电磁工业软件理论与仿真

黄桃

huangtao@uestc.edu.cn 3号楼804

电子科技大学(深圳)高等研究院

建议教材及参考资料:

(一) 参考教材:

《计算方法与实习》(第5版),孙志忠、吴宏伟等,东南大学 出版社,2011年。





建议教材及参考资料:

(二)参考资料:

- 1. 《MATLAB教程 (R2018a) 》, 张志涌, 杨祖樱编著, 北京航空航天大学出版社, 2019年出版
- 2. 《数值方法 (MATLAB版) 》 (第四版) , John H.
 Mathews, Kurtis K. Fink著,陈渝,钱方等译,电子工业出版 社,2017年出版
- 3.《计算电磁学》(第二版),王秉中,邵维编著,科学出版社,2018年出版
- 4. 《电磁场有限元方法》,金建铭(著)、王建国(译),西 安电子科技大学出版社,1998年出版

课堂纪律要求:





课堂纪律要求:





第一章 绪论



§1 计算方法的对象与特点

1.1 计算方法的研究对象

主要研究适合于在计算机上使用的数值计算方法及于此相关的理论,包括方法的收敛性、稳定性以及误差分析。

实际问题 数学模型 计算方法 程序设计 上机计算

由实际问题应用有关科学知识和数学理论建立数学模型, 这一过程通常作为应用数学的任务。

而根据数学模型提出求解的计算方法直到编程上机算出结果, 进而对计算结果进行分析, 这一过程则是**计算数学**的任务。

天文

Simulated Proto-Stellar Disk Encounter

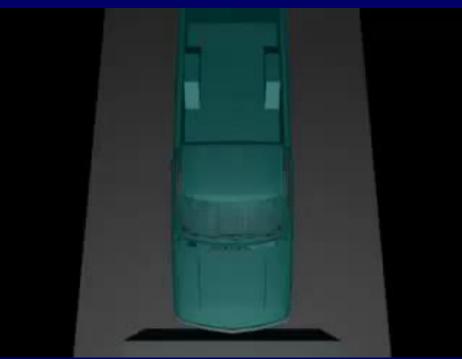
Sijing Shen
James Wadsley
McMaster University

