数值分析

数学科学学院
申华 教授
huashen@uestc.edu.cn

课程概况

- 60课时，三学分
- 主要内容：

1. 背景与基础知识
2. 非线性方程求根方法
3. 解线性方程组的直接法和迭代法
4. 特征值与特征向量的计算
5. 插值与数据拟合
6. 数值微分与数值积分
7. 常微分方程数值解法

课程概况

- 目标：

1. 理解并掌握经典算法的核心思想和理论
2. 编程实现算法的能力
3. 设计、分析算法的能力

- 先修课程：

微积分、线性代数、任一程序设计语（C/C++/Fortran/Python/Matlab）

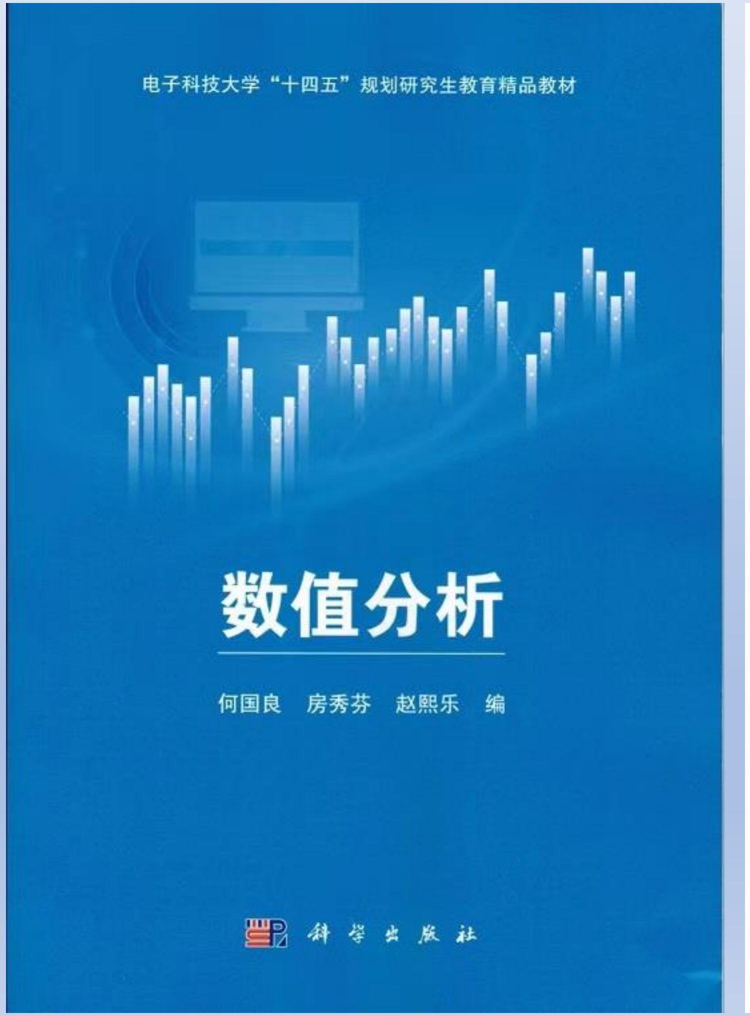
- 考核方式：

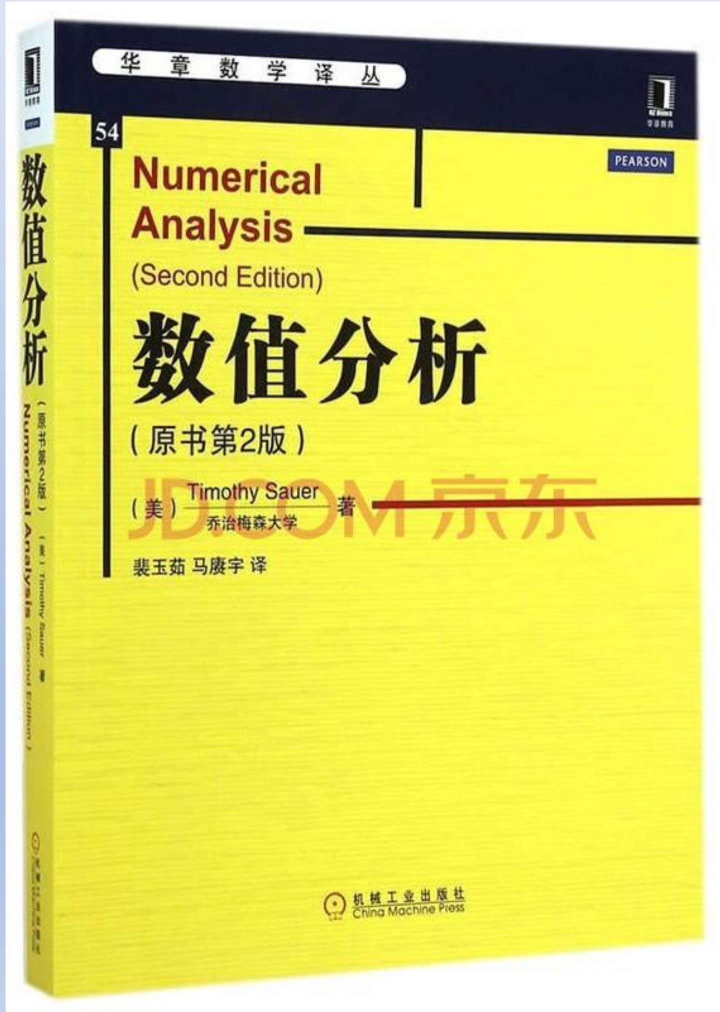
平时成绩占50%（课题、作业等；作业抄袭一次总成绩扣15分）

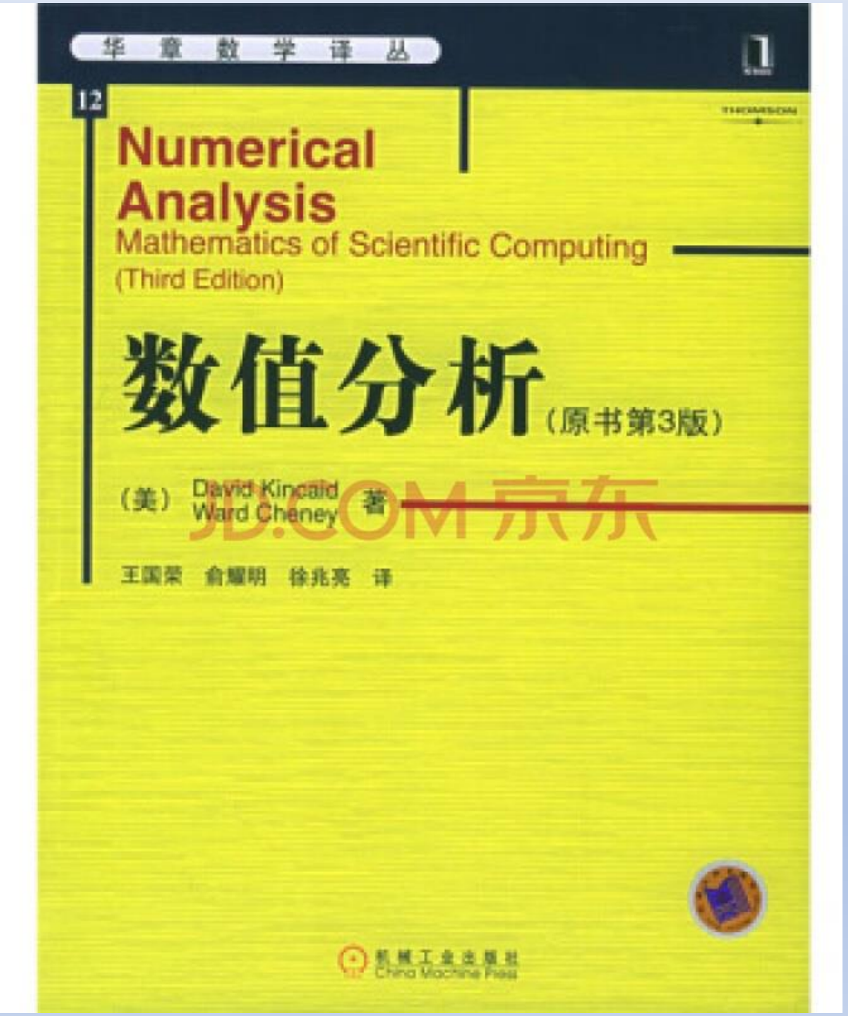
期末考试（闭卷）成绩占50%。

课程概况

- 教材与参考书


电子科技大学“十四五”规划研究生教育精品教材
数值分析
何国良 房秀芬 赵熙乐 编
科学出版社


华章数学译丛
54
Numerical Analysis
(Second Edition)
PEARSON
数值分析
（原书第2版）
（美）Timothy Sauer 著
乔治梅森大学
裴玉茹 马赓宇 译
机械工业出版社
China Machine Press


华章数学译丛
12
Numerical Analysis
Mathematics of Scientific Computing
(Third Edition)
数值分析（原书第3版）
（美）David Kincaid Ward Cheney 著
王国荣 俞耀明 徐兆亮 译
机械工业出版社

数值分析基础

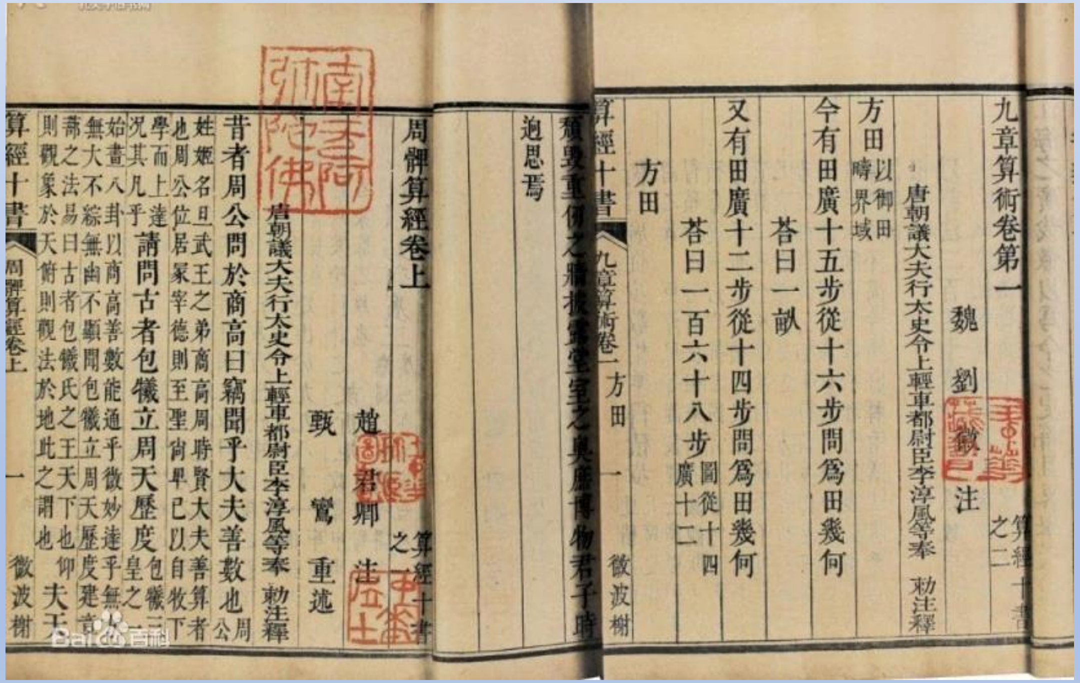
- ◆ 科学计算简介
- ◆ 误差的概念
- ◆ 计算机中数的表示
- ◆ 数值计算的基本原则
- ◆ 数值稳定性的概念

