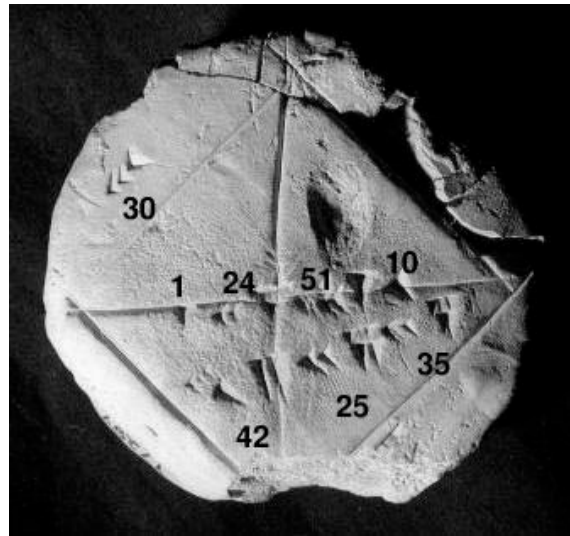


计算方法 (A)



童伟华 管理科研楼1205室

E-mail: tongwh@ustc.edu.cn

中国科学技术大学 数学科学学院

<http://math.ustc.edu.cn/>



相关信息



- 教材：《数值计算方法》（第三版），张韵华，王新茂，陈效群，张瑞编，科学出版社 + 自编讲义
- 参考书：
 - D. Kincaid, W. Cheney. 《Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing》（3rd Ed.） Thomson Learning Press. （有中译本与影印本，机械工业出版社）
 - T. Sauer. 《Numerical Analysis》（3rd Ed.） Pearson Education Press. （有中译本与影印本，人民邮电出版社）

课程目标



■ 掌握数值计算方法的基本原理

- 数学原理
- 基本算法
- 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

- 利用C/C++语言实现基本的算法
- 熟悉Matlab数值计算平台

课程考核



■ 平时作业：占总成绩**35%**

- 书面作业 (20%)
- 编程作业 (15%, 通过e-mail提交)

