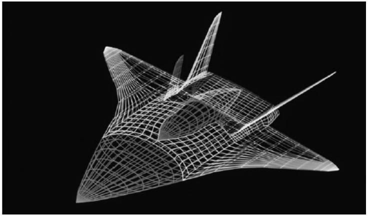
- 面向计算机，要根据计算机的特点提供切实可行的有效算法。
- 有可靠的理论分析，能任意逼近并达到精度要求，对近似算法要保证收敛性和数值稳定性，还要对误差进行分析。

- 面向计算机，要根据计算机的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。
- 要有好的计算复杂性，时间复杂性好是指节省时间，空间复杂性好是指节省存储量，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。

- 面向计算机，要根据计算机的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。
- 要有好的计算复杂性，时间复杂性好是指节省时间，空间复杂性好是指节省存储量，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三点外，还要通过数值实验证明是行之有效的。

Marker

- 工业界有大量的数学问题需要数值方法来进行解决。



第一节：误差

- 误差的来源
- 相关概念。
- 误差的传播公式。

- 误差是人们用来描述数值计算中近似解的精确程度，是科学计算中的一个十分重要的概念。

- 误差是人们用来描述数值计算中近似解的精确程度，是科学计算中的一个十分重要的概念。
  - 从实际问题中抽象出数学模型，可能导致模型误差。
  - 通过测量和实验得到模型中的各种数据，可能导致观测误差。
  - 在计算中通过有限过程的计算结果代替无限过程的结果而造成的误差，称为截断误差。
  - 我们将计算过程中取有限位数字进行运算而引起的误差称为舍入误差。

- 在数值分析中，我们总假定数学模型是准确的，因而不考虑模型误差和观测误差，主要研究截断误差和舍入误差对计算结果的影响。

例子

- 近似计算 $\int_0^1 e^{-x^2} dx$

例子

- 近似计算 $\int_0^1 e^{-x^2}dx$

  将 e^{-x^2} 作 Taylor 展开后再积分

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx = \int_0^1 (1 - x^2 + \frac{x^4}{2!} - \frac{x^6}{3!} + \frac{x^8}{4!} - \cdots)dx$$
$$= 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{2!}\frac{1}{5} - \frac{1}{3!}\frac{1}{7} + \frac{1}{4!}\frac{1}{9} - \cdots$$

  如果仅用前四项，即 $1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{2!}\frac{1}{5} - \frac{1}{3!}\frac{1}{7}$ 来近似 $\int_0^1 e^{-x^2}dx$，则会导致截断误差。

例子

- 计算
$$1-\frac{1}{3}+\frac{1}{2!}\frac{1}{5}-\frac{1}{3!}\frac{1}{7}$$

例子

- 计算
$$1-\frac{1}{3}+\frac{1}{2!}\frac{1}{5}-\frac{1}{3!}\frac{1}{7}$$
因为计算机字长有限，无法保留无穷多位的小数位数。在保留小数点后 4 位的情况下，我们用
$$1-0.3333+0.1000-0.0238=0.7429$$
来近似。此时产生的误差，是舍入误差。

1.2 绝对误差

定义

设 x 为准确值，x^* 为 x 的一个近似值，称 $e^* = x^* - x$ 为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。

1.2 绝对误差

定义

设 x 为准确值，x^* 为 x 的一个近似值，称 $e^* = x^* - x$ 为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。

- 误差可正可负。
- 误差一般无法准确计算。

定义

设 x 为准确值，x^* 为 x 的一个近似值，称 $e^* = x^* - x$ 为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。

- 误差可正可负。
- 误差一般无法准确计算。

定义

若存在一个正数 R^* 使得，$|e^*| = |x^* - x| \leq R^*$，则称 R^* 为绝对误差限，简称误差限。

定义

近似值的误差 e^* *与准确值* x *的比值，定义为*

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

称为近似值 x^* *的相对误差。*

1.3 相对误差

定义

近似值的误差 e^* *与准确值* x *的比值，定义为*

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

称为近似值 x^* *的相对误差。*

定义

若存在一个正数 R_r^* *使得，* $|e_r^*| \le R_r^*$*，则称* R_r^* *为相对误差限。*

定义

近似值的误差 e^* 与准确值 x 的比值，定义为

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

称为近似值 x^* 的相对误差。

定义

若存在一个正数 R_r^* 使得，$|e_r^*| \leq R_r^*$，则称 R_r^* 为相对误差限。

- 由于准确值难以求出，通常也采用 $e_r^* = \frac{e^*}{x} = \frac{x^* - x}{x^*}$
- 近似值的精确程度取决于相对误差的大小。

