

计算方法 (B)

2020-2021年度第一学期

课程信息

课程名称: 计算方法

课程时间: 周五(1, 2)

课程地点: 5202

课程教材: 数值计算方法与算法 (第三版), 科学出版社,
张韵华、王新茂、陈效群、张瑞 (著)

课外参考: Numerical Analysis 数值分析, 机械工业出版社,
David Kincaid, Ward Cheney (著)

教师: 蒋琰

邮箱: jiangy@ustc.edu.cn

办公室: 管理理科研楼1631

助教: 王恺鹏 wangkp@mail.ustc.edu.cn

刘泽蓬 lzp0375@mail.ustc.edu.cn

徐中恕 xzs1600@mail.ustc.edu.cn

办公室: 管理理科研楼1212

869742921



2020秋计算方法B

群号: 869742921



扫一扫二维码, 加入群聊。



课程考核

平时作业： 占总成绩**20%~30%**，两周一次或说明
周五上课时间交(100%)
晚于这一时间(50%)
期末考前(20%)
期末考后(0%)

随堂测试： 占总成绩**10%**
时间不定，不可补考，除非有假条

期末考试： 占总成绩**60%~70%**

课程目标

实际问题 ——> 物理模型 ——> 数学模型 ——> 计算机数值求解
计算方法是一种研究并求解数学问题的**数值近似解**的方法。

介绍常用的数值计算方法

- 函数的近似与拟合：离散点构造近似函数
- 方程（组）数值求解
- 数值积分，数值微分
- 常微分方程的近似求解
- 矩阵性质的求解

掌握数值计算方法的基本原理

- 数学原理
- 收敛性分析
- 误差分析
- 稳定性分析

编写数值计算方法的程序（C/C++语言，Matlab，Python...）

Chapter 0 绪论

误差

Def: 设 x^* 为精确解, x 为 x^* 的一个近似值, 则

- **(绝对)误差** = 精确值 - 近似值 $e = x^* - x$
- **相对误差** = 绝对误差 / 精确解(或近似解) $e_r = \frac{e}{x^*} \text{ or } \frac{e}{x}$

Example: 相对误差是相同的, 但是绝对误差有一个较大的变化范围。

相对误差考虑了值本身的大小, 更具有意义, 但是绝对误差更方便。

x^*	x	e	e_r
0.3000×10^1	0.3100×10^1	-0.1×10^0	$-0.0\bar{3}$
0.3000×10^{-3}	0.3100×10^{-3}	-0.1×10^{-4}	$-0.0\bar{3}$
0.3000×10^4	0.3100×10^4	-0.1×10^3	$-0.0\bar{3}$

有效位数

- Def: 当 x^* 的误差限为某一位的半个单位, 则这一位到第一个非零位的位数称为 x^* 的**有效位数**。

$$|x^* - x| < 0.5 \times 10^{-p}, \text{最大非负整数 } p$$

- Example 1:

$$\pi \approx 3.14, \quad |\pi - 3.14| = 0.00159... < 0.5 \times 10^{-2}, \quad 3\text{位有效数字}$$

- Example 2: 若 x^* , 经过**四舍五入**后得到其近似值

$$x = \pm x_1 . x_2 \cdots x_n \times 10^m,$$

其中, $x_1 \neq 0$, x_2, \dots, x_n 分别为0到9中的一位数, m 为整数, 则 x 的有效位数就是从最后一位到第一位非0的位数, 即 **n 位**有效数字。

- Example 3: x 为准确值, 若其近似值 \tilde{x} 具有 n 位有效位数, 估计其相对误差。

解. 设

$$\tilde{x} = \pm x_1.x_2 \cdots x_n \times 10^m \quad (1)$$

则 $|x| > (x_1.x_2 - 0.1) \times 10^m$, 因而

$$|R(x)| = \left| \frac{E(x)}{x} \right| \leq \frac{0.5 \times 10^{-(n-1)} \times 10^m}{(x_1.x_2 - 0.1) \times 10^m}$$

