数值计算方法

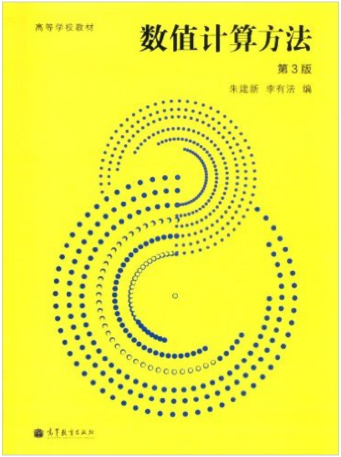
第一章　引论

ruiluo@outlook.com

关于本课程

- 专业必修课
- 考查方式：作业、考试
- 考试方式：闭卷

教材



《数值计算方法》

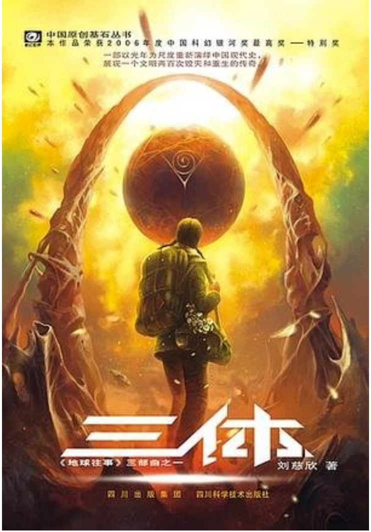
朱建新，李有法 编

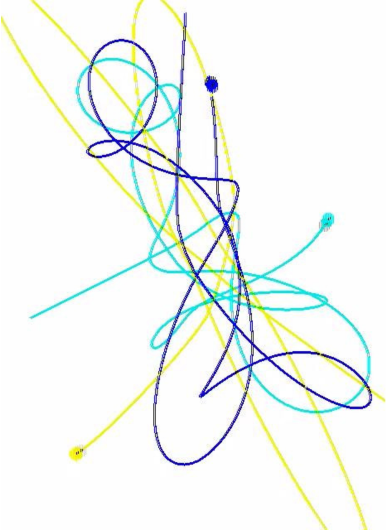
高等教育出版社

什么是数值方法?

- 科学和工程领域用来解决一系列数值求解问题的方法，转化数学问题的求解方式，往往需要通过计算机实现
- 包括：
  - 方程，方程组的求解
  - 微分和积分
  - 微分方程，微分方程组的求解
  - 线性代数的相关计算
  - 插值，拟合，优化，谱分析，有限元，Monte Carlo，等等
- 解决一些无解析解，或解析解过于复杂的具体问题

三体问题


中国原创基石丛书
本作品荣获2006年度中国科幻银河奖最高奖——特别奖
三体
《地球往事》三部曲之一
刘慈欣 著
四川出版集团 四川科学技术出版社



误差的基本概念

- 原始误差，数据本身，由于测量等造成的误差
- 截断误差，由展开近似造成，例如：计算

$$\arctan(x) = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \frac{x^7}{7} \cdots$$

- 舍入误差，由数字在计算机中的存储造成

计算机上的舍入误差

```c
#include<stdio.h>

int main(){
    float x = 1.0 / 3.0;
    if (x * 3.0 == 1.0)
        printf("Yes, they are equal \n");
    else
        printf("No, they are not equal \n");

    return 0;
}
```

计算机上的舍入误差

```
#include<stdio.h>

int main(){
    float x = 1.0 / 2.0;
    if (x * 2.0 == 1.0)
        printf("Yes, they are equal \n");
    else
        printf("No, they are not equal \n");

    return 0;
}
```

计算机上的舍入误差

- 计算机上的二进制数

21.25

计算机上的舍入误差

- 计算机上的二进制数

$$21.25 \quad = \quad 16+4+1+\frac{1}{4}$$

计算机上的舍入误差

- 计算机上的二进制数

$$
\begin{aligned}
21.25 &= 16 + 4 + 1 + \frac{1}{4} \\
&= 1 \times 2^4 + 0 \times 2^3 + 1 \times 2^2 + 0 \times 2^1 + 1 \times 2^0 \\
&\quad + 0 \times 2^{-1} + 1 \times 2^{-2}
\end{aligned}
$$

计算机上的舍入误差

- 计算机上的二进制数

$$
\begin{aligned}
21.25 &= 16 + 4 + 1 + \frac{1}{4} \\
&= 1 \times 2^4 + 0 \times 2^3 + 1 \times 2^2 + 0 \times 2^1 + 1 \times 2^0 \\
&\quad + 0 \times 2^{-1} + 1 \times 2^{-2}
\end{aligned}
$$

$$(21.25)_{10} = (10101.01)_2$$

- 计算机上的二进制数

$$
\begin{aligned}
21.25 &= 16+4+1+\frac{1}{4} \\
&= 1\times 2^4+0\times 2^3+1\times 2^2+0\times 2^1+1\times 2^0 \\
&\quad +0\times 2^{-1}+1\times 2^{-2}
\end{aligned}
$$

$$(21.25)_{10} = (10101.01)_2$$

- 那么

$$21.3 = ?$$

误差的基本概念

如果令 x^* , x 分别为误差的 **近似值** 和 **精确值**

- 绝对误差 e 和绝对误差限 ε

$$|e| = |x - x^*|$$
$$|x - x^*| < \varepsilon$$

- 相对误差和相对误差限

$$e_r = \frac{x - x^*}{x}, \quad \text{or} \quad e_r = \frac{x - x^*}{x^*}$$

$$|e_r| \leqslant \varepsilon_r^*$$

误差的传播

例题：

某圆柱体高度测量结果是 $H = 6.0 \pm 0.2\ \mathrm{cm}$
直径测量结果是 $D = 5.0 \pm 0.1\ \mathrm{cm}$
求其体积 V 的绝对误差和相对误差