什么是科学计算？

- 科学计算是指利用计算设备(电子计算机)来解决科学和工程中的问题的一种手段。其核心研究内容是计算方法、数值分析、程序设计。
- 科学计算涉及的领域：计算数学（算法设计与理论分析）+计算机科学（硬件、软件）+X（应用方向）
- X=力学、物理、化学、生物学、金融学、工程。。。

一些历史

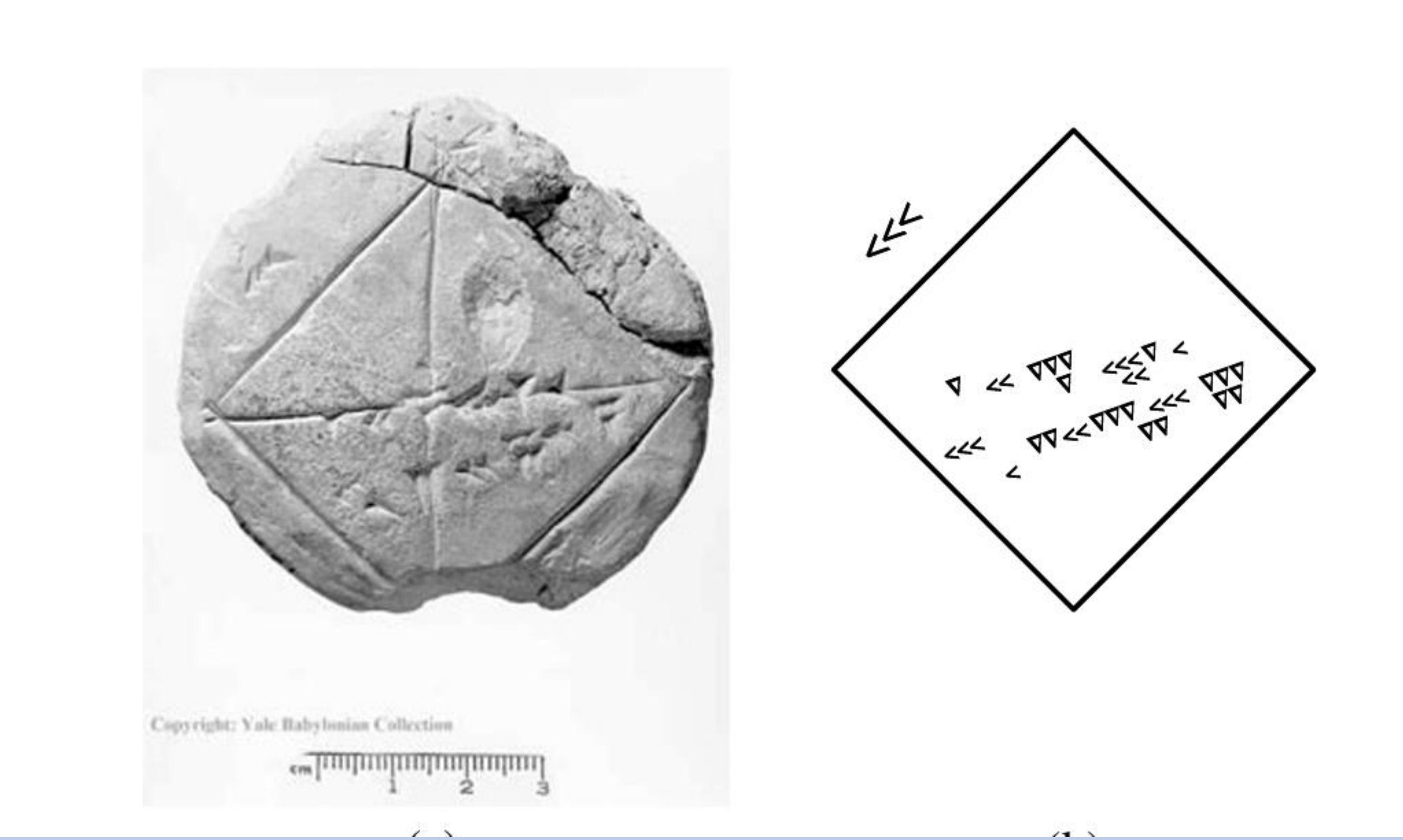
- 割圆术：割之弥细，所失弥少，割之又割，以至于不可割，则与圆周合体而无所失矣



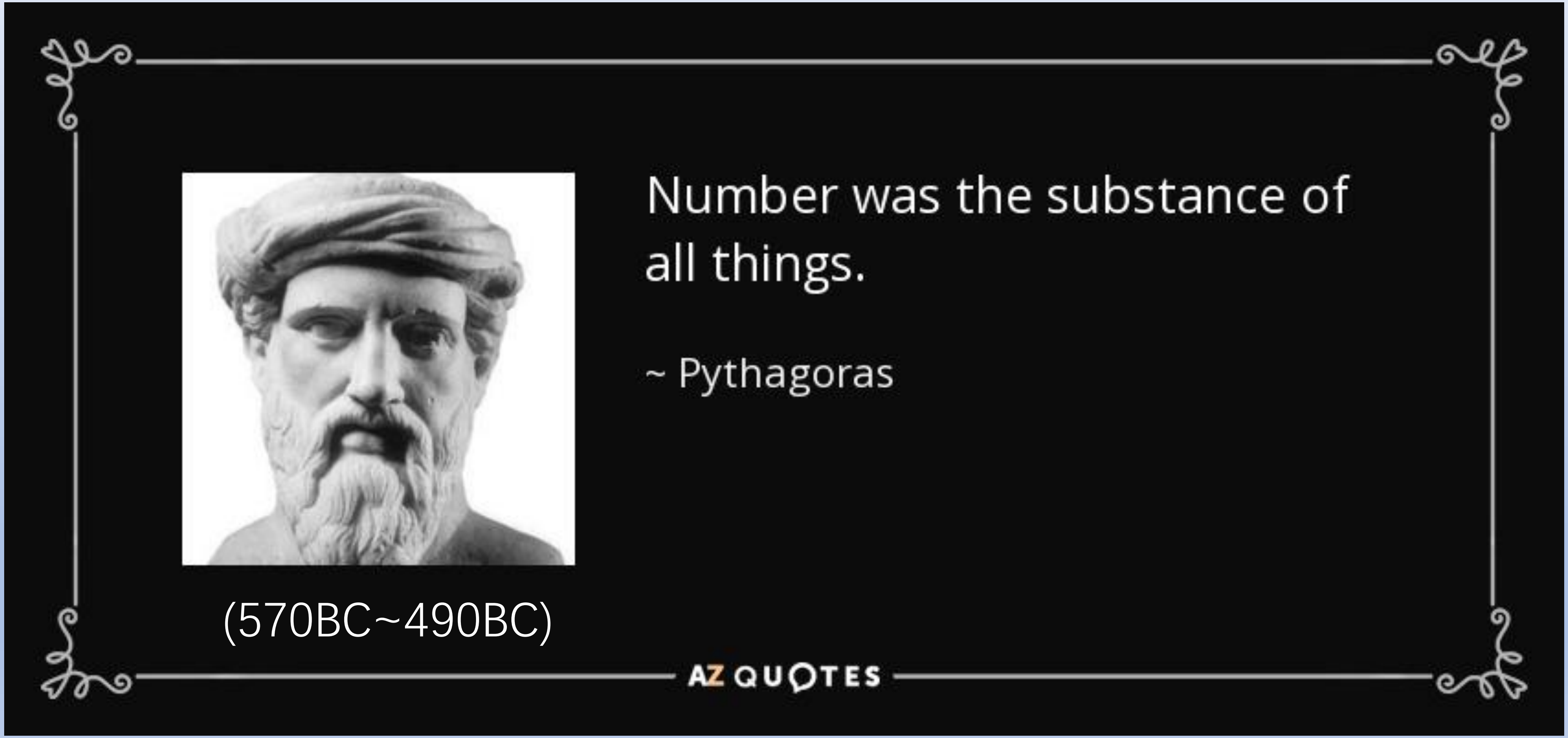
九章算术成书于约公元前150年，
刘徽注本（约225年—约295年，魏晋）

一些历史

- 巴比伦人（3500年前），求平方根



一些历史



(570BC~490BC)

