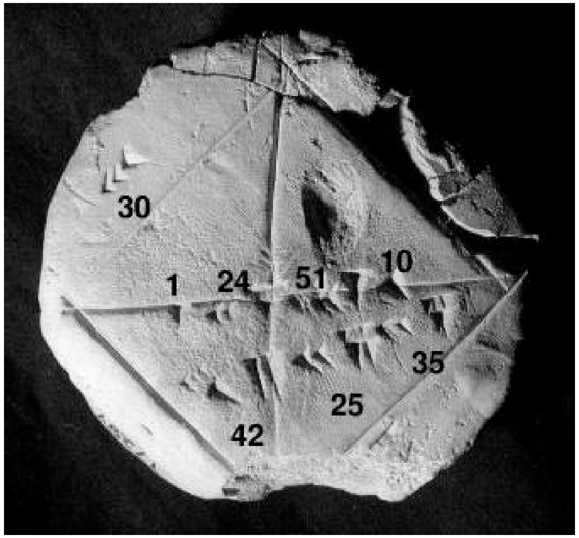
# 计算方法（A）




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　　现实中，具体的科学、工程问题的解决：

↓

物理模型

↓

数学模型

↓

数值方法

> 计算方法是一种研究并解决数学问题的数值近似解方法

↓

计算机求结果

# 计算方法概述

输入复杂问题或运算

$$\sqrt{x},\quad a^x,\quad \ln x,\quad A\vec{x}=\vec{b},$$

$$\int_a^b f(x)dx,\quad \frac{d}{dx}f(x),\quad \ldots\ldots$$

数值分析

$+\quad -$

$\times\quad \div$

计算机

近似解

# 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
- AI for science
- 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300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

# 误差

- **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

$$\pi = 3.14159265358979323846264338327950...$$
$$\approx 3.14159265358979$$

有限精度，舍入误差

# 误差

- 相对误差

$$e_r = \frac{e}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$$ 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：

$\pi$ 的近似值3.141具有几位有效位数?

$\pi$ 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**

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

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

$$e\left(x_1 / x_2\right) \approx e(x_1) / x_2 - e(x_2) \cdot x_1 / x_2{}^2$$

小数作除数，绝对误差增大

# 误差的估计

- 相对误差估计

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

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

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

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

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

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

$$\varepsilon_d = 2.2204460492503131\mathrm{E}-16$$

# 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

- $\pi$ 的级数表示

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

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

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

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

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

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

- 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

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

- 分析

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

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

# 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

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

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