

数值分析

李小舟

xiaozhouli@uestc.edu.cn

<http://xiaozhouli.com>

概要

- 计算数学（科学计算）
- 课程简介
- 数值分析的基本概念

现代计算数学的起源

- 1947 年, John von Neumann 等以著名论文
“高阶矩阵的数值求逆”

NUMERICAL INVERTING OF MATRICES OF HIGH ORDER

JOHN VON NEUMANN AND H. H. GOLDSTINE

ANALYTIC TABLE OF CONTENTS

PREFACE	1022
CHAPTER I. The sources of errors in a computation	
1.1. The sources of errors.	
(A) Approximations implied by the mathematical model.	
(B) Errors in observational data.	
(C) Finitistic approximations to transcendental and implicit mathematical formulations.	
(D) Errors of computing instruments in carrying out elementary operations: "Noise." Round off errors. "Analogy" and digital computing. The pseudo-operations.....	1023

开启了现代计算数学时代

现代计算数学

- “现代” 计算数学，其特征在于结合了可编程计算机、数学分析，以及解决应用中的大型和复杂问题的机会和需要。
- 研究有关的数学和实际问题怎样由计算机加以有效解决。
- 上世纪90年代因技术和应用发展需求的推动产生科学计算 (Scientific Computing) 这一新的交叉学科。

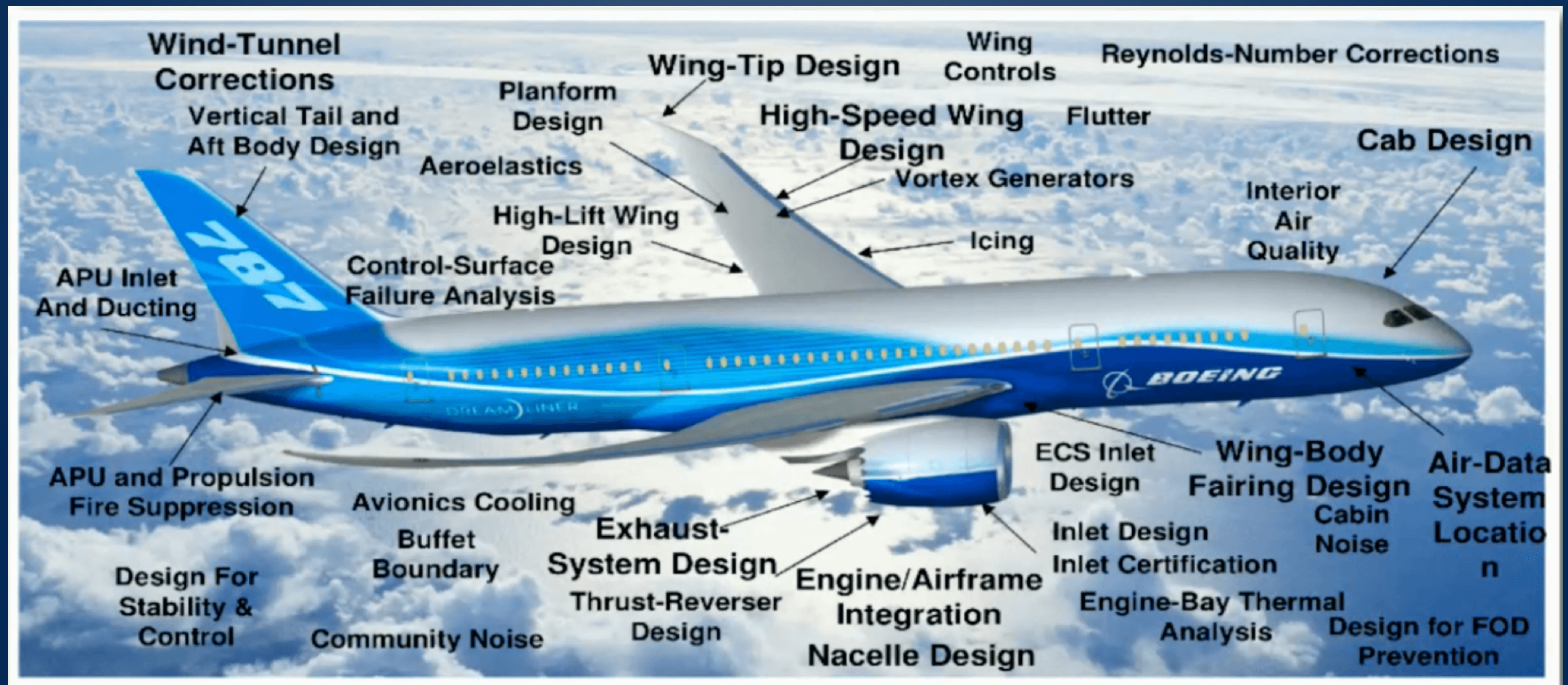
- 乃至本世纪因科学和工程领域问题越发复杂、细致、“原始”，计算逐步渗透于物理、化学、生物等学科，诞生了与计算有关的众多分支学科，从而产生了融建模、算法、软件研制和计算模拟为一体的计算科学（Computational Science）。