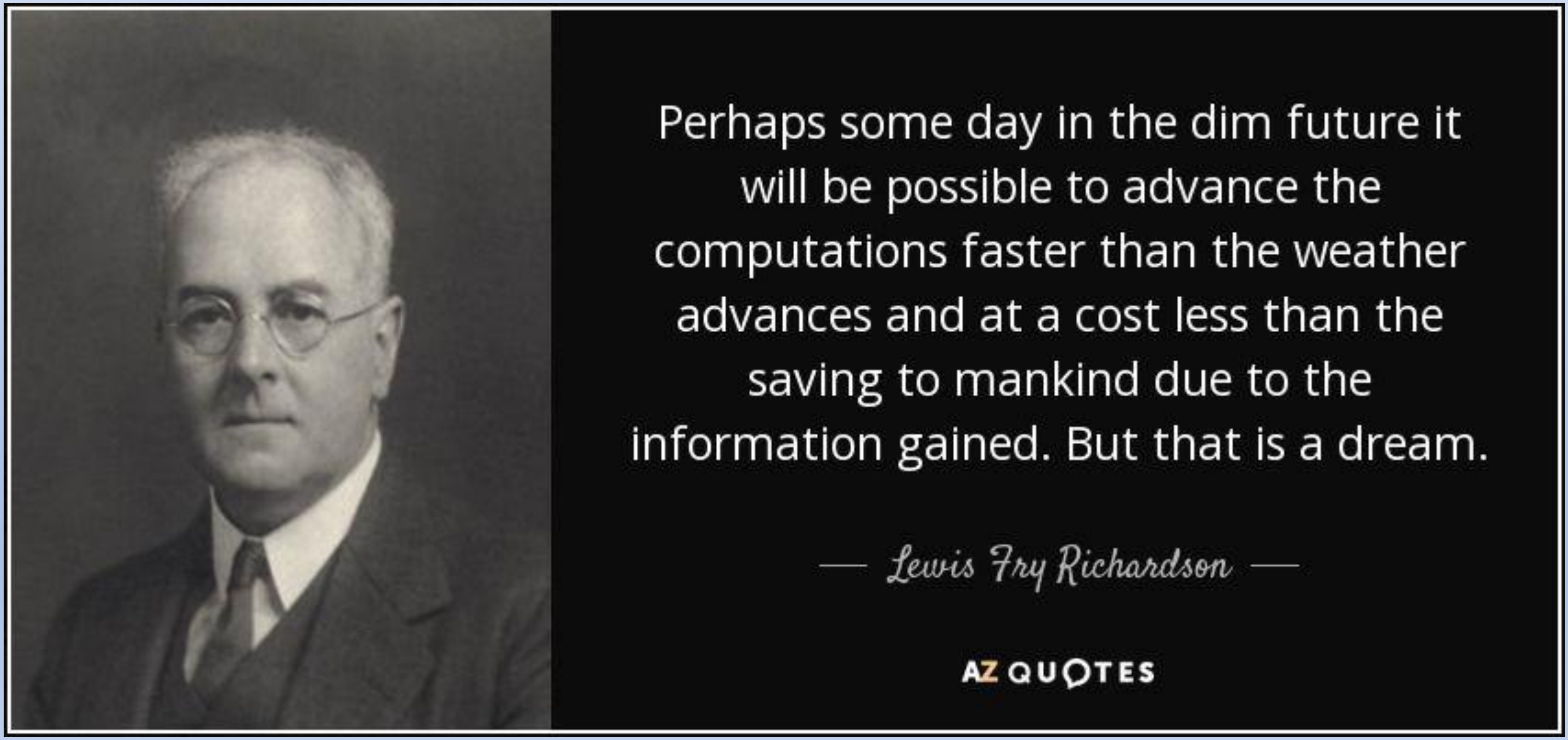
一些历史

Pierre-Simon marquis de Laplace
(1749-1827)

“拉普拉斯妖”：一个知道宇宙过去和未来所有事情的恶魔

一些历史

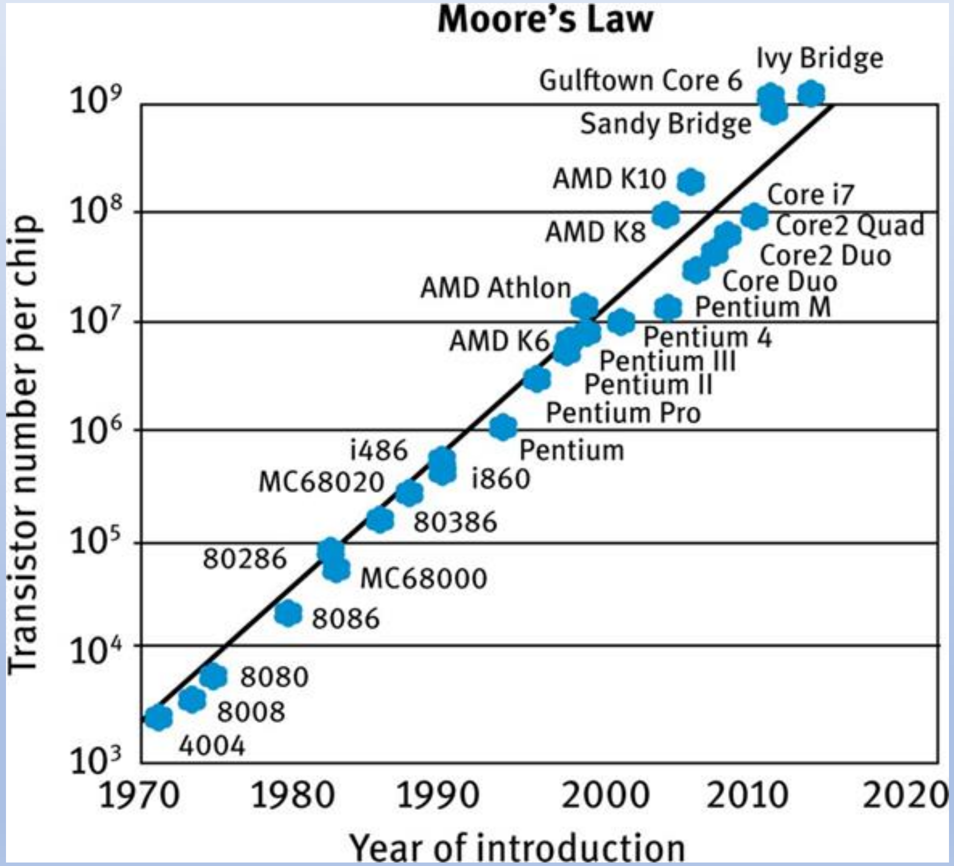
- 1910年Lewis Fry Richardson 提出一种数值方法来求解偏微分方程第一次尝试预报未来天气。（耗时三个月预测未来24小时天气，估计需要6万人才能提前预报24小时天气）



一些历史

世界首台电子计算机ENIAC(1946年)：18000个电子管，占地170平方米，重达30吨，耗电功率约150千瓦，每秒钟可进行5000次运算

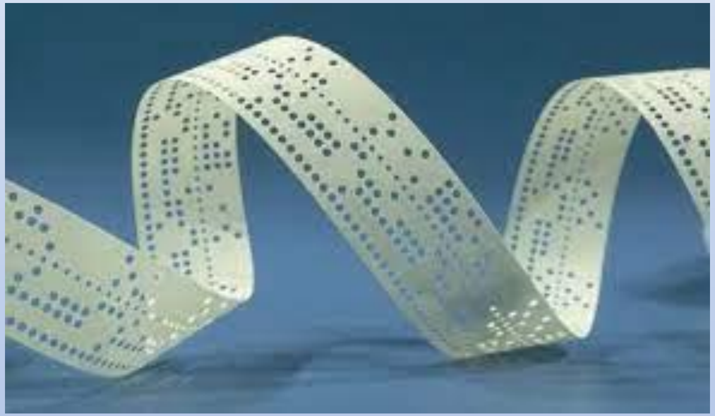
一些历史



Moore's law: the number of transistors in a dense integrated circuit (IC) doubles about every two years.