气象模拟



机械设计

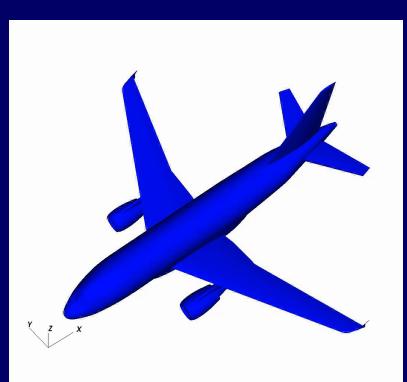


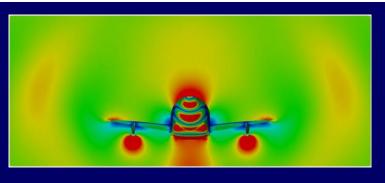


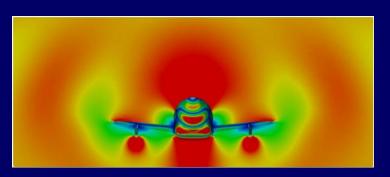
影像技术

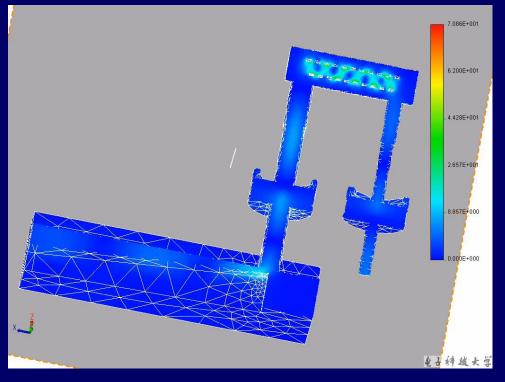


电磁仿真

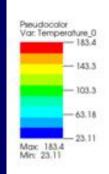


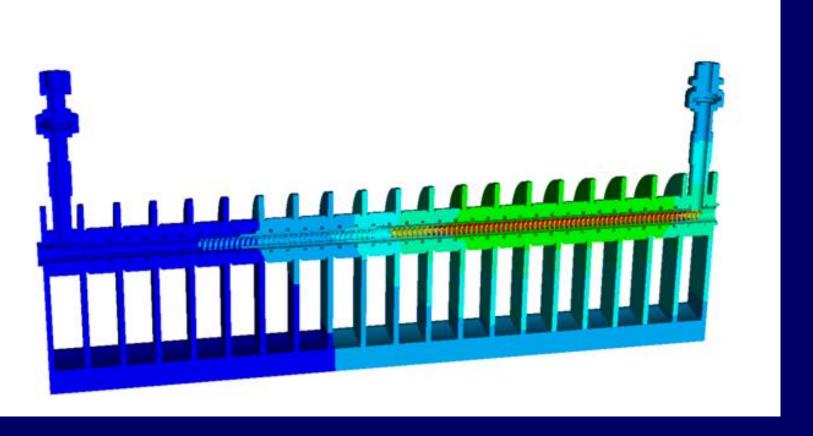




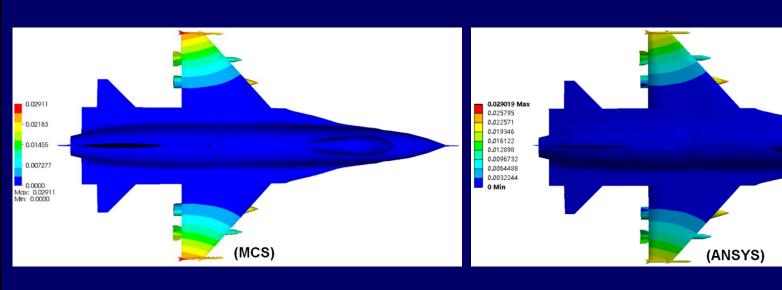


热学仿真

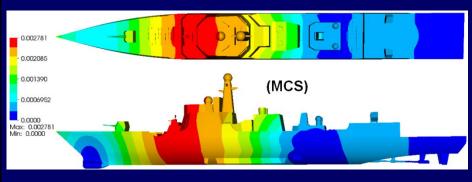


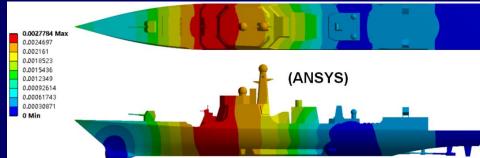


力学仿真

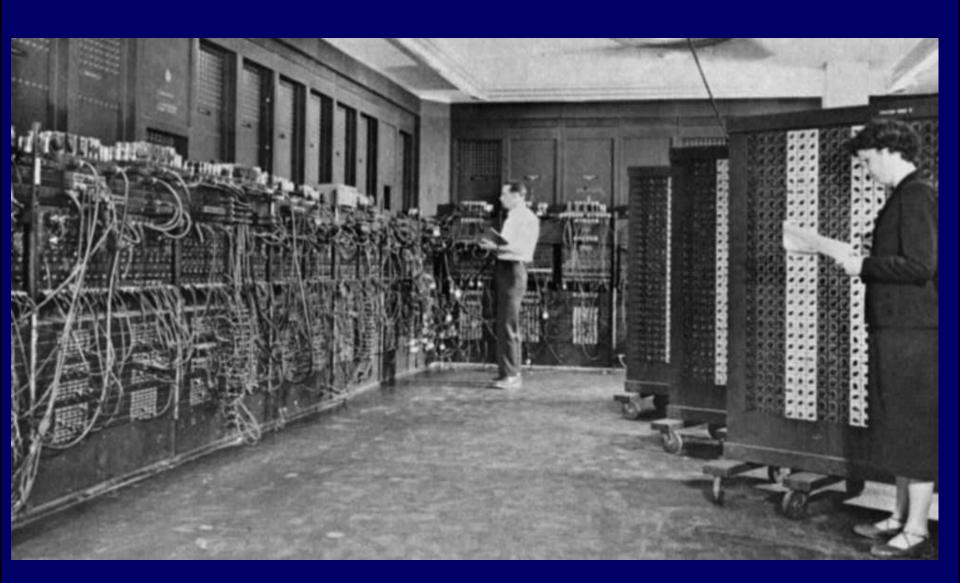


飞机、驱逐舰振型云图





第一台电子计算机: 1946年,美国宾夕法尼亚大学





国际 TOP 500组织是对全世界超级计算机进行排名的权威机构,从1993年起每年发布两次排行榜,排行榜包括500台超级计算机。



No.1 Fugaku(富岳)

日本 制造商: 富士通

处理器核芯: 7299072个; 峰值(Rmax): 415530 TFlop/s



No.2 Summit (美国)

美国制造商: IBM

处理器核芯: 2414592个; 峰值(Rmax): 148600 TFlop/s



No.3 Sierra (美国)

美国制造商: IBM

处理器核芯: 1572480个; 峰值(Rmax): 94640 TFlop/s



No.4 神威 太湖之光 (Sunway TaihuLight) 中国

中国 制造商: 国家并行计算机工程技术研究中心

处理器核芯: 10649600个; 峰值(Rmax): 93015 TFlop/s



No.5 TH—2 天河二号 (中国)

中国制造商:国防科大

处理器核芯: 4981760个; 峰值(Rmax): 61445 TFlop/s

简介:

天河二号曾经6次蝉联冠军,采用麒麟操作系统,目前使用英特尔处理器,将来计划用国产处理器替换,不仅应用于助力探月工程、载人航天等政府科研项目,还在石油勘探、汽车飞机的设计制造、基因测序等民用方面大展身手。

