

第一章：数值分析与科学计算引论

(一) 计算机是科学发现的第三种工具。(另外两种?) 理论

计算科学:

计算工程、药物筛选、四色定理
去计算相关理论 算法 应用、计算机体系、学科
计算数学 计算机科学 工程计算 高性能计算
在科学问题中可计算模型 并科学高效实验

科学计算:

计算任务

计算数学:

发展计算机可用数学 A $\xrightarrow{\times}$ B
比数学更有特点 内容更
"二阶数学"

数值分析 (计算方法): 计算科学中其他(典型)原理性知识



(二) 应用价值

应用数学解决实际问题的一般思路:



应用领域:

"计算+" 计算力学 + 化学 + 生物
+ 语言学 图像、信号 机器学习
金融

(三) 数值分析 (计算方法) 基本内容

- ① 数值逼近 (近似函数) $f(x)$
多项式、三角函数、小波、插值、拟合...
- ② 数值代数 $Ax=b$
 $x=A^{-1}b$
 A 100亿, $|A|$ 很小
- ③ 方程数值解 $f(x)=0$
 $y'=f(x,y)$
- ④ 数值优化 \checkmark
- ⑤ 机器学习 \checkmark

(四) 数值计算误差

- (a) 误差来源: { 固有 -- (模型误差, 观测误差)
计算 -- (截断误差, 舍入误差) }
 $e = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{7!} + \dots$ "机器0" 字长
- (b) 误差定量分析:
(定义) 绝对误差: x^* 近似 $e^* = |x^* - x| \cdot 10^{-16} \approx 0$ 当 |相| 比
(定义) 相对误差: $e_r = \frac{|x^* - x|}{|x|}$ 通常用 $e_r^* = \frac{|x^* - x|}{|x^*|}$
 $\left| \frac{|x^* - x|}{x} - \frac{|x^* - x|}{x^*} \right| \leq \frac{|x^* - x|^2}{|x|^2}$
- (定义) 有效数字: 若近似值 x^* 误差是单位的半个单位, 该位到 x^* 的第一位非0数字共有几位, 就称 x^* 有几位有效数字
 $x^* = \pm 10^m (a_1 + a_2 \cdot 10^{-1} + \dots + a_n \cdot 10^{-(n-1)})$ $a_1 \neq 0$
- (例): $|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$ $a_1 \dots a_n$ 有效
 $3.14 \approx \pi$ $11 \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$ $3.15 \approx \pi$ 5 无效
 3.1 有效 2 \downarrow
- (例): $3.1415926 \dots$

(四) 数值计算误差

(续) 有效数字: 例 187.9325, 8.00003 具有5个有效数字
 187.93, 8.0000 具有5个有效数字

(定理: 有效数字与相对误差关系):

近似值 $x^* = \pm 10^m (a_1 + \dots + a_n 10^{-(n-1)})$ $a_1 \neq 0$
 (1) 若 x^* 有 n 个有效数字, 则相对误差限 $\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$

(2) 反之, 若 $\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$, x^* 至少有 n 个有效数字
 证明 " \Rightarrow " $\varepsilon_r^* = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}}{a_1 \times 10^m} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$

" \Leftarrow " $|x - x^*| = \varepsilon_r^* |x^*| \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)} \times (a_1+1) \times 10^m$

(例): 要取 $\sqrt{20}$ 近似值, 使其相对误差界小于 0.1%, 取几位有效数字?

$\sqrt{20} = 4.4721 \dots$ 几个有效数字? $\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)} \leq 0.1\%$
 $0.00125 \times 10^{-(n-1)} \leq 0.001$ $n \geq 3, \dots$ $a_1 = 4, n = 4$

(四) 数值计算误差

(c) 运算误差的估计 (四则运算):

10:31 回来

$$|x_1 \pm x_2 - (x_1^* \pm x_2^*)| \leq |x_1 - x_1^*| + |x_2 - x_2^*|$$

$$|x_1 x_2 - x_1^* x_2^*| \leq |x_2^*| |x_1 - x_1^*| + |x_1^*| |x_2 - x_2^*|$$

$$\left| \frac{x_1}{x_2} - \frac{x_1^*}{x_2^*} \right| = \frac{|x_2^*| |x_1 x_2^* - x_1^* x_2| + |x_1^*| |x_2 - x_2^*|}{|x_2 x_2^*|}$$

(四) 数值计算误差

(d) 舍入误差通常处理方法:

(1) 避免大数与小数直接相加(大吃小)

$$1 + 10^{-16} = 1 \quad 1 + 10^{-16} + 10^{-16} \neq 1$$

(2) 避免大数除以小数(要) 10^{-16}

(3) --- 相近数相消 $\frac{\sqrt{x+1} - \sqrt{x}}{\frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}}$ $\log b + 1 - \log x$

(4) 减少运算次数

$$p(x) = a_0 x^n + \dots + a_{n-1} x + a_n \quad \text{求 } p(x) \quad \text{算 } p(x)$$

$$1 + 2 + \dots + n = \frac{1}{2} n(n+1) \quad \text{求和法}$$

$$p(x) \left(((a_0 x + a_1) x + a_2) x + a_3 \right) \dots x + a_n$$

n次乘法 秦九韶算法



(五) 数值算法的重要评价指标

(a) 精确性 (逼近性): 是否可以达到精确近似
计算次数越大, 精度越高

(b) 可靠性: (数学理论预期误差) $|f(x) - T_n(x)| \leq \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} |x - x_0|^{n+1}$
误差估计

(c) 算法复杂度 (时间、空间): "乘法次数" $AX=b$
高斯法 $O(n^3)$ $n=10^4$ $n^3=10^{12}$
内存

(d) 稳定性: 输入微小变化导致误差显著放大的算法
称为不稳定, 反之称为稳定



(五) 数值算法的重要评价指标

(d) 稳定性 (续):

(例) $I_n = e^{-1} \int_0^1 x^n e^x dx$ $I_n = 1 - n I_{n-1}$ $\hookleftarrow I_0$

$I_n^* = 1 - n I_{n-1}^*$
 $E_n = -n E_{n-1} = (-1)^n (n!) E_0$

$E_0 = I_0 - I_0^* = 1 - e^{-1} - 1_0^* = \approx 10^{-8}$

(例) $n=10$ $|E_{10}| = \frac{10! \times 10^{-8}}{1} = ?$
 不成

(例) $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$

$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{pmatrix}$



(五) 数值算法的重要评价指标

(a) 精确性 (逼近性): 是否可认为精确近似
 计算规模越大, 精度越高.

(b) 可靠性: (数学理论预期误差) $|f(x) - I_n(x)| \leq \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)! (b-a)^n}$
 误差估计

(c) 算法复杂度 (时间、空间): "乘法次数" $AX=b$
 $A_{n \times n}$
 高斯法 $O(n^3)$ $n=10^4$ $n^3=10^{12}$
 \hookleftarrow 内存

(d) 稳定性: 输入微小变化导致误差显著被放大的算法
 称为不稳定, 反之称为稳定



(六) 前序课程、软件、课程特点、评价方式

微积分、线性代数

C, MATLAB, ~~Java~~ Python

"实践性" "综合性"

平时(上课+作业) 20%

实验作业(实验报告) 20%

期末考试 60%