一些历史

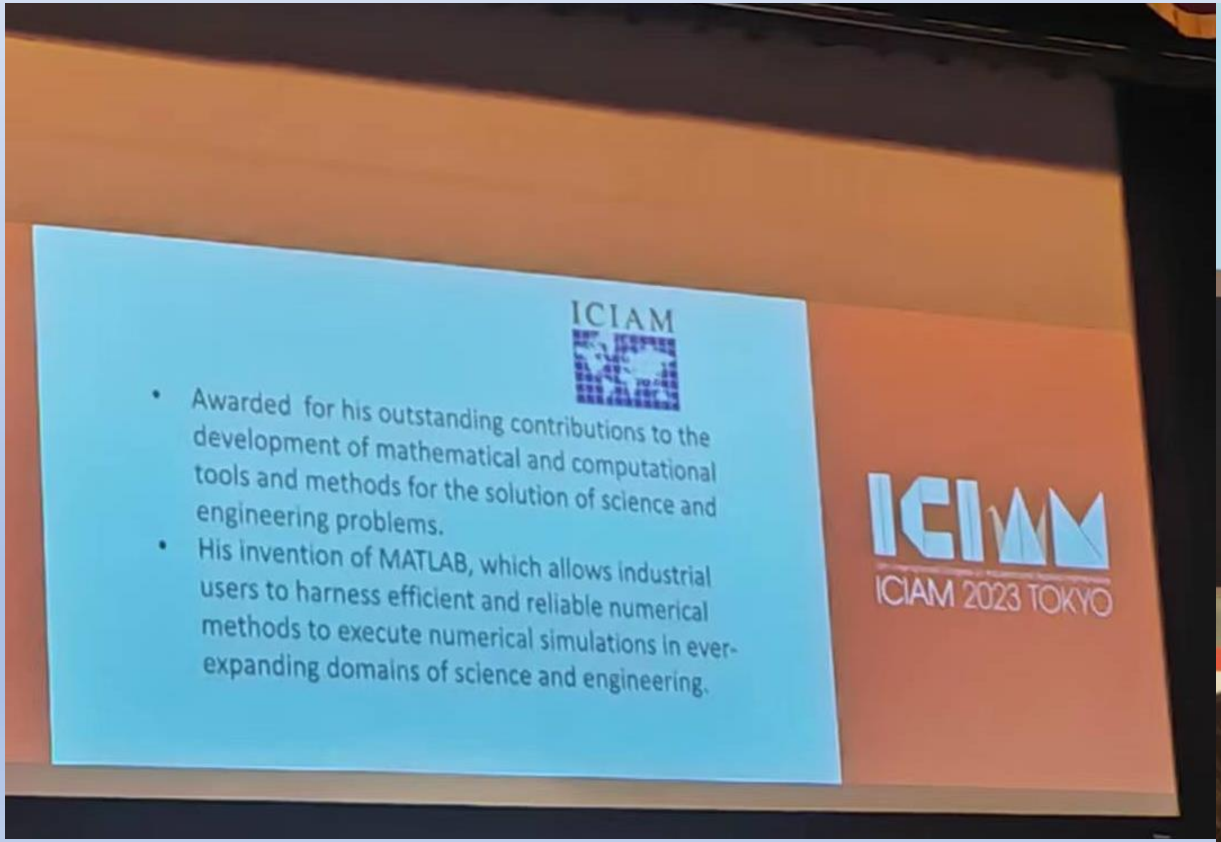
- 最早的计算机指令：打孔纸带



- FORTRAN (FORmulaTRANslator, 1950s由IBM开发) :世界上最早的计算机高级程序设计语言，广泛应用于科学和工程计算领域

一些历史

- MATLAB (MATrix LABoratory): 源于数学家Cleve Moler 1960s的博士论文



一些现状

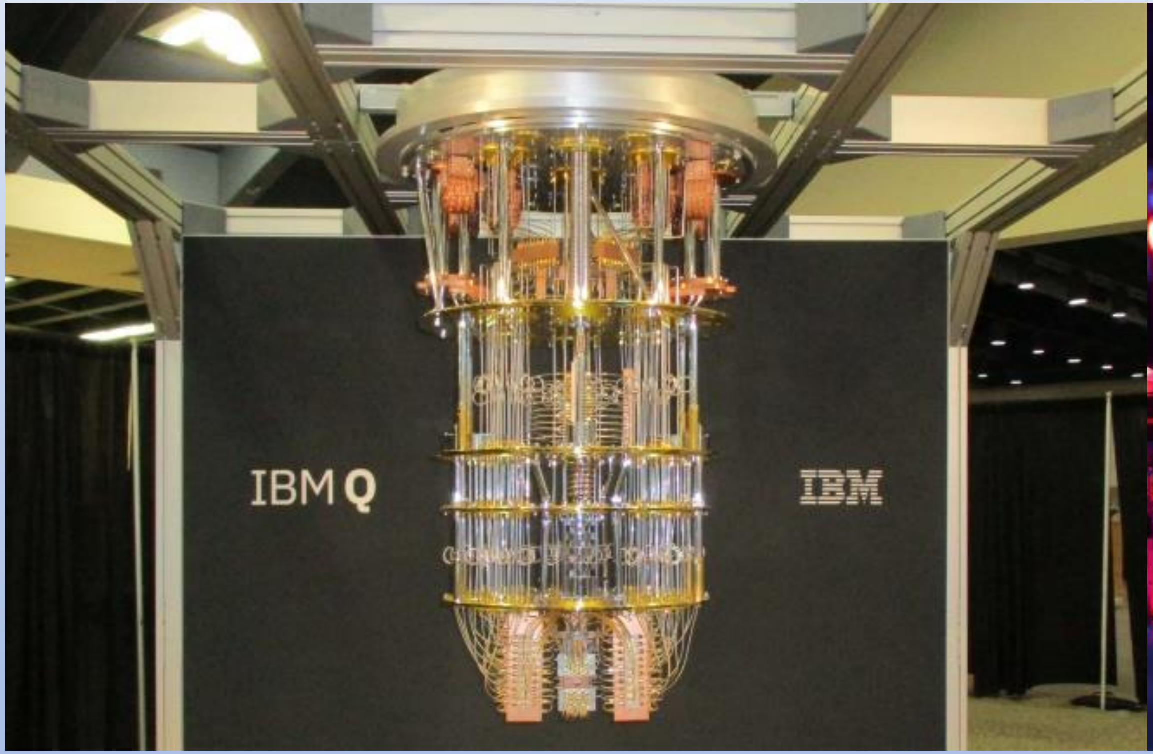
- 计算能力是国家综合实力的重要指标

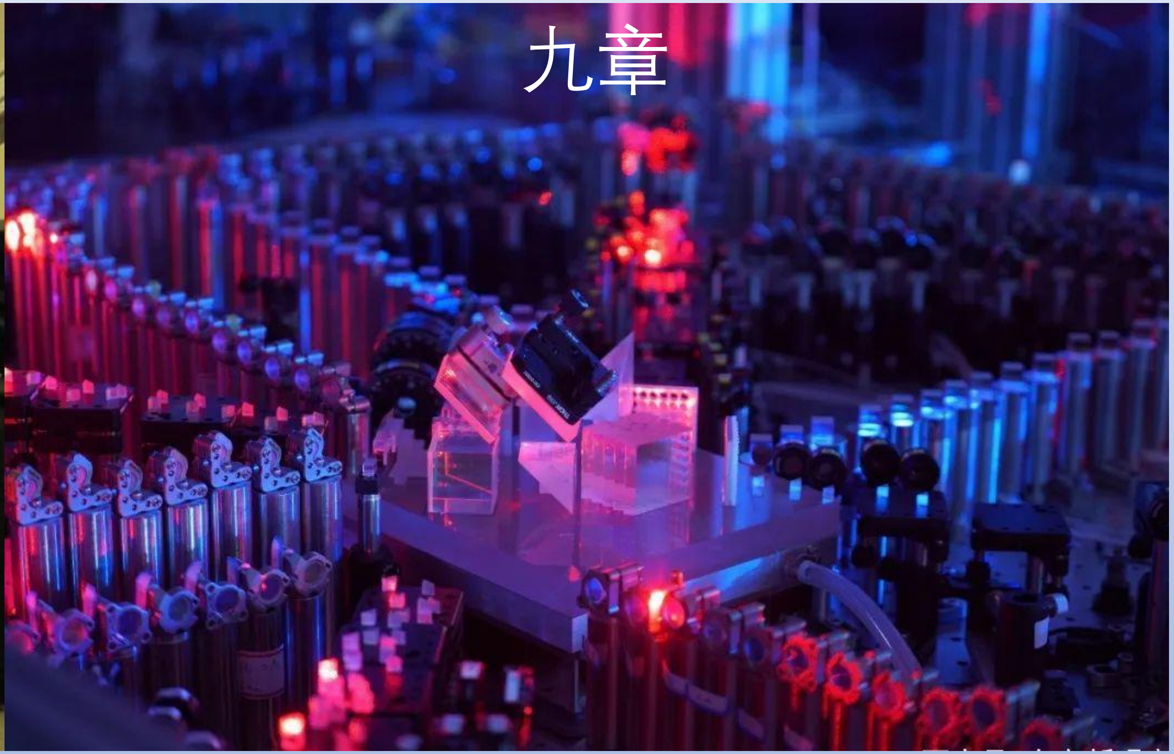
Rank	System	Cores	(PFlop/s)	(PFlop/s)	(kW)
1	**Frontier** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	8,730,112	1,102.00	1,685.65	21,100
2	**Supercomputer Fugaku** - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442.01	537.21	29,899
3	**LUMI** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE EuroHPC/CSC Finland	2,220,288	309.10	428.70	6,016
4	**Leonardo** - BullSequana XH2000, Xeon Platinum 8358 32C 2.6GHz, NVIDIA A100 SXM4 64 GB, Quad-rail NVIDIA HDR100 Infiniband, Atos EuroHPC/CINECA Italy	1,463,616	174.70	255.75	5,610
5	**Summit** - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148.60	200.79	10,096