2022 TOP500-No.1



美国Frontier

处理器: 8730112 个

峰值速度: 1.102 exaflops

Exaflop 是衡量超级计算机性能的单位, 表示该计算机每秒可以至少进行 10^18 或百亿亿次浮点运算。

简介: 2022年5月30日,在德国汉堡举行的 ISC 2022公布了第59届的全球超算TOP500榜单,位于美国橡树岭国家实验室 (ORNL) 的新型超级计算机Frontier以绝对优势,成功超越日本的Fugaku,成为了全球最强超级计算机,同时也是全球首个真正的百亿亿次超级计算机。

2022 TOP500-No.7

新 华 W WWW.NEWS.CN

神威"太湖之光"

2022 TOP500-No.10



天河二号

中国的超级计算机神威·太湖之光和天河2号,则分别以93 Pflop/s 和61.4 Pflop/s 的成绩分别排名第7和第10,相比之前排名均有所下滑。不可否认的是,美国对于中国的先进技术的禁运,以及对于中国超算相关企业的制裁(去年将神威·太湖之光的处理器供应商申威列入了实体清单),在一定程度上阻碍了中国在超算领域前进的步伐。

不过,据可靠消息显示,中国的超级计算机神威·太湖之光和天河2号的继任者,Sunway Oceanlite和天河3号在 Linpack 基准测试中都实现了1.3 exaflops 的性能。值得注意的是,中国已停止向TOP500委员会提交最先进的超算系统信息,这也导致在对全球的超级计算机数量进行统计时,外媒不得不将中国的数据排除在外。

是否计算资源已够用?

$$x_{i} = \frac{D_{i}}{D}, D = \det(A), D_{i} = \det\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i-1} & b_{1} & a_{1i+1} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{ni-1} & b_{n} & a_{ni+1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

用行列式解法求解线性方程组:

n阶方程组,要计算n + 1个n阶行列式的值,

总共需要做n! (n - 1) (n + 1) 次乘法运算。

9.3316882822399758266431068932381e+161次

n=100?