误差的传播

例题：

某圆柱体高度测量结果是 $H = 6.0 \pm 0.2$ cm
直径测量结果是 $D = 5.0 \pm 0.1$ cm
求其体积 V 的绝对误差和相对误差

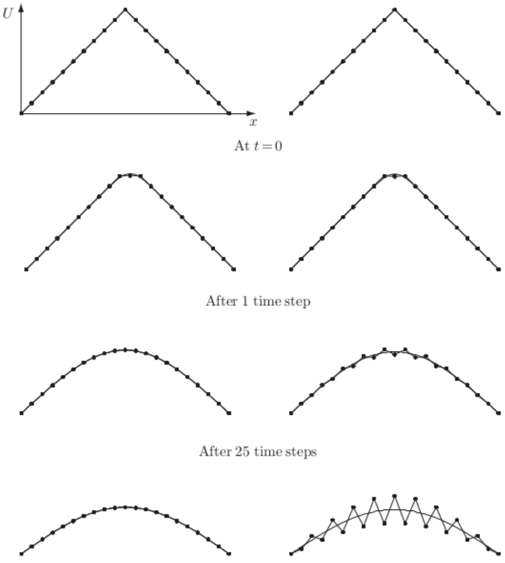
- 数值运算中误差传播。若 $y = f(x_1, x_2)$，而精确值 $y^* = f(x_1^*, x_2^*)$，则有(泰勒展开得到)

$$y - y^* \simeq \left.\frac{\partial f}{\partial x_1}\right|_{x_1^*, x_2^*} (x_1 - x_1^*) + \left.\frac{\partial f}{\partial x_2}\right|_{x_1^*, x_2^*} (x_2 - x_2^*)$$

误差的传播

- 真实情况下误差的传播可能会是一个复杂的过程，受到很多因素的影响
- 误差在计算过程中可能会传播并放大。算法的设计和算法参数的选择可以控制误差（**收敛** 和 **发散**）

微分方程数值求解发散和收敛的例子



After 50 time steps

数值计算一般要注意的问题

- 避免特别大的大数和特别小的数做加减（大数吃小数）
- 要避免相近的数相减，例子：$x = 1000$，计算

$$\sqrt{x+1} - \sqrt{x}$$

模拟计算机的计算过程，保留四位有效数字

数值计算一般要注意的问题

- 避免特别大的大数和特别小的数做加减（大数吃小数）
- 要避免相近的数相减，例子: $x = 1000$ ，计算

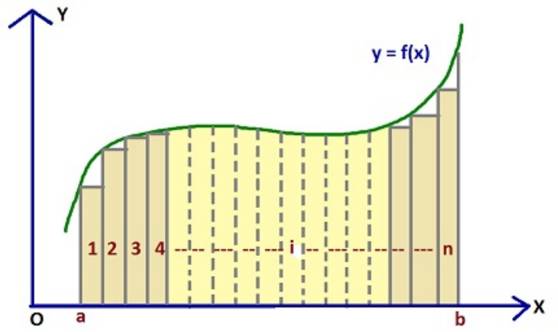
  $$\sqrt{x+1} - \sqrt{x}$$

  模拟计算机的计算过程，保留四位有效数字　如果我们用

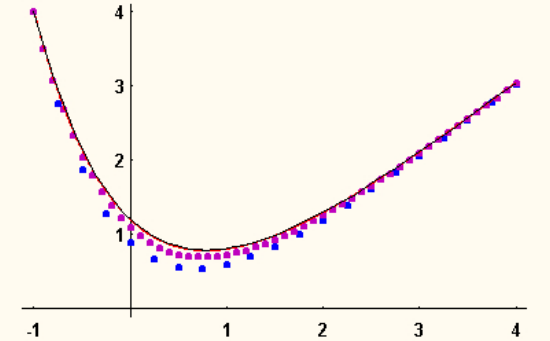
  $$\sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}$$

- 要避免绝对值很小的数作除数

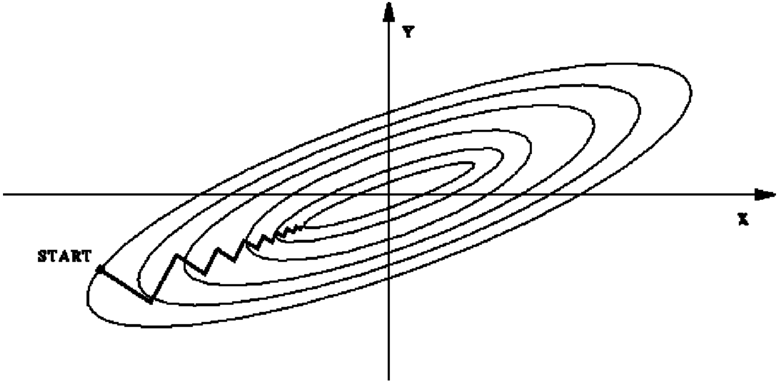
- 离散化（数值积分）



- 离散化（微分方程数值解）



- 迭代和逼近



数值计算常见方法

- 求解$\sqrt{a}$的数值,牛顿求根公式,采用迭代的方法,

$$x_{i+1} = \frac{x_i}{2} + \frac{a}{2x_i}$$

  初始x_0任意取值

- 最后x_i可收敛于$\sqrt{a}$