■ 期末考试：占总成绩**65%**



第 零 章 绪 论

计算方法概述



实际问题



物理模型



数学模型



数值方法

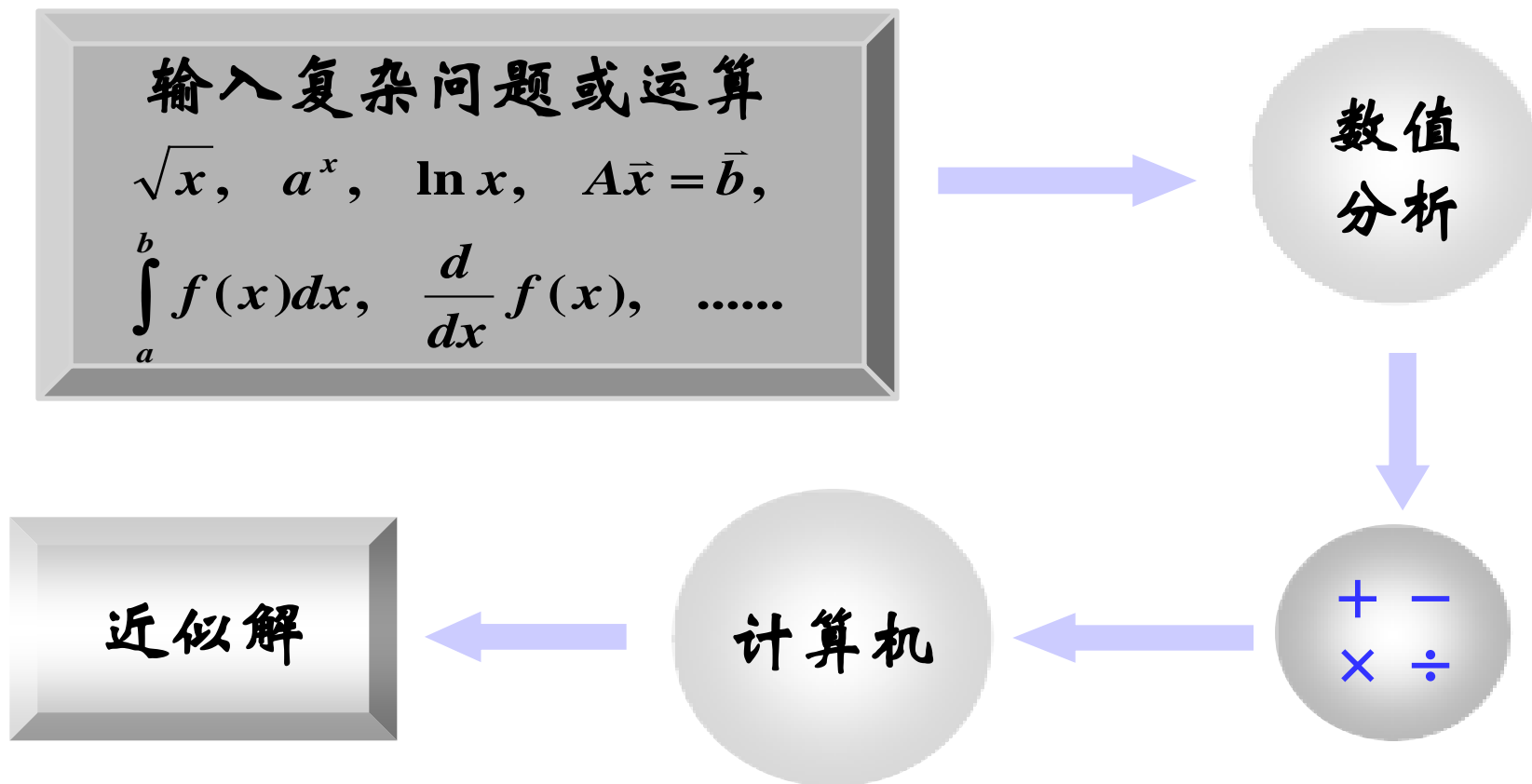


计算机求结果

现实中，具体的科学、工程问题的解决：

计算方法是一种研究并解决数学问题的数值近似解方法

计算方法概述



计算方法概论



- Numerical analysis: involves the study, development, and analysis of *algorithms* for obtaining *numerical solutions* to various mathematical problems
- Scientific computing: solving *mathematical* problems *numerically* on the *computer* is scientific computing
- Numerical analysis is called the mathematics of scientific computing

计算方法课程的特点



- 理论性：数学基础
- 实践性：算法实现
- 计算方法是连接模型到结果的重要环节
- 科学计算方法已深入到计算物理、计算力学、计算化学、计算生物学、计算经济学等各个领域
- 理论方法 + 实验方法 + 科学计算方法
- 本课仅限介绍最常用数学模型的最基本数值求解方法

数值计算方法的基本内容



- 数值逼近—数学分析中的数值求解，如微分、积分等

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$$

- 数值代数—线性代数的数值求解，如解线性方程组、逆矩阵、特征值、特征向量

$$Ax = b \quad \Rightarrow \quad x_i = D_i / D, \quad n = 20, \quad 9.7 \times 10^{20}$$

100亿/秒，算3,000年，而Gauss消元法2660次

- 微分方程数值解—常微分方程，积分方程，偏微分方程等，如Runge-Kutta法、打靶法，有限差分法，有限元法，有限体积法，边界元法，谱方法等

■ 绝对误差：设 x^* 为精确值， x 为近似值， $e = x^* - x$ 为误差或绝对误差

■ 例如：

$$f(x) = \ln(x+1) = \sum_{i=1}^n \frac{(-1)^{i-1}}{i} x^i + \frac{(-1)^n x^{n+1}}{(n+1)(1+\theta x)^{n+1}}, \quad 0 < \theta < 1$$

有限计算，截断误差

$$\begin{aligned} \pi &= 3.1415926535897932384626433832795... \\ &\approx 3.14159265358979 \end{aligned}$$

有限精度，舍入误差

■ 相对误差

$$e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*} \text{ 称为相对误差}$$

- 例如：150分满考139，100分满考90，两者的绝对误差分别为11和10，优劣如何？

前者相对误差 $(150 - 139)/150 = 0.073$,

后者相对误差 $(100 - 90)/100 = 0.100$

有效位数



- 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
- 有效位的多少直接影响到近似值的绝对误差和相对误差
- 例：

π 的近似值3.141具有几位有效位数？

π 的近似值3.142具有几位有效位数？

误差来源



- 原始误差 — 模型误差 (忽略次要因素, 如空气阻力)
物理模型, 数学模型
- 测量误差 — 观测误差 (测量引起的误差)
- 方法误差 — 截断误差 (算法本身引起)
- 计算误差 — 舍入误差 (计算机表示数据引起)

误差的估计



■ 绝对误差估计

$$e(x_1 \pm x_2) \approx e(x_1) \pm e(x_2)$$

$$e(x_1 \cdot x_2) \approx x_2 e(x_1) + x_1 e(x_2)$$

$$e(x_1 / x_2) \approx e(x_1) / x_2 - e(x_2) \cdot x_1 / x_2^2$$

小数作除数，绝对误差增大

误差的估计



■ 相对误差估计

$$e_r(x_1 + x_2) \approx \frac{x_1}{x_1 + x_2} e_r(x_1) + \frac{x_2}{x_1 + x_2} e_r(x_2)$$

$$e_r(x_1 - x_2) \approx \frac{x_1}{x_1 - x_2} e_r(x_1) - \frac{x_2}{x_1 - x_2} e_r(x_2)$$

$$e_r(x_1 \cdot x_2) \approx e_r(x_1) + e_r(x_2)$$

$$e_r(x_1 / x_2) \approx e_r(x_1) - e_r(x_2)$$

两相近数相减，相对误差增大

数值计算示例 – round.cpp



- 舍入误差：实数在计算机中的表示通常是近似的，所产生的误差称为舍入误差
- 实数在计算机中的表示
 - Float: 4 Bytes
 - Double: 8 Bytes
- 国际标准：IEEE Standard 754
- 非精确表示
- 不满足结合律