美国Frontier

2.6851714545114619752527537719224e+136

太湖之光 3.1817838095393882760521878028586e+137



在计算机上是否根据数学公式编程就能得到正确结果?

研究例子:求解线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = \frac{11}{6} \\ \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{3}x_2 + \frac{1}{4}x_3 = \frac{13}{12} \\ \frac{1}{3}x_1 + \frac{1}{4}x_2 + \frac{1}{5}x_3 = \frac{47}{60} \end{cases}$$

其准确解为 $x_1=x_2=x_3=1$

如把方程组的系数舍入 成两位有效数字

$$x_1 + 0.50x_2 + 0.33x_3 = 1.8$$

$$0.50x_1 + 0.33x_2 + 0.25x_3 = 1.1$$

$$0.33x_1 + 0.25x_2 + 0.20x_3 = 0.78$$

它的解为x₁ = -6.222...

 $x_2 = 38.25...$

 $x_3 = -33.65...$

1.2 计算方法的特点

计算方法的一个明显特点是与计算机的使用密切结合, 具有实际试验的高度技术性,因此除注意学习基本理论知识 外,必须注意程序编制和上机计算等环节的学习与实践。

计算方法的绝大部分方法都具有近似性,而其理论又具有严密的科学性,方法的近似值正是建立在理论的严密性基础上。因此不仅要求掌握和使用算法,还要重视必要的误差分析,以保证计算结果的可靠性。

§2 数值计算中的误差

- 一、误差的背景介绍
 - 1. 来源与分类
 - > 从实际问题中抽象出数学模型

—— 模型误差

例1:质量为m的物体,在重力作用下,自由下落, 其下落距离s 与时间t 的关系是:

$$m\frac{d^2s}{dt^2} = mg ag{1.1}$$

其中g为重力加速度。

- > 通过测量得到模型中参数的值
 - —— 观测误差
 - > 求近似解 —— 方法误差 (截断误差)

$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots + \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!}$$

▶机器字长有限 —— 舍入误差

用计算机、计算器和笔算,都只能用有限位小数 来代替无穷小数或用位数较少的小数来代替位数较多 的有限小数,如:

$$\pi = 3.1415926... \qquad \frac{1}{3} = 0.3333...$$

$$x = 8.12345$$

四舍五入后……

$$\varepsilon_1 = \pi - 3.1416 = -0.0000074 \cdots$$

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{3} - 0.333 = 0.000 \ 33 \cdots$$

$$\varepsilon_3 = x - 8.1235 = 0.000044$$

在数值计算方法中,主要研究截断误差和含入误差

(包括初始数据的误差) 对计算结果的影响!

二、绝对误差、相对误差和有效数字

1. 绝对误差与绝对误差限

定义1:设 x^* 是准确值,x是一个近似值,称

$$e(x) = x * -x$$
 (1.1)

是近似值x 的绝对误差,简称为误差。

例 2:若用以厘米为最小刻度的尺去量桌子的长, 大约为1.45米, 求1.45米的绝对误差。

> 1.45米的 绝对误差=?



但实际问题往往可以估计出 |e(x)| 不超过某个正数 ε , 即, $|x^*-x|\leq \varepsilon$ 则称 ε 为绝对误差限,有了绝对误差限 就可以知道 x^* 范围为

$$x - \varepsilon \le x^* \le x + \varepsilon$$

即 x^* 落在 $[x - \varepsilon, x + \varepsilon]$ 内。在应用上,常常采用下列 写法来刻划 x^* 的精度。

$$x^* = x \pm \varepsilon$$

2. 相对误差和相对误差限

定义2: 设 x^* 是准确值, x是近似值, 称

$$\frac{e}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*} \tag{1.3}$$

为近似值x 的相对误差,相应地,若正数 ε_n

满足
$$\left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \le \varepsilon_r$$