研究意义

- 科学计算已经与理论研究、科学实验一起，成为第三种科学方法。
- 理论研究和科学实验的局限决定了科学计算存在的必要和重要性。
- 科学计算是科学技术核心竞争力的重要标志，是科学技术创新发展的关键要素。

- 计算科学在自然科学、生命科学、医学、系统科学、经济学及社会科学等众多科学中作用日益剧增，在气象、石油勘探、核能技术、航空航天、交通运输、机械制造、水利建筑等重要工程中成为不可或缺的重要工具，计算科学解决了军事、航空、航天、经济建设、油气等领域困扰人类的众多难题

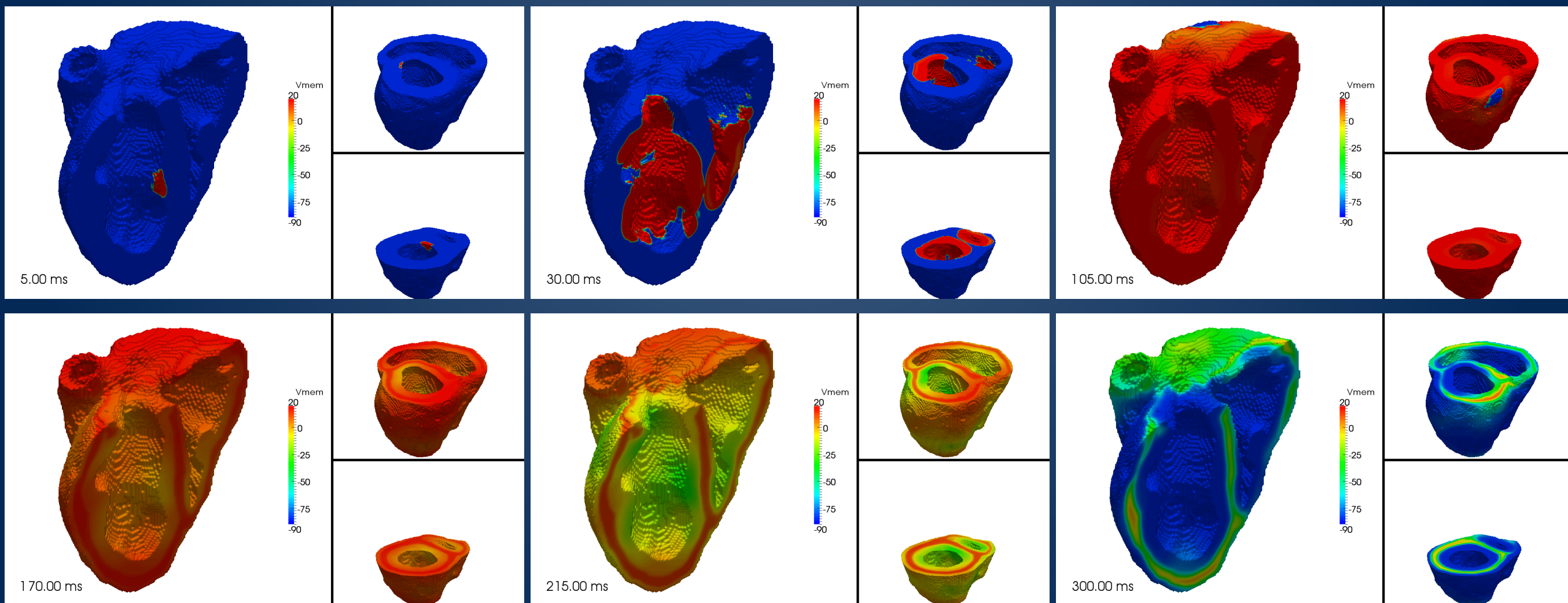
Computational Fluid Dynamics (CFD) Contributions to Boeing 787