2022年11月/2023年6月（TOP500 List）

2016年6月-2017年11月，排名第1
2023年6月，排名第7

一些现状





- 量子计算机成为第四次工业革命引擎？

一些现状

- 大型商业软件、开源代码

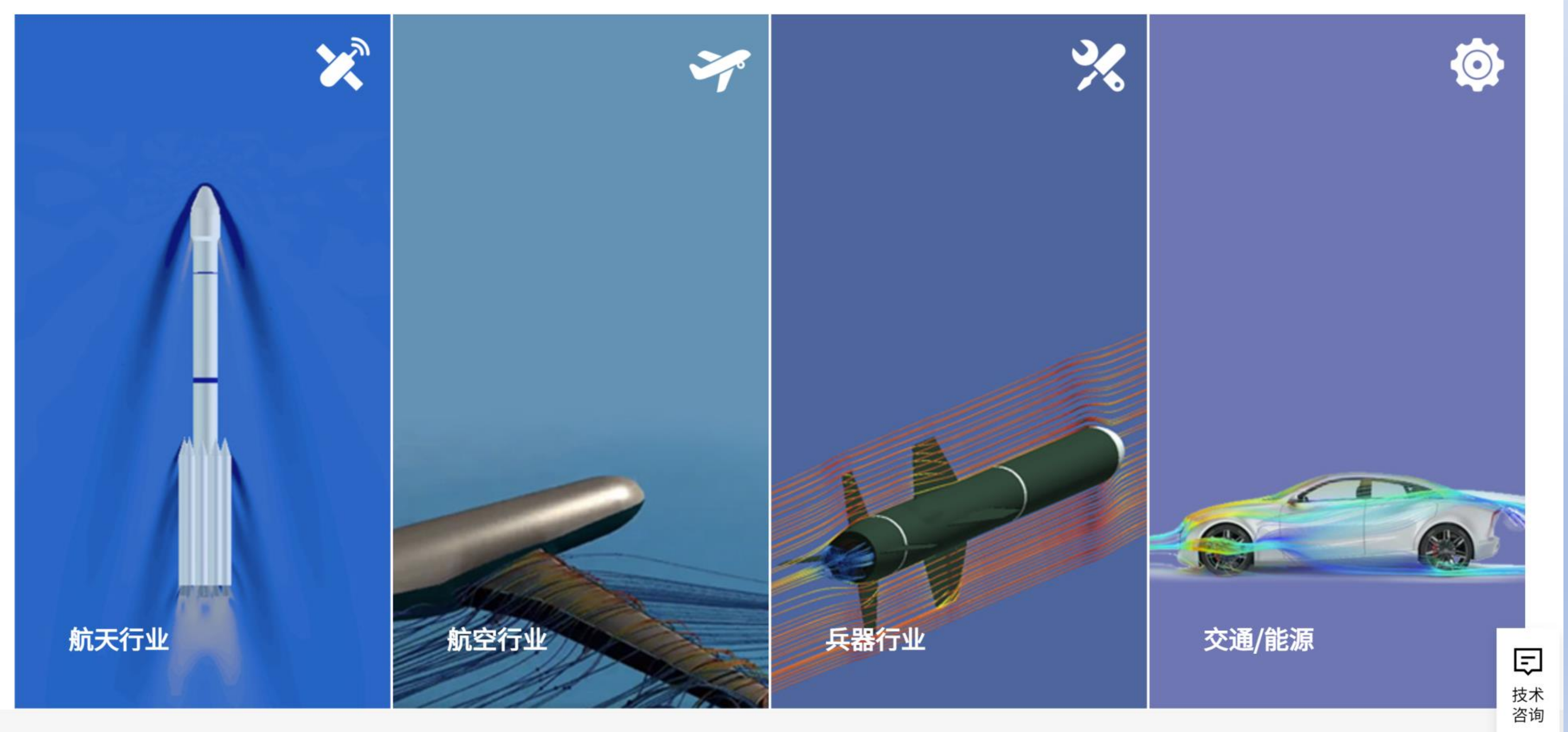
一些现状

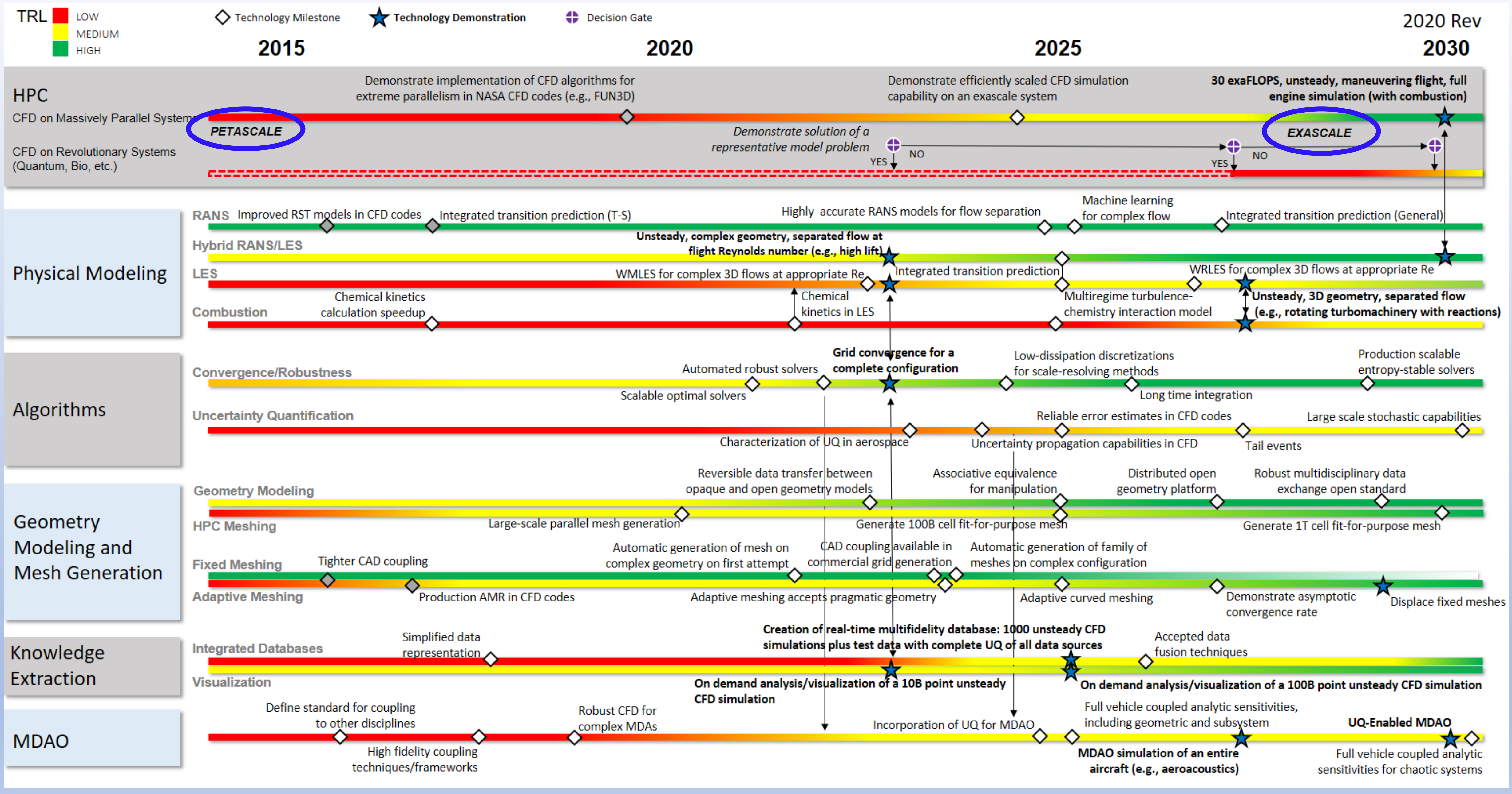
- 国产替代：通用科学计算软件https://www.baltamatica.com/