例子

- 设有两个量 $x = 100 \pm 1$，$y = 1000 \pm 2$，求 x 与 y 的相对误差限。

例子

- 设有两个量 $x = 100 \pm 1$，$y = 1000 \pm 2$，求 x 与 y 的相对误差限。

  解：$|e_r^*(x)| = |\frac{x^* - x}{x^*}| \leq \frac{1}{100} = 1\%$，所以用 100 来估计 x 的相对误差限为 1%。
  $|e_r^*(y)| = |\frac{y^* - y}{y^*}| \leq \frac{2}{1000} = 0.2\%$，所以用 1000 来估计 y 的相对误差限为 0.2%。

定义

若近似值 x^* 的误差限是某一位的半个单位，且该位到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位，这 n 个数字为 x^* 的有效数字 (siginificant figures)，也称用 x^* 近似 x 有 n 位有效数字。

定义

若近似值 x^* 的误差限是某一位的半个单位，且该位到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位，这 n 个数字为 x^* 的有效数字 (siginificant figures)，也称用 x^* 近似 x 有 n 位有效数字。

- 一个比较适合计算的描述如下。
  将 x^* 表示为浮点数形式，则 $x^* = \pm 10^m * (0.a_1 a_2 \cdots a_n \cdots)$，其中 a_i 都是 0 到 9 中的数字。若 $|x^* - x| \leq 0.5 * 10^{m-n}$，则 x^*至少具有 n 位有效数字。

例子

- $x = 3.14159265\cdots$ 的两个近似值，$x_1 = 3.1415$ 和 $x_2 = 3.1416$ 各具有几位有效数字?

例子

- $x = 3.14159265\cdots$ 的两个近似值，$x_1 = 3.1415$ 和 $x_2 = 3.1416$ 各具有几位有效数字?

  解：$|x_1 - x| = 0.00009265\cdots = 10^{-4} * 0.9265$，因为 $10^{-4} * 0.5 < 10^{-4} * 0.9265 < 10^{-3} * 0.5$，所以 3.1415 具有 4 位有效数字。
  类似的，3.1416 具有 5 位有效数字。

- 函数误差

■ 函数误差

设多元函数 $f(x)$，$x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ 是 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 的近似值，记 $\varepsilon(x_i^*)$ 为 x_i^* 近似 x_i 的误差，则有

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx \sum_{k=1}^{n} f'(x_k^*)\varepsilon(x_k^*)$$

例子

- 测得某场地的长 L 和宽 D 分别为：$L^* = 110m, D^* = 80m$。其测量误差限分别为 0.2m 和 0.1m。试求面积 S 的绝对误差限和相对误差限。

例子

- 测得某场地的长 L 和宽 D 分别为：$L^* = 110m, D^* = 80m$。其测量误差限分别为 0.2m 和 0.1m。试求面积 S 的绝对误差限和相对误差限。

解：面积 S 的近似值 $S^* = L^* * D^*$。由上一页的乘法公示，可以得到面积的误差限

$$\begin{aligned}|\varepsilon(S^*)| &\approx |L * \varepsilon(D^*) + D * \varepsilon(L*)| \\ &\leq 110 * 0.1 + 80 * 0.2 = 27(m^2) \approx R(S^*)\end{aligned}$$

相对误差限则为

$$R_r^*(S^*) = \frac{R(S^*)}{S^*} \approx \frac{27}{8800} = 0.31\%$$

- 简化计算步骤，减少运算次数
- 采用数值稳定性好的算法
- 避免两个相近数相减
- 防止大数吃掉小数
- 避免绝对值较小的数做除数

- 同样一个计算问题，如果能减少运算次数，不但可节省计算时间，提高计算速度，而且能减少舍入误差的积累，这是数值计算必须遵循的原则，也是数值计算方法要研究的重要内容。

- 同样一个计算问题，如果能减少运算次数，不但可节省计算时间，提高计算速度，而且能减少舍入误差的积累，这是数值计算必须遵循的原则，也是数值计算方法要研究的重要内容。
  - 例如，计算 x^{255} 的值，如果将 x 的值逐个相乘，要计算 254 次乘法，但是如果写成

    $$x^{255} = x * x^2 * x^4 * x^8 * x^{16} * x^{32} * x^{64} * x^{128}$$

    只需要做 14 次乘法运算。

- 对于一个具体的数值计算方法，如果输入数据的误差在计算过程中迅速增长而得不到控制，则称该算法是数值不稳定的，否则是数值稳定的。

- 对于一个具体的数值计算方法，如果输入数据的误差在计算过程中迅速增长而得不到控制，则称该算法是数值不稳定的，否则是数值稳定的。
  - 例如，计算 $S_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx$，其中 n=1, 2, ..., 8