则称 ε_r 为x 的相对误差限。

3. 有效数字

定义3:

如果近似值 x 的误差限是其某一位上的半个单位,且该位直到x 的第一位非零数字一共有n 位,则称近似值x 有n 位有效数字。

由上述定义

$$\left|\pi - 3.1416\right| \le \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

$$\pi - 3.14 = 0.0015926$$

$$\pi - 3.1416 = -0.0000074$$

$$\pi - 3.1415 = 0.0000926$$

$$\left|\pi - 3.14159\right| \le \frac{1}{2} \times 10^{-5}$$

有效数位为3位

有效数位为5位

有效数位为4位

一般的,如果近似值x的规格化形式为

$$X = \pm 0.a_1 a_2 ... a_n ... \times 10^m$$

其中m为整数, $a_1\neq 0$, a_i 为0-9之间的整数。如果

$$|x^* - x| \le \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$
 (1.6)

则称近似值 x 有 n 位有效数字。

例 x = 1452.046是具有7位有效数字的近似值,则它的误差限为

$$\left|x - x^*\right| \le \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

设近似数据为 x_1, x_2, \ldots, x_n , 计算得到的函数值为

$$y=f(x_1, x_2, ..., x_n);$$

设准确值分别为 x_1^* , x_2^* , ..., x_n^* , 相应的函数值为

$$y^*=f(x_1^*, x_2^*, ..., x_n^*);$$

假定f 在点 (x_1, x_2, \ldots, x_n) 可微,则当数据误差较小时,

函数值的误差为

$$e(y) = y^* - y \approx df(x_1, ..., x_n) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1, ..., x_n)}{\partial x_i} (x_i^* - x_i)$$

$$= \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1, ..., x_n)}{\partial x_i} e(x_i)$$
(1.9)

其相对误差为

$$e_r(y) = \frac{e(y)}{y} \approx d(\ln f) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_i} \frac{(x_i^* - x_i)}{f(x_1, \dots, x_n)}$$

$$= \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_i} \frac{e(x_i)}{f(x_1, \dots, x_n)}$$

$$= \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_i} \frac{x_i}{f(x_1, \dots, x_n)} e_r(x_i)$$
(1.10)

和、差、积、商的误差公式为

$$e(x_{1}^{*} \pm x_{2}^{*}) \approx e(x_{1}^{*}) \pm e(x_{2}^{*})$$

$$e_{r}(x_{1}^{*} \pm x_{2}^{*}) \approx \frac{x_{1}^{*}}{x_{1}^{*} \pm x_{2}^{*}} e_{r}(x_{1}^{*}) \pm \frac{x_{2}^{*}}{x_{1}^{*} \pm x_{2}^{*}} e_{r}(x_{2}^{*})$$

$$e(x_1^*x_2^*) \approx x_2^*e(x_1^*) + x_1^*e(x_2^*)$$
 $e_r(x_1^*x_2^*) \approx e_r(x_1^*) + e_r(x_2^*)$

$$e(\frac{x_{1}^{*}}{x_{2}^{*}}) \approx \frac{1}{x_{2}^{*}} e(x_{1}^{*}) - \frac{x_{1}^{*}}{(x_{2}^{*})^{2}} e(x_{2}^{*}) \qquad e_{r}(\frac{x_{1}^{*}}{x_{2}^{*}}) \approx e_{r}(x_{1}^{*}) - e_{r}(x_{2}^{*})$$

和、差、积、商的误差限为

$$\begin{aligned} \left| e(x_1^* \pm x_2^*) \right| &\approx \left| e(x_1^*) \pm e(x_2^*) \right| \leq \left| e(x_1^*) \right| + \left| e(x_2^*) \right| \\ \left| e_r(x_1^* x_2^*) \right| &\approx \left| e_r(x_1^*) + e_r(x_2^*) \right| \leq \left| e_r(x_1^*) \right| + \left| e_r(x_2^*) \right| \\ \left| e_r(\frac{x_1^*}{x_2^*}) \right| &\approx \left| e_r(x_1^*) - e_r(x_2^*) \right| \leq \left| e_r(x_1^*) \right| + \left| e_r(x_2^*) \right| \end{aligned}$$