北太天元

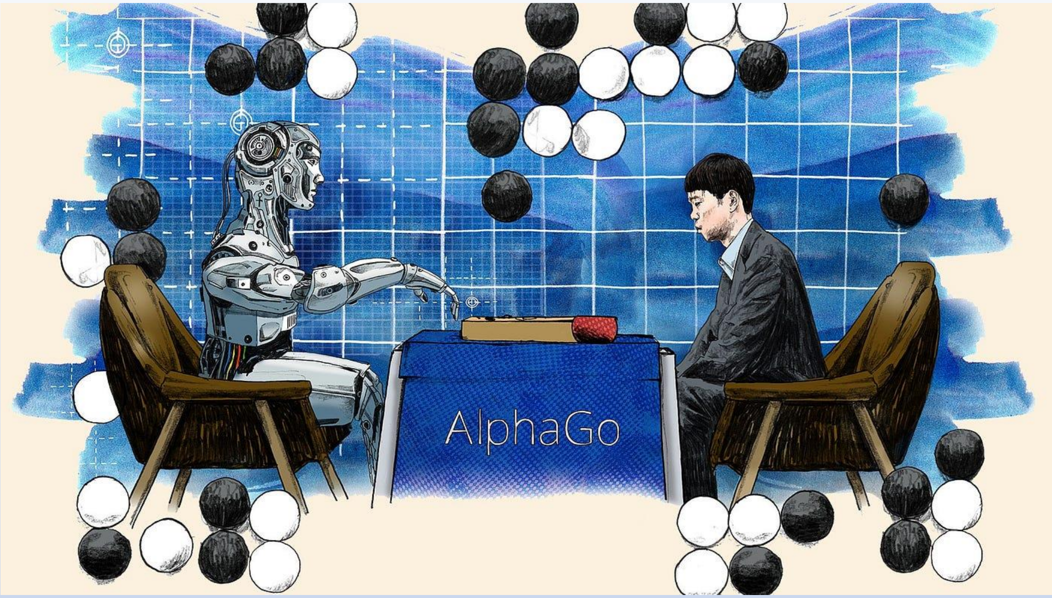
一些现状

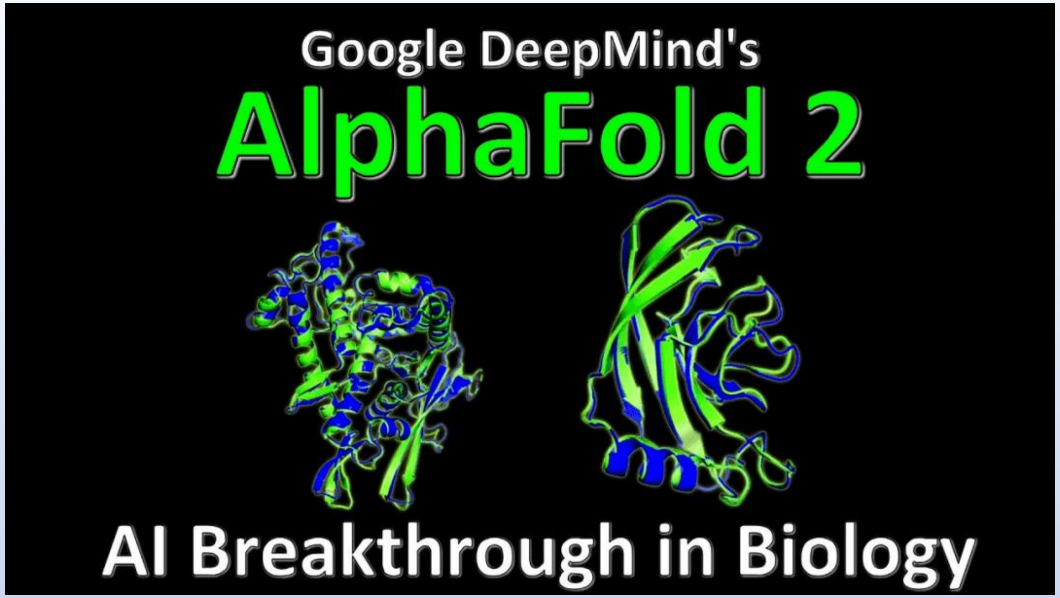
- 国产替代：国家数值风洞http://www.cardc.cn/nnw/



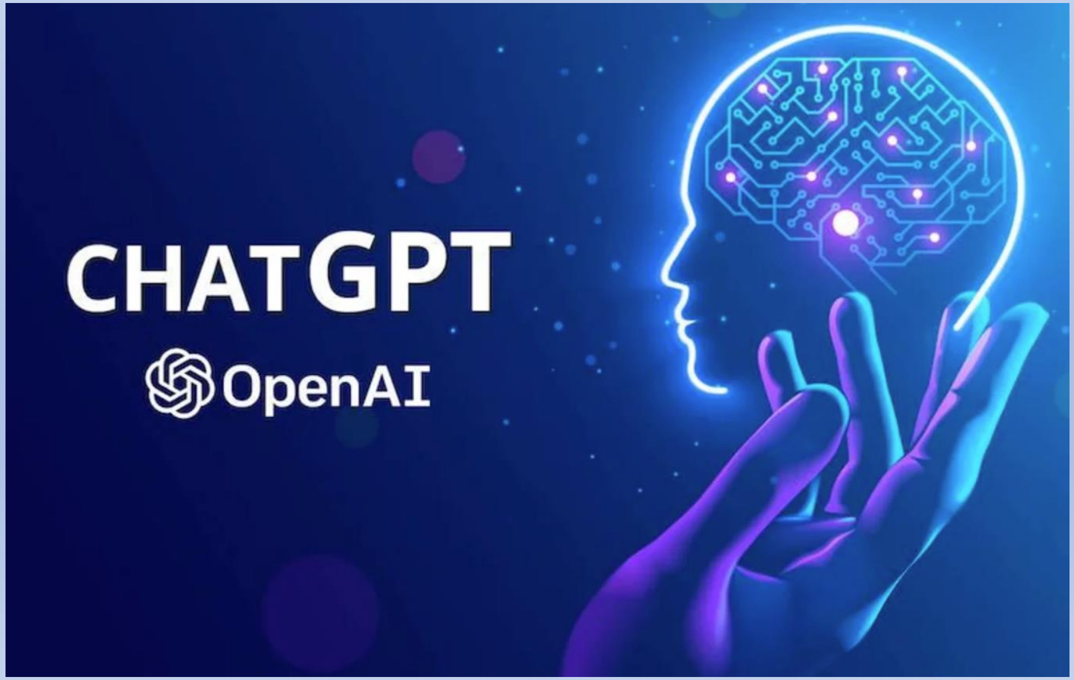


AIAA CFD Vision 2030



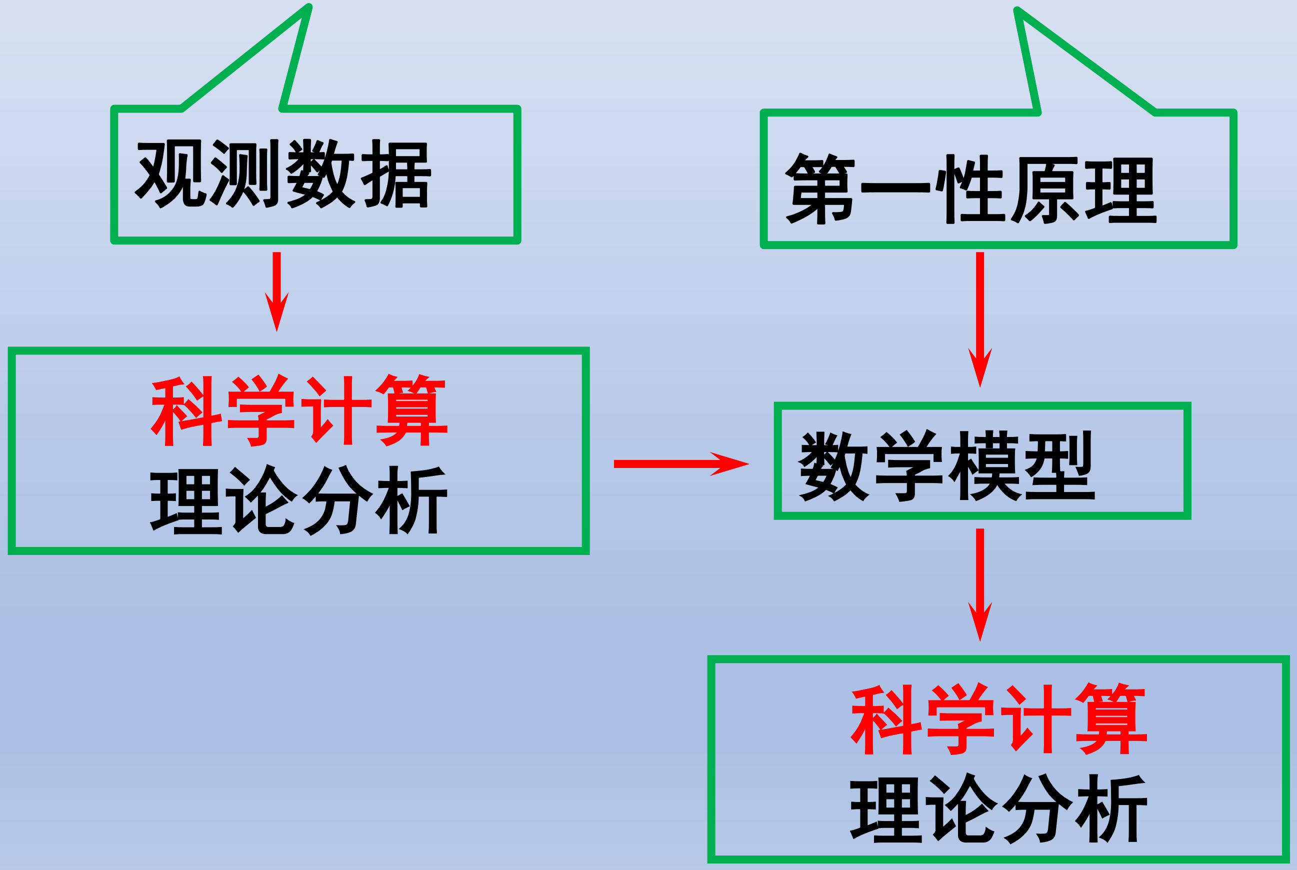


Google, Deep Mind



科学计算的重要性

- Ever since the time of Newton, there have been two different paradigms for doing scientific research: the **Keplerian paradigm** and the **Newtonian paradigm**.(Weinan E)



科学计算的重要性

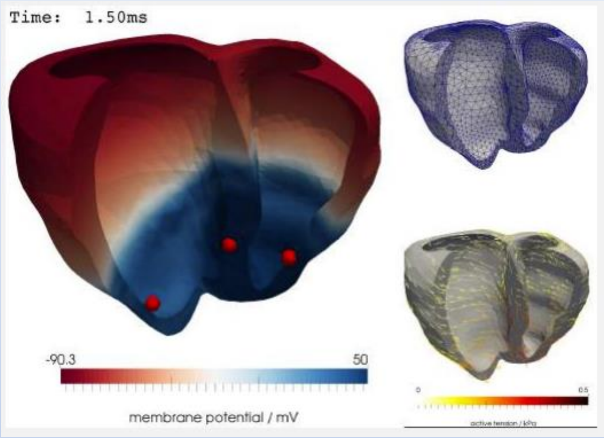
- “实验、理论、计算已成为科学方法上相辅相成的而又相对独立，可以相互补充替代而又彼此不可缺少的三个主要环节”–冯康
- 实际问题的特点：复杂、规模大；实验费用高、耗时长、可观测数据有限；有些问题不能进行实验（如核爆被禁止）
- 计算的天然优势：费用相对较低、可重复性强、不受问题的极端条件限制

科学计算的重要性

- Without understanding gained from CFD there would not have been a 737-300 program! (Walt Gillete, Manager 737 Aerodynamics, Vice President, 787 Engineering)