Xiaozhou

High Performance Methods for Numerical Simulation of a Heartbeat





Xiaozhou

Supercomputer in the World

Piz Daint, Switzerland



Sunway TaihuLight, China



驱动力: 计算机 + 数学(相关领域) + 应用

思考：你研究领域中的计算
数学/数值分析问题？

数值分析 (Numerical Analysis)

- 研究用计算机求解数学问题的数值方法(算法)及其相关理论
 - 用近似的手段构造适合计算机的算法
- 研究对所设计的数值方法进行算法稳定性、精度和计算复杂性的分析
 - 分析近似对计算结果的影响

授课内容

- 非线性方程求解
- 数值代数
 - 线性方程组解法(直接法、迭代法)
 - 矩阵特征值与特征向量的计算
- 函数插值与逼近
- 数值微分与积分
- 常微分方程的数值解法

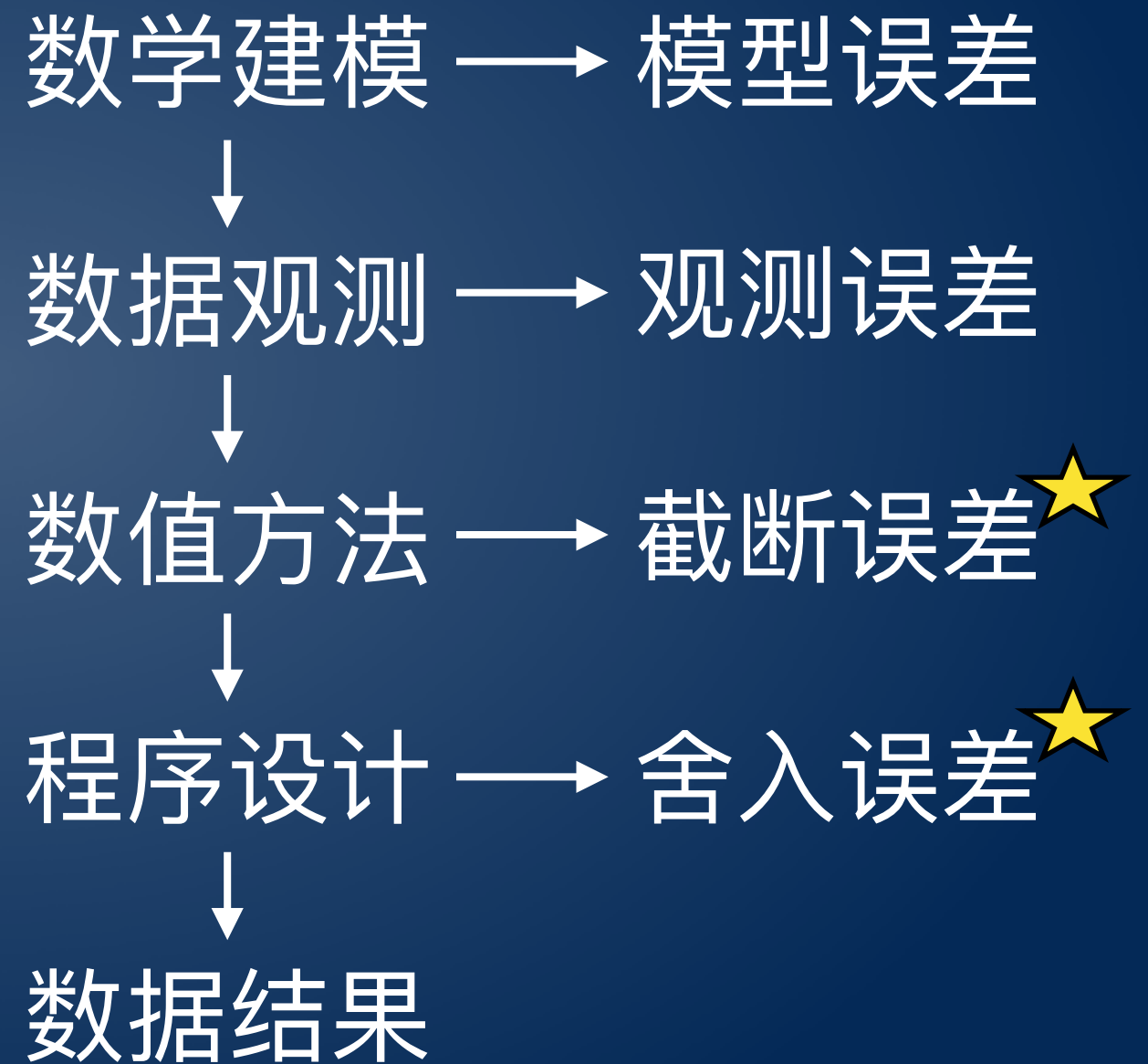
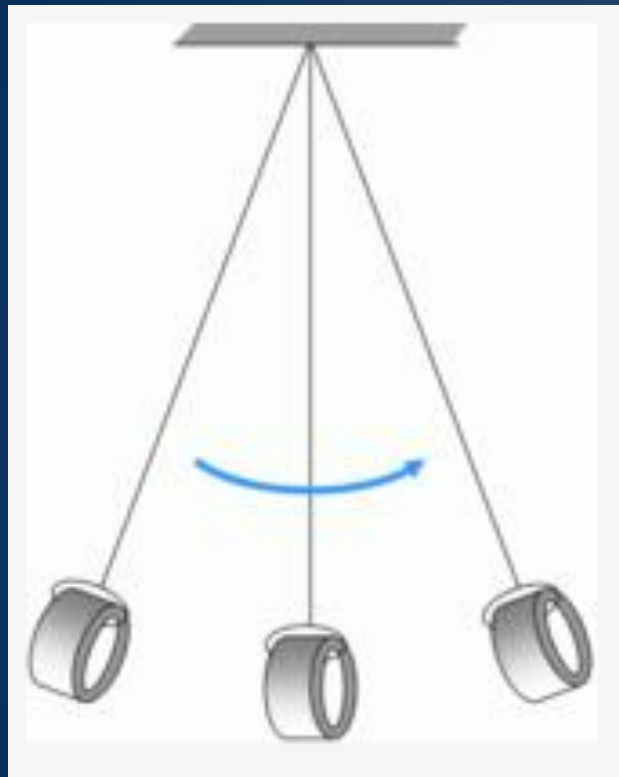
教材与参考读物

- 钟尔杰, 黄廷祝, 《数值分析》高教出版社, 2004。
- S. D. Conte, C. De Boor, Elementary Numerical Analysis: An Algorithmic Approach, Mcgraw-Hill College, 1980.
- A. Quarteroni, et al