例 设 $y=x^n$, 求 y 的相对误差与 x 的相对误差之间的关系

例 假定运算中数据都精确到两位小数, 试求

 $x*=1.21 \times 3.65 - 9.81$

的绝对误差限和相对误差限,计算结果有几位有效数字

§3 数值计算中应该注意的一些原则

1. 使用数值稳定的计算公式

例4: 求
$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx$$
 $(n=0,1,2,...,8)$ 的值。

解:由于

$$I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x + 5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n}$$

初值

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln 6 - \ln 5 = \ln(1.2)$$

递推公式

$$\begin{cases} I_0 = \ln(1.2) \approx 0.182 \\ I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1}, & (n = 1, 2, \dots, 8) \end{cases}$$
 (E4-1)

按上式就可以逐步算出

$$I_{1} = 1 - 5I_{0} \approx 0.09$$

$$I_{2} = \frac{1}{2} - 5I_{1} \approx 0.05$$

$$I_{3} = \frac{1}{3} - 5I_{2} \approx 0.083$$

$$I_{4} = \frac{1}{4} - 5I_{3} \approx -0.165$$

$$I_{5} = \frac{1}{5} - 5I_{4} \approx 1.025$$

$$I_{6} = \frac{1}{6} - 5I_{5} \approx -4.952$$

注意此公式精确成立



What happened?!

不稳定的算法!

这就是误差传播所引起的危害!

由递推公式(E4-1)可看出, I_{n-1} 的误差扩大了5倍后传给 I_n ,因而初值 I_0 的误差对以后各步计算结果的影响,随着 I_n 的增大愈来愈严重。这就造成 I_a 的计算结果严重失真。

改变公式:

将公式
$$I_n + 5I_{n-1} = \frac{1}{n}$$
 变为
$$I_{k-1} = \frac{1}{5K} - \frac{1}{5}I_K \qquad (K = n, n-1, \dots, 1) \qquad (E4-2)$$
 且 $\frac{1}{6(n+1)} < I_n < \frac{1}{5(n+1)}$
$$I_9 = \frac{1}{2}(\frac{1}{6*10} + \frac{1}{5*10})$$

可求得 /₉ ≈ 0.018, 按公式 (E4-2) 可逐次求得

$$I_8 \approx 0.019$$

$$I_7 \approx 0.021$$

$$I_6 \approx 0.024$$

$$I_{\rm s} \approx 0.028$$

$$I_{4} \approx 0.034$$

$$I_3 \approx 0.043$$

$$I_2 \approx 0.058$$

$$I_1 \approx 0.088$$

$$I_0 \approx 0.182$$

稳定的算法!

如果第(n+1)步的误差 e_{n+1} 与第n步的误差 e_n 满足:

$$\left|\frac{e_{n+1}}{e_n}\right| \leq 1$$

则称此计算公式是绝对稳定的。

在我们今后的讨论中,误差将不可回避,

算法的稳定性会是一个非常重要的话题。

2. 尽量避免两相近数相减

在数值计算中,两个相近的数作减法时有效数字会损失。 例5: 求

$$y = \sqrt{x+1} - \sqrt{x}$$
 (E5-1)

的值。当x = 1000, y的近似值为0.01580744

1、直接相减

$$y = \sqrt{1001} - \sqrt{1000} = 31.64 - 31.62 = 0.02$$

2、将 (E5-1) 改写为

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

$$y = 0.01581$$

类似地

$$\ln x - \ln y = \ln \frac{x}{y}$$

$$\sin(x + \varepsilon) - \sin x = 2\cos\left(x + \frac{\varepsilon}{2}\right)\sin\frac{\varepsilon}{2}$$