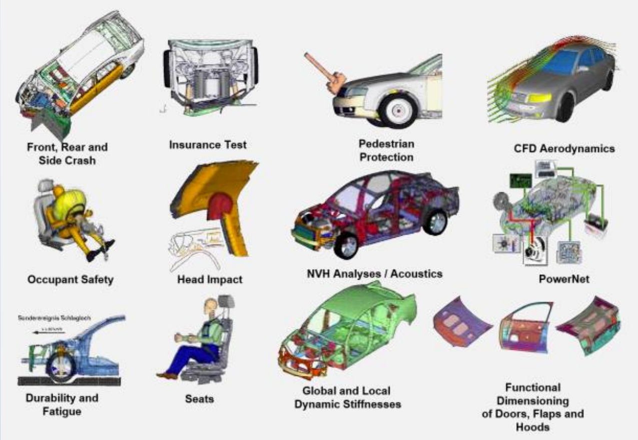
CFD在波音787设计中的贡献

科学计算的重要性

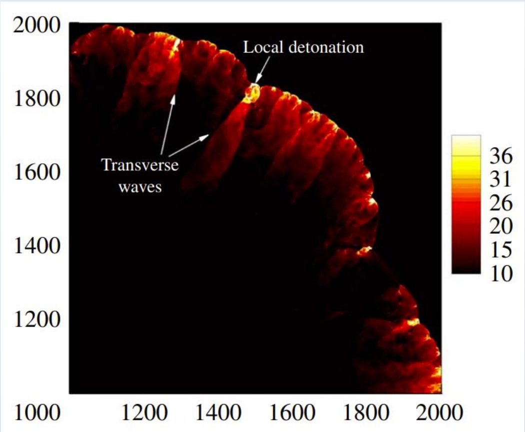


心脏模拟

动画特效

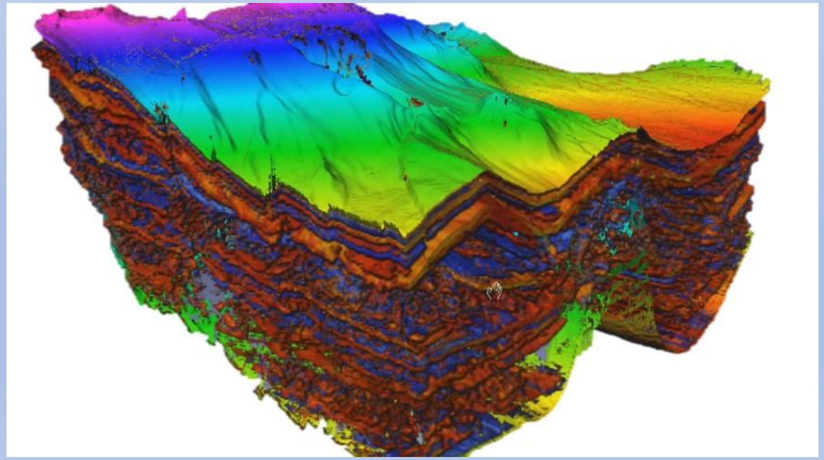


汽车设计

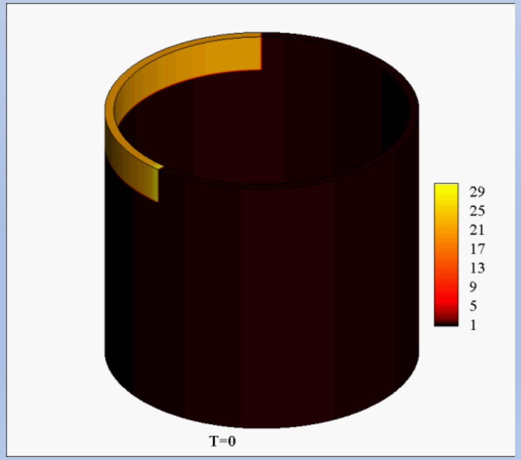


爆炸模拟

城市设计



油藏模拟



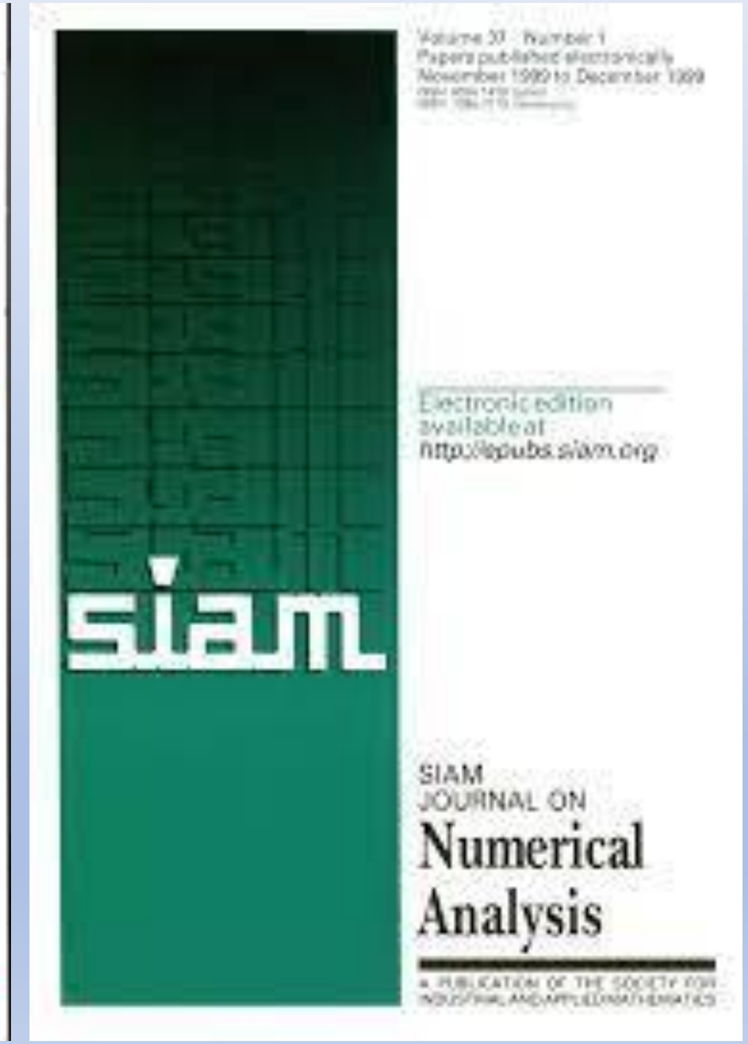
发动机模拟

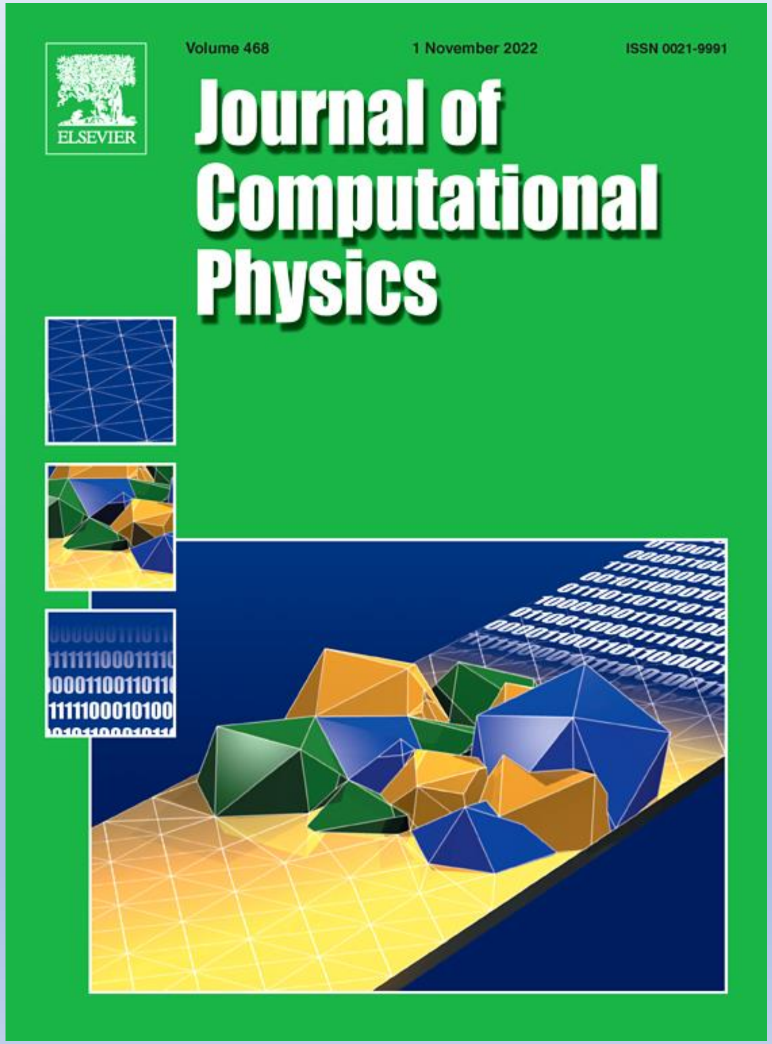
科学计算的重要性

- 1983年一个由美国著名数学家拉克斯(P. Lax)为首的不同学科的专家委员会向美国政府提出的报告之中，强调“**科学计算是关系到国家安全、经济发展和科技进步的关键性环节，是事关国家命脉的大事**。”
- 1987年起美国NSF把“科学与工程计算”、“生物工程”“全局性科学”作为三大**优先资助**的领域。
- 80年代中期我国将“大规模科学与工程计算”列入国家资助**重大项目**。

科学计算的重要性


Volume 34 Number 3
SIAM JOURNAL ON
Scientific Computing
scientific computation
new algorithms
aspects of scientific computation
statistical considerations
computational methods
applications in engineering
high-performance
new algorithms
applications in science
mathematical software
experimental and observational data
scientific computation
siam
high-performance
large-scale problems
applications in science
statistical considerations
mathematical software
applications in engineering
computational methods
mathematical software
Articles originally published online
May 2012 to June 2012
Electronic edition available at
http://epubs.siam.org


siam
Electronic edition available at
http://epubs.siam.org
SIAM
JOURNAL ON
Numerical
Analysis


Volume 468
1 November 2022
ISSN 0021-9991
ELSEVIER
Journal of
Computational
Physics

数值分析的重要性

- As machines become more powerful, the efficiency of algorithms grows more important, not less. （L.N. Trefethen）
  - 误差多大？
  - 收敛？收敛速度？
  - 解是否稳定？
  - 计算效率？
  - 是否能大规模化（充分利用计算设备算力）？

误差定义

- 假设某一数据的准确值为 x^*, 其近似值为 x
  - ➢绝对误差：$e(x) = x - x^*$
  - ➢相对误差：$e_r(x) = \frac{x-x^*}{x^*}$，$x^* \neq 0$
  - ➢绝对误差限ε：$|e(x)| = |x - x^*| \leq \varepsilon$
  - ➢相对误差限ε_r：$|e_r(x)| = \left|\frac{x-x^*}{x^*}\right| \leq \varepsilon_r$

误差的基本运算

- $e(x \pm y) = e(x) \pm e(y)$，相近的数相减相对误差增大
- $e(xy) = ye(x) + x^* e(y)$
- $e\left(\frac{x}{y}\right) = \frac{ye(x) - xe(y)}{yy^*}$，小数作除数，绝对误差增大

误差的来源

- 模型误差：数学、物理模型带来的误差
- 观测误差：实验测量的误差
- 方法误差：求解数学模型时，用简单代替复杂, 或者用有限过程代替无限过程所引起的误差（例：以直代曲求圆周率）
- 计算（舍入）误差：四舍五入取近似值（不可避免，计算机表示的数的位数有限）

有效数字

- 定义：当x的绝对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。

- 例：n位有效数字的十进制数 $x = 0.a_1a_2 \ldots a_n \times 10^m$的绝对误差限？

- 例：圆周率$\pi = 3.1415926 \ldots$

3.14有效数字为？

0.00314×10^3有效数字为？

3. 91415926有效数字为？

有效数字

- 例：已知$\sqrt{30}$的十进制浮点数第一位是5，要使近似值的相对误差限小于0.1%，问浮点数的有效数字的位数至少应该为多少？

$$|e_r(x)| < \frac{0.5 \times 10^{-(n-1)}}{5} = 10^{-n} \le 10^{-3} \to n \ge 3$$

计算机浮点数表示

- 十进制与二进制的转换
  $$(\ldots b_2 \times 2^2 + b_1 \times 2^1 + b_0 + b_{-1} \times 2^{-1} + b_{-2} \times 2^{-2} \ldots)_{10} = (\ldots b_2 b_1 b_0 . b_{-1} b_{-2} \ldots)_2$$

- 例：$(9.4)_{10} = (?)_2$

$$(9.4)_{10} = (1001.\overline{0110})_2$$

- 例：$(0.1)_{10} = (?)_2$

$$(0.1)_{10} = (0.00\overline{0110})_2$$

- IEEE754浮点数： $x = \underbrace{\pm}_{\text{符号}} 1.\underbrace{b_1 b_2 \ldots b_n}_{\text{尾数}} \times \underbrace{2^p}_{\text{指数}}$

机器数形式：$s e_1 e_2 \ldots e_m b_1 b_2 \ldots b_n \qquad s = 0: +$

指数偏差: $Bias = 2^{m-1} - 1, p = (e_1 e_2 \ldots e_m)_2 - Bias$

精度	符号位	指数位	尾数位	总占位	指数偏差	指数范围	总范围
单精度	1	8	23	32	127	[−126, 127]	$-3.4 \times 10^{38} \sim 3.4 \times 10^{38}$
双精度	1	11	52	64	1023	[−1022, 1023]	$-1.7 \times 10^{308} \sim 1.7 \times 10^{308}$
长双精度	1	15	64	80	16383	[−16382, 16383]	$-1.1 \times 10^{4932} \sim 1.1 \times 10^{4932}$

IEEE754不同精度的浮点数

- 例：数字1的双精度机器数形式？

$$1 = +1.\underbrace{0000000000000000000000000000000000000000000000000000}_{52\text{个}0} \times 2^0$$

0	01111111111	0000000000000000000000000000000000000000000000000000

计算机浮点数表示

- 特殊指数$(00000000000)_2$表示

$$\pm 0.b_1 b_2 \dots b_n \times 2^{-1022}$$

- 例：最小的IEEE754双精度正浮点数？

$$2^{-52} \times 2^{-1022} = 2^{-1074} \approx 2.02 \times 10^{-323}$$

0	00000000000	0000000000000000000000000000000000000000000000000001

- 特殊指数$(11111111111)_2$

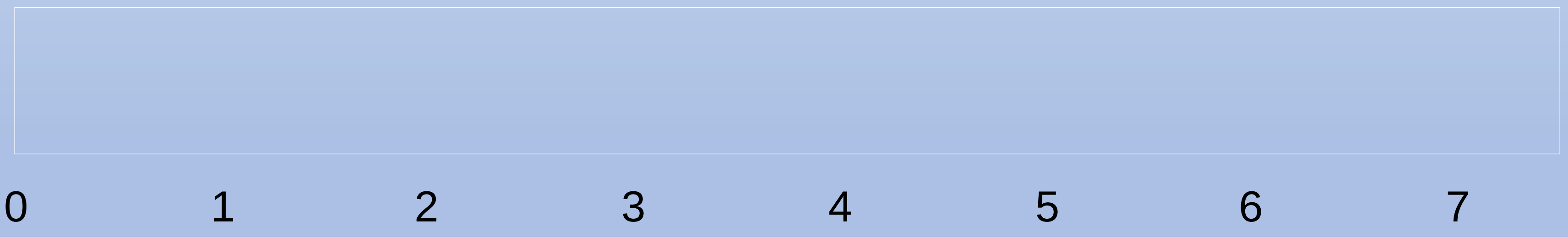
+Inf(1/0)	0	11111111111	0000000000000000000000000000000000000000000000000000
-Inf(-1/0)	1	11111111111	0000000000000000000000000000000000000000000000000000
NaN	1	11111111111	非全0

计算机浮点数表示

- 定义：机器精度ε_{mach}是1和比1大的最小浮点数之间的距离。 n位尾数的IEEE754浮点数$\varepsilon_{mach}=2^{-n}$
- 例：IEEE754双精度浮点数的机器精度

$$\varepsilon_{mach}=2^{-52}\approx 2.22\times 10^{-16}$$

- 例：二进制系统$b_0.b_1b_2\times 2^p$ （ $-1\le p\le 2$）的分布



计算机浮点数表示

- IEEE舍入的最近法则（双精度）：

1、第53位尾数为0，则在第52位之后截断（舍去）

2、第53位尾数位1，53位之后非全零，则在第52位加1（进位）

3、第53位尾数位1，53位之后全零，依据使第52位等于0选择舍去或者进位

- IEEE舍入法则的绝对误差限和相对误差限为?
- 例：9. 4的双精度浮点数的绝对误差及相对误差？

$$9.4=(1001.\overline{0110})_2$$

$$=1.001011001100110011001100110011001100110011001100110\overline{0110}\times 2^3$$

$$\mathrm{fl}(9.4)=1.0010110011001100110011001100110011001100110011001101\times 2^3$$

$$=9.4-(\overline{0.0110})_2\times 2^{-51}\times 2^3+2^{-52}\times 2^3=9.4+(1-0.8)\times 2^{-49}$$

$$e_r=\left|\frac{\mathrm{fl}(9.4)-9.4}{9.4}\right|=\frac{0.2\times 2^{-49}}{9.4}=\frac{8}{47}\times 2^{-52}$$

