计 算 方 法

第一章 计算方法概论

课程背景

科学技术发展到今天，电子计算机的应用已渗透到社会生活的各个领域。其中，计算模拟是电子计算机处理实际问题的一种关键手段，从宏观天体运动学到微观分子细胞学说，从工程系统到非工程系统，无一能离开计算方法。计算方法这门学科的诞生，使科学发展产生了巨大飞跃，它使各科学领域从定性分析阶段走向定量分析阶段，从粗糙走向精密。由此可见，计算方法是当今每一位从事科学研究与应用的人不可缺少的知识。本章主要介绍数值算法的基本思想。

课程梗概

梗概：

- 数学问题
- 数值算法
- 算法分析

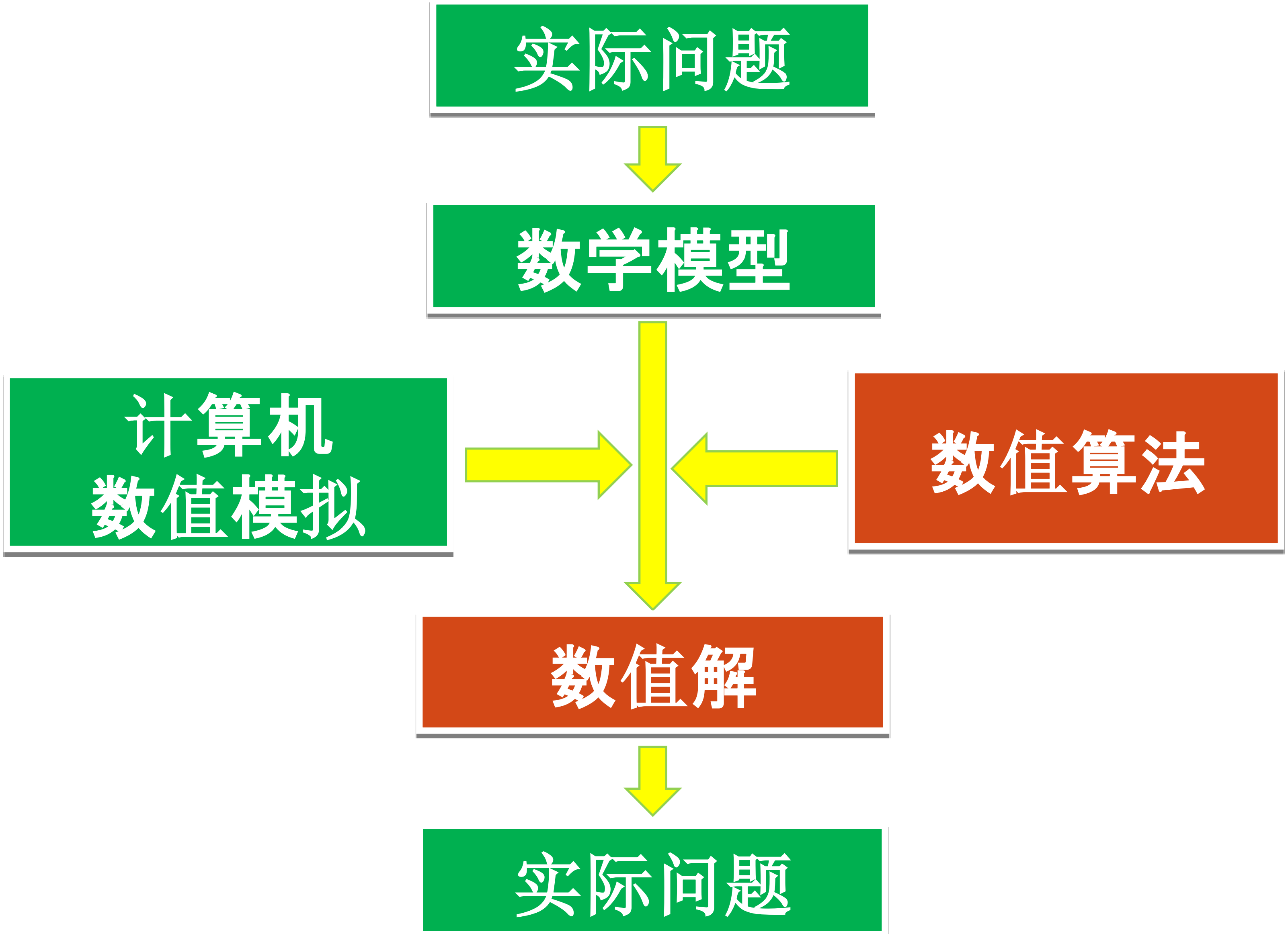
重点：

- 算法构造的思想
- 各种基础数值算法
- 算法分析的方法

课程内容

- 第一章　　计算方法概论
- 第二章　　非线性方程的数值解法
- 第三章　　线性方程组的数值解法
- 第四章　　插值方法
- 第五章　　数值积分
- 第六章　　常微分方程初值问题的数值解法