3. 绝对值太小的数不宜作除数

绝对值太大的数不宜作乘数

例6:

$$\frac{2.7182}{0.001} \approx 2718.2$$

如分母变为0.0011,也即分母只有0.0001的变化时

$$\frac{2.7182}{0.0011} \approx 2471.1$$

4. 避免大数吃小数

例7: 用单精度计算 $x^2 - (10^9 + 1)x + 10^9 = 0$ 的根。

精确解为 $x_1 = 10^9$, $x_2 = 1$

黛 算法1: 利用求根公式 $x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$

在计算机内, 10^9 存为 0.1×10^{10} ,1存为 0.1×10^{1} 。做加法时,两加数的指数先向大指数对齐,再将浮点部分相加。即1的指数部分须变为 10^{10} ,则: $1=0.0000000001\times10^{10}$,取单精度时就成为:

 $10^9 + 1 = 0.10000000 \times 10^{10} + 0.000000000 \times 10^{10} = 0.100000000 \times 10^{10}$

$$\Rightarrow x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = 10^9, \quad x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = 0$$

算法2: 先解出
$$x_1 = \frac{-b - sign(b) \cdot \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = 10^9$$

再利用
$$x_1 \cdot x_2 = \frac{c}{a} \implies x_2 = \frac{c}{a \cdot x_1} = \frac{10^9}{10^9} = 1$$

注: 求和时从小到大相加, 可使和的误差减小。

5. 简化计算,减少步骤,避免误差积累。

计算x31的值,若逐个相乘,那么要做30次乘法。注意到:

$$x^{31} = xx^2x^4x^8x^{16}$$

若令:
$$x^2=xx$$
, $x^4=x^2x^2$, $x^8=x^4x^4$, $x^{16}=x^8x^8$

则只要作8次乘法运算就可以了。

进一步,若按照 $x^{31}=\frac{x^{16}x^{16}}{x}$,则只需要做6次乘除法。

递推性算法

计算机上使用的算法常采用递推化的形式,递推 化的基本思想是把一个复杂的计算过程归结为简单过程 的多次重复。这种重复在程序上表现为循环。递推化的 优点是简化结构和节省计算量。

多项式求值:给定的x求下列n次多项式的值。

$$P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n$$

解: 1. 用一般算法, 即直接求和法;

2. 秦九韶方法;

N次加法 N次乘法 N次加法 N(N+1)/2 次乘法

例9: 用秦九韶方法求多项式

$$f(x) = 2 + x - x^2 + 3x^4$$

在x = 2的值。

解:

习题

1、若近似数X具有n位有效数字,且表示为

$$x = \pm (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + a_3 \times 10^{-2} + ... + a_n \times 10^{-(n-1)}) \times 10^m$$

证明其相对误差限为

$$\varepsilon_r \le 0.5 / a_1 \times 10^{-(n-1)}$$

2、求下列各近似数的误差限,其中

(1)
$$x_1 + x_2 + x_3$$
 $x_1 = 4.8675$

$$(2) x_1 x_2 \qquad x_2 = 4.08675$$

$$(3) x_1 / x_2 \qquad x_3 = 0.08675$$

习题

3、设y₀=28, 按递推公式

$$y_n = y_{n-1} - \frac{1}{100} \sqrt{783}$$

若取 $\sqrt{783} \approx 27.982$ (5位有效数字)

问计算到y₁₀₀有多大误差?

- 4、设序列 $\{y_n\}$ 满足下面的递推关系,取 $y_0 \approx 1.73$
- ,则y₁₀₀的绝对误差有多大?

$$\begin{cases} y_n = 5y_{n-1} - 2\\ y_0 = \sqrt{3} \end{cases}$$

习题

5、推导出求积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{10 + x^2} dx$$
 $n = 0,1,2...,10$

的递推公式,并分析这个计算过程是否稳定;若不稳定,试构造一个稳定的递推公式。