- 对于一个具体的数值计算方法，如果输入数据的误差在计算过程中迅速增长而得不到控制，则称该算法是数值不稳定的，否则是数值稳定的。
  - 例如，计算 $S_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx$，其中 n=1, 2, ..., 8
  - 算法一：我们可以借助数列的方式来解决这个问题。

$$S_n + 5S_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 5x_{n-1}}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = 1/n$$

从而，我们得到递推公式 $S_n = 1/n - 5S_{n-1}$。而后计算，$S_0 = ln6 - ln5 \approx 0.182$，这里保留三位有效数字。通过递推公式，我们得到 $S_1 = 0.090, S_2 = 0.050, S_3 = 0.0833, S_4 = -0.166, S_5 = 1.03, S_6 = -4.98, S_7 = 25.0, S_8 = -125$。误差越来越大！

- 我们可以换一个数值计算的方法。
  - 利用

$$S_{n-1} = \frac{1}{5n} - \frac{1}{5}S_n$$

先计算 S_{10}，而后向前迭代。误差会缩小！

- 在数值计算中，相近的两数相减有效数字会严重损失。

- 在数值计算中，相近的两数相减有效数字会严重损失。
  - 例如，在计算 $8-\sqrt{63}$ 时，对于 $\sqrt{63}$，我们保留三位有效数字，则 $\sqrt{63}\approx 7.94$。

- 在数值计算中，相近的两数相减有效数字会严重损失。
  - 例如，在计算 $8-\sqrt{63}$ 时，对于 $\sqrt{63}$，我们保留三位有效数字，则 $\sqrt{63}\approx 7.94$。

    那么，如果直接计算

    $$8-\sqrt{63}\approx 8-7.94=0.06$$

    此时，只剩下一位有效数字了。

2.3 避免两个相近数相减

- 在数值计算中，相近的两数相减有效数字会严重损失。
  - 例如，在计算 $8-\sqrt{63}$ 时，对于 $\sqrt{63}$，我们保留三位有效数字，则 $\sqrt{63}\approx 7.94$。

    那么，如果直接计算

    $$8-\sqrt{63}\approx 8-7.94=0.06$$

    此时，只剩下一位有效数字了。

    如果我们采用如下计算

    $$8-\sqrt{63}=\frac{1}{8+\sqrt{63}}\approx 0.0627$$

    此时具有三位有效数字。

2.4 防止大数吃掉小数

- 数值运算中参加运算的数有时数量级相差很大，而计算机位数有限，如不注意运算次序就可能出现大数“吃掉”小数的现象，影响计算结果的可靠性。

2.4 防止大数吃掉小数

- 数值运算中参加运算的数有时数量级相差很大，而计算机位数有限，如不注意运算次序就可能出现大数“吃掉”小数的现象，影响计算结果的可靠性。
  - 举个例子，用六位浮点数计算 $x^2 - (10^9 + 1)x + 10^9 = 0$ 的根。

- 数值运算中参加运算的数有时数量级相差很大，而计算机位数有限，如不注意运算次序就可能出现大数“吃掉”小数的现象，影响计算结果的可靠性。
  - 举个例子，用六位浮点数计算 $x^2-(10^9+1)x+10^9=0$ 的根。
    最常见的方法是求根公式：

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

在计算机内，10^9 存为 $0.1*10^{10}$，1 存为 $0.1*10$。做加法时，两个加数的指数先向大指数对齐，再将浮点部分相加。即 1 的指数部分需要变为 10^{10}，则 $1=0.000000001*10^{10}$。但是计算机只能储存小数点后 6 位，因此，1 就会被记为 $0.000000*10^{10}$，此时就被 10^9 吃掉了。
最终，这种方法计算出来的两个解分别为 10^9 和 0。

- 在计算中，用绝对值很小的数作除数有可能出现以下两种情况：一是商有可能超出计算机表示的范围而引发“溢出”现象；二是会使商的数量级增加，当商过大时，商作为一个大数将有可能吃掉参与运算的一些小数，从而放大了商的绝对误差。

总结

1. 误差的来源
2. 绝对误差、相对误差、有效数字
3. 误差的传播
4. 数值计算的一些基本原则

谢谢！

Q&A