简单点, 可以用

$$|R(x)| \leq \frac{0.5 \times 10^{-(n-1)} \times 10^m}{x_1 \times 10^m}$$

来估计相对误差

误差限

- Def: 如果 x^* 或者 e 的值不易得到，可以用限制 e 的范围描述和控制误差的范围：

ε 称为**绝对误差限**，如果 $|e| = |x^* - x| \leq \varepsilon$

ε_r 称为**相对误差限**，如果 $|e_r| = \left| \frac{e}{x^*} \right| \leq \varepsilon_r$

误差

- **原始误差：**模型误差，是建模过程中产生的误差
- **舍入误差：**有限位数字保存或运算，是由于计算机表达数据产生的误差

$$\pi = 3.14159265358979323... \approx 3.14$$

$$\sqrt{3} = 1.732050807568877... \approx 1.732$$

- **截断误差：**有限项近似无限项，是数值方法产生的误差

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots \approx \sum_{n=0}^N \frac{x^n}{n!}$$

- 数值分析的主题很大程度上关注理解和控制各种类型的误差。这里，我们将处理一种典型的误差，其常常是由粗心的程序设计引起的。
- **Example**: 在5位有效数字的计算机上，考虑两个相近数相减：

$$\begin{array}{ll}
 x^* = 0.3721748693, & x = 0.37215 \\
 y^* = 0.3720230572, & y = 0.37202 \\
 x^* - y^* = 0.0001248121, & x - y = 0.00013
 \end{array}$$

相对误差 $\left| \frac{x^* - y^* - (x - y)}{x^* - y^*} \right| \approx 0.04$ 非常大。

- 避免两个相近的数字相减。可换成其他等价形式或使用近似公示：

$$\sqrt{x^2 + 1} - 1 = (\sqrt{x^2 + 1} - 1) \frac{\sqrt{x^2 + 1} + 1}{\sqrt{x^2 + 1} + 1} = \frac{x^2}{\sqrt{x^2 + 1} + 1}$$

$$f(x_1) - f(x_2) = f'(x_2)(x_1 - x_2) + \frac{1}{2}f''(x_2)(x_1 - x_2)^2 + \dots$$

- 避免除以一个绝对值很小的数。例如： h 很小时，计算 $\left(\frac{1}{h}\right)^3$ 而不是 $\frac{1}{h^3}$ 。

稳定性

- Example:

$$p_n = \frac{13}{3}p_{n-1} - \frac{4}{3}p_{n-2}, \quad n = 2, 3, \dots \quad p_0 = 1, \quad p_1 = \frac{1}{3} \quad \Rightarrow \quad p_n = \left(\frac{1}{3}\right)^n$$

数值: $x_0 = 1.0000000$, $x_1 = 0.3333333$, $x_2 = 0.1111112$, ...

$$x_{15} = 3.657493 \text{ (相对误差 } 10^8 \text{)}$$

- x_n 中的任何误差在计算 x_{n+1} 时被乘以 $13/3$ 。因此, 存在这种可能性: x_1 的误差乘上因子 $(13/3)^{14}$ 后传给了 x_{15} 。在计算 x_2, x_3, \dots 中的每一项, 产生的额外的舍入误差都乘上具有形式为 $(13/3)^k$ 的因子后传给了 x_{15} 。

稳定性

- 若一个数值过程某个阶段所产生的小误差，在随后的阶段中被放大，从而严重降低了全部计算的精确度，则我们说这个数值算法**不稳定**。
- 使用更高精度的计算机，可以减少舍入误差，但舍入误差的增长只是推后，但未消失。

- 有时候模型就是病态的：

例 9. 解线性方程组

$$\begin{cases} x + ay = 1 \\ ax + y = 0 \end{cases}$$

解. 可以看到,

- 当 $a = 0.99$ 时, 真解为 $x = 50.25$ 。
- 当 $a = 0.991$ 时, 真解为 $x = 55.81$ 。

a 的变化只有大概 0.1%, 但解的变化达到了 10%。解本身对输入参数很敏感。

- 如果模型的参数发生很小的变化，会导致他的解产生很大的扰动，这样的模型称为病态的。
- 对于一个病态问题：需要更高精度浮点数的计算机程序来计算，或者，转化为等价的、非病态的问题。