算法流程



算法特点

当构造一个数值算法时，它既要面向数学模型，使算法能尽可能地仿真原问题；同时，它也要面向计算机及其程序设计，要求算法具递推性、简洁性及必要的准确性，使其能借助于计算机最终在尽可能少的时间内获得合符原问题精度要求的数值解。

算法思想

复杂 → 简单 + 重复

算法设计的基本思想：

- 规模缩减的思想
- 校正的思想
- 松弛的思想
- 并行的思想
- …

算法分类

- **直接法：**
  采用由原模型精确解的递推关系来实现计算机求解的方法。

- **数值方法：**
  利用原模型解的近似递推关系求得问题逼近解的方法，所获逼近解称为原问题的**数值解**。

直接法实例

例1： 计算积分 $I_n=\int_0^1 \frac{x^n}{x+5}dx,\ n=0,1,2,\ldots,30.$

解：通过直接计算可产生递推关系：

$$I_n=-5I_{n-1}+\frac{1}{n},\ I_0=\ln\frac{6}{5}\approx 1.8232e-001. \qquad (1)$$

且由经典微积分知识可推得 I_n 具如下性质：

1) $I_n>0;$

2) I_n单调递减;

3) $\lim\limits_{n\to\infty} I_n=0;$

4) $\frac{1}{6n}<I_{n-1}<\frac{1}{5n}\quad (n>1)$

直接法实例

算法A：按公式(1)，自*n*=1计算到*n*=30产生如下计算结果

n	1	2	3	4	5
I_n	8.8392e-002	5.8039e-002	4.3139e-002	3.4306e-002	2.8468e-002
n	6	7	8	9	10
I_n	2.4325e-002	2.1233e-002	1.8837e-002	1.6926e-002	1.5368e-002
n	11	12	13	14	15
I_n	1.4071e-002	1.2977e-002	1.2040e-002	1.1229e-002	1.0522e-002
n	16	17	18	19	20
I_n	9.8903e-003	9.3719e-003	8.6960e-003	9.1515e-003	4.2426e-003
n	21	22	23	24	25
I_n	2.6406e-002	-8.6575e-002	4.7635e-001	-2.3401e+000	1.1740e+001
n	26	27	28	29	30
I_n	-5.8664e+001	2.9336e+002	-1.4667e+003	7.3338e+003	-3.6669e+004

直接法实例

算法A: 每向前推进一步，计算值的舍入误差**增长5倍**

算法B:

第1步，由性质 4) $\dfrac{1}{6n} < I_{n-1} < \dfrac{1}{5n} \quad (n > 1)$

取 $I_{30} \approx \dfrac{\dfrac{1}{6\times 31} + \dfrac{1}{5\times 31}}{2} = 5.9140e-003,$

第2步，用递推公式 $I_{n-1} = -\dfrac{I_n}{5} + \dfrac{1}{5n},$

自 n=30计算到 n=1。

算法B每向后推进一步，其舍入误差便**减少5倍**。

直接法实例

算法B获得合符原积分模型性态的如下数值结果：

n	29	28	27	26	25
I_n	5.4839e-003	5.7998e-003	5.9829e-003	6.2108e-003	6.4501e-003
n	24	23	22	21	20
I_n	6.7100e-003	6.9913e-003	7.2974e-003	7.6314e-003	7.9975e-003
n	19	18	17	16	15
I_n	8.4005e-003	8.8462e-003	9.3419e-003	9.8963e-003	1.0521e-002
n	14	13	12	11	10
I_n	1.1229e-002	1.2040e-002	1.2977e-002	1.4071e-002	1.5368e-002
n	9	8	7	6	5
I_n	1.6926e-002	1.8837e-002	2.1233e-002	2.4325e-002	2.8468e-002
n	4	3	2	1	0
I_n	3.4306e-002	4.3139e-002	5.8039e-002	8.8392e-002	1.8232e-001

数值方法实例

例2：两点边值问题

$$\begin{cases} y'' + p(x)y' + q(x)y = f(x), & x \in (a,b) \\ y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta, \end{cases}$$

解： 1) 将区间$[a,b]$离散化，即将$[a,b]$ N 等分，所得节点为

$$x_i = a + ih \quad \left(i = 0,1,2,\dots,N; \quad x_0 = a, \quad x_N = b\right)$$

2) 将两点边值问题离散化。由于

$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h} = y'(x_i) + O(h^2),$$

$$\frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1})}{h^2} = y''(x_i) + O(h^2),$$

数值方法实例

故可略去上两式中的余项，并取 $y_i \approx y(x_i)$

即得

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h},$$

$$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2},$$

代入两点边值问题方程得**差分格式**

$$\begin{cases} \dfrac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + p_i \dfrac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + q_i y_i = f_i, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1, \\ y_0 = \alpha, \quad y_N = \beta, \end{cases}$$