计算机浮点数表示

- 浮点数加法：对齐小数点位➞高精度加法寄存器➞舍入回相应精度
- 例：双精度$1+2^{-53}$

$$
\begin{aligned}
&1.000...000\times 2^{0}+1.000...000\times 2^{-53}\\
&=1.000...000\quad\times 2^{0}\\
&+0.000...0001\times 2^{0}\\
&=1.000...0001\times 2^{0}\\
&=1.000...000\times 2^{0}
\end{aligned}
$$

例：双精度$9.4-9-0.4$

$$\mathrm{fl}(9.4)-\mathrm{fl}(9)-\mathrm{fl}(0.4)=0.2\times 2^{-49}-0.1\times 2^{-52}=3\times 2^{-53}$$

计算机浮点数表示

- 计算机实验（C语言）

```c
int main()
{
    int k;
    double a,b,c;
    a=9.4;
    b=9;
    c=0.4;
    a=a-b-c;
    b=3*pow(2,-53);
    printf("a=%e\nb=%e\n",a,b);
    return 1;
}
```

C:\Users\huash\Documents\UESTC\教学\科学计算\程序\add\add.exe

```
a=3.330669e-016
b=3.330669e-016

Process returned 1 (0x1)   execution time : 0.029 s
Press any key to continue.
```

数值计算的基本原则

- 避免绝对值小的数做除数

例：$6/0.001 = 6000$　　　　$6/0.0012 = 5000$

- 防止大数“吃”小数

例：8位浮点数系统：$1.0000000\ \times 10^9 + \ 0.0000000\cancel{09}\ \times 10^9$

- 避免相近的数相减

例：方程$x^2 - 16x + 1 = 0$的根$x_1\ = 8 - \sqrt{63}$ =0. 0627460668⋯

取$\sqrt{63} \approx 7.937$，　$x_1\ = 8 - \sqrt{63} = 0.063$

$$x_1\ = \frac{1}{8 + \sqrt{63}} = 0.062747$$

数值计算的基本原则

- 尽量减少计算工作量(乘、除法次数)

多项式计算$P(x) = 1 + 2x + 3x^2 \; +4x^3 \; +5x^4$

秦九韶（1208—1268年）算法

$P(x) = 1 + x(2 + x(3 \; +x(4 + 5x)))$

应用：二进制转十进制、幂级数计算等。

数值计算的基本原则

- 计算机实验（C语言）

```
int main()
{
    int k;
    double x=2,y;
    clock_t start,finish;
    start=clock();
    for(k=0;k<1E9;k++)
    {
        y=1+2*x+3*x*x+4*x*x*x+5*x*x*x*x;
    }
    finish=clock();
    printf("Computational time=%fs\n",(double)(finish-start)/CLOCKS_PER_SEC);

    start=clock();
    for(k=0;k<1E9;k++)
    {
        y=1+x*(x*(x*(5*x+4)+3)+2);
    }
    finish=clock();
    printf("Optimized computational time=%fs\n",(double)(finish-start)/CLOCKS_PER_SEC);
    return 1;
}
```

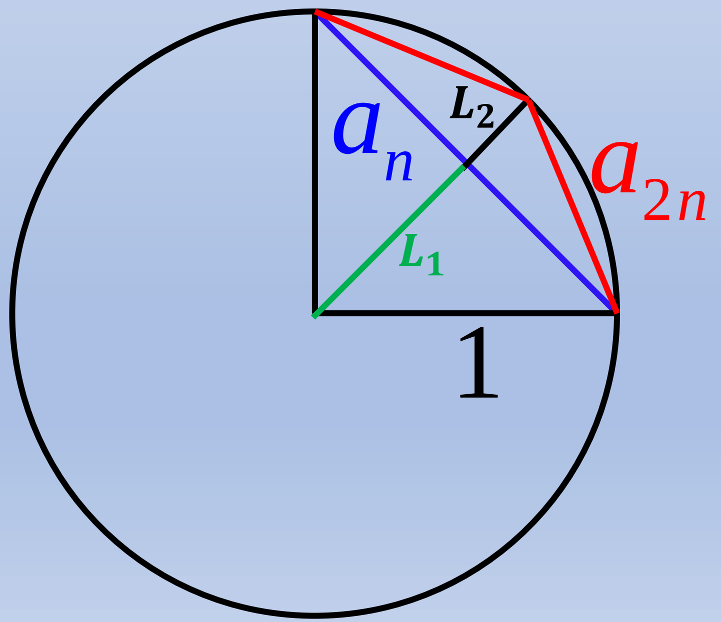
C:\Users\huash\Documents\UESTC\教学\科学计算\程序\polynomial\ploly

```
Computational time=1.959000s
Optimized computational time=1.745000s

Process returned 1 (0x1)   execution time : 3.776 s
Press any key to continue.
```

数值计算的基本原则

- 速度与精度是重要指标
- 割圆术，刘徽，徽率3.1416（3072边形）
- 祖冲之3.1415926~3.1415927，355/113~22/7（相当于16000边形的精度，世界领先一千年，目前的计算已经超过100万亿位）



$$a_{2n} = \sqrt{2 - \sqrt{4 - a_n^2}}$$

$$\pi = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2} n a_n$$

数值计算的基本原则

割圆术

n	误差
6	-1.41593e-001
12	-3.57641e-002
24	-8.96404e-003
48	-2.24245e-003
96	-5.60703e-004
192	-1.40181e-004
384	-3.50457e-005
768	-8.76144e-006
1536	-2.19035e-006
3072	-5.47547e-007
6144	-1.37002e-007
12288	-3.49490e-008
24576	-8.26858e-009

外推法

$$\hat{\pi}_{2n} = \frac{4\pi_{2n} - \pi_n}{3}$$

$$\hat{\pi}_{384} - \pi = -4.69412\text{e}-010$$

数值稳定性

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

$$I_0 = ln\frac{6}{5}$$

$$I_n + 5I_{n-1} = \frac{1}{n}$$

$$I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1}$$

$$e(I_n) = (-5)^n e(I_0)$$

0	1.82322e-001
1	8.83922e-002
2	5.80389e-002
3	4.31387e-002
4	3.43063e-002
5	2.84684e-002
6	2.43249e-002
7	2.12326e-002
8	1.88369e-002
9	1.69265e-002
10	1.53676e-002
11	1.40713e-002
12	1.29766e-002
13	1.20399e-002
14	1.12289e-002
15	1.05219e-002
16	9.89032e-003
17	9.37191e-003
18	8.69602e-003
19	9.15147e-003
20	4.24264e-003
21	2.64059e-002
22	-8.65748e-002
23	4.76352e-001
24	-2.34009e+000
25	1.17405e+001
26	-5.86639e+001
27	2.93356e+002
28	-1.46675e+003
29	7.33377e+003
30	-3.66688e+004
31	1.83344e+005
32	-9.16720e+005
33	4.58360e+006
34	-2.29180e+007
35	1.14590e+008
36	-5.72950e+008
37	2.86475e+009
38	-1.43238e+010
39	7.16188e+010
40	-3.58094e+011

数值稳定性

$$I_{n-1} = \frac{1}{5}(\frac{1}{n} - I_n)$$

$$\frac{1}{6(n+1)} < I_n < \frac{1}{5(n+1)}$$

$$I_{40} = \frac{1}{5 \times 41}$$

$$e(I_0) = \left(-\frac{1}{5}\right)^n e(I_n)$$

40	4.87805e-003
39	4.02439e-003
38	4.32333e-003
37	4.39849e-003
36	4.52571e-003
35	4.65041e-003
34	4.78420e-003
33	4.92551e-003
32	5.07550e-003
31	5.23490e-003
30	5.40463e-003
29	5.58574e-003
28	5.77940e-003
27	5.98698e-003
26	6.21001e-003
25	6.45031e-003
24	6.70994e-003
23	6.99135e-003
22	7.29738e-003
21	7.63143e-003

20	7.99752e-003
19	8.40050e-003
18	8.84622e-003
17	9.34187e-003
16	9.89633e-003
15	1.05207e-002
14	1.12292e-002
13	1.20399e-002
12	1.29766e-002
11	1.40713e-002
10	1.53676e-002
9	1.69265e-002
8	1.88369e-002
7	2.12326e-002
6	2.43249e-002
5	2.84684e-002
4	3.43063e-002
3	4.31387e-002
2	5.80389e-002
1	8.83922e-002
0	1.82322e-001

数值稳定性

$I_{40} = 100$

40	1.00000e+002
39	-1.99950e+001
38	4.00413e+000
37	-7.95562e-001
36	1.64518e-001
35	-2.73480e-002
34	1.11839e-002
33	3.64557e-003
32	5.33149e-003
31	5.18370e-003
30	5.41487e-003
29	5.58369e-003
28	5.77981e-003
27	5.98689e-003
26	6.21003e-003
25	6.45030e-003
24	6.70994e-003
23	6.99135e-003
22	7.29738e-003
21	7.63143e-003

20	7.99752e-003
19	8.40050e-003
18	8.84622e-003
17	9.34187e-003
16	9.89633e-003
15	1.05207e-002
14	1.12292e-002
13	1.20399e-002
12	1.29766e-002
11	1.40713e-002
10	1.53676e-002
9	1.69265e-002
8	1.88369e-002
7	2.12326e-002
6	2.43249e-002
5	2.84684e-002
4	3.43063e-002
3	4.31387e-002
2	5.80389e-002
1	8.83922e-002
0	1.82322e-001

病态问题

- 条件数：输入变化所造成的最大误差放大

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

$$a = 0.99 \qquad x = 50.25$$

$$a = 0.991 \qquad x = 55.81$$

思考与练习

- 复习微积分、线性代数的基本知识
  - 一元函数及多元函数Taylor展式
  - 极限、连续函数介值定理、拉格朗日中值定理等
  - 线性代数的一些基本概念（行列式、特征值、特征向量、逆矩阵等）
- 分析单精度计算$\mathrm{fl}(9.4) - \mathrm{fl}(9) - \mathrm{fl}(0.4)$ 的结果，并进行计算机实践。
- 设计高效的多项式算法$P(x) = 1 + 2x^3 + 3x^7 + 4x^{11} + 5x^{15}$，计算机编程比较直接算法与优化算法的计算时间（采用双精度进行计算，$x = 2, x = 2.222222$分别循环10^9次）
- 推导计算$I_n = \int_0^1 x^n e^x dx$的递推公式，用正向和逆向递推计算$I_0 \sim I_{20}$，比较并分析两种迭代的误差和稳定性。
- 计算机实践需同时提交源程序和结果分析，无特殊说明结果输出保留12位小数。

2023秋季研究生数值分析

此群是企业内部群聊，仅企业成员可扫码加入

该二维码7天内(9月11日前)有效

企业微信

助教：曹洋