数值计算示例 – show_bytes.cpp



- 整数的二进制表示
- 实数的二进制表示
- Float与double的表示范围

Type	Minimum value	Maximum value
float	1.175494351 E - 38	3.402823466 E + 38
double	2.2250738585072014 E - 308	1.7976931348623158 E + 308

- 最小精度

$$\varepsilon_f = 1.1920929\text{E} - 7$$

$$\varepsilon_d = 2.2204464049250313\text{E} - 16$$

数值计算示例 – quadratic.cpp



■ 二次方程求根

$$ax^2 + bx + c = 0 \Rightarrow x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

■ 例如

$$x^2 + 9^{12}x - 3 = 0$$

■ 如何改进？

数值计算示例 - pi.cpp



■ π 的级数表示

$$\pi = 2 \times \frac{2}{\sqrt{2}} \times \frac{2}{\sqrt{2+\sqrt{2}}} \times \frac{2}{\sqrt{2+\sqrt{2+\sqrt{2}}}} \times \dots$$

$$\frac{\pi}{2} = \frac{2}{1} \times \frac{2}{3} \times \frac{4}{3} \times \frac{4}{5} \times \frac{6}{5} \times \frac{6}{7} \times \dots$$

$$\frac{\pi}{2} = 1 + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} \times \frac{2}{5} + \frac{1}{3} \times \frac{2}{5} \times \frac{3}{7} + \dots$$

$$\frac{\pi}{4} = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \frac{1}{9} - \dots$$

$$\frac{\pi}{6} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \times \frac{1}{3 \times 2^3} + \frac{1 \times 3}{2 \times 4} \times \frac{1}{5 \times 2^5} + \dots$$

$$\frac{\pi^2}{8} = 1 + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \frac{1}{7^2} + \dots$$

■ 如何选用哪个计算公式?

■ 如何提高计算精度?

数值计算示例 – unstable.cpp



■ 算法的数值稳定性

$$\begin{cases} x_0 = 1, x_1 = \frac{1}{3} \\ x_{n+1} = \frac{13}{3}x_n - \frac{4}{3}x_{n-1} (n \geq 1) \end{cases}$$

■ 分析

$$n = 15, \left(\frac{13}{3}\right)^{14} \approx 10^9$$

$$x_1 = \frac{1}{3} \approx 0.3333333, \quad e \approx 10^{-8}$$

避免误差危害的若干原则



- 选择收敛、稳定的算法
- 提高数值计算精度
 - 尽可能使用double等高精度的表示
 - 需要在内存、计算时间与计算精度之间作出平衡
- 尽可能避免两个相近的数相减
- 尽可能避免绝对值很小的数作除数
- 尽可能避免大数“吃”小数的现象

一些基本数学定理



- **（介值定理）** 设 $f(x)$ 是区间 $[a, b]$ 上的一个连续函数，那么 $f(x)$ 取到 $f(a)$ 与 $f(b)$ 之间的任何一个值，即如果 y 是 $f(a)$ 与 $f(b)$ 之间的一个数，那么存在一个数 $c \in (a, b)$ 使得 $f(c) = y$
- **（中值定理）** 设 $f(x)$ 是区间 $[a, b]$ 上的一个连续函数，且 $f(x)$ 在 (a, b) 上可微那么在 a 和 b 之间存在一个数 c ，使得

$$f'(c) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}$$

一些基本数学定理



- **(积分中值定理)** 设 $f(x)$ 是区间 $[a, b]$ 上的连续函数, $g(x)$ 是可积函数, 并且在 $[a, b]$ 上不变号, 那么在 $[a, b]$ 内存在一个数 c 使得

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(c)\int_a^b g(x)dx$$

- **(Rolle定理)** 设 $f(x)$ 是区间 $[a, b]$ 上的可微函数, 并且 $f(a) = f(b)$, 那么在 a 和 b 之间存在一个数 c , 使得
$$f'(c) = 0$$

一些基本数学定理



- (带余项的Taylor定理) 设 x 和 x_0 是实数, $f(x)$ 在区间 $[x_0, x_1]$ (或 $[x, x_0]$) 上 $k+1$ 次连续可微, 那么在 x 与 x_0 之间存在一个数 c , 使得

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!}f''(x_0) + \cdots + \frac{(x - x_0)^k}{k!}f^{(k)}(x_0) + \frac{(x - x_0)^{k+1}}{(k+1)!}f^{(k+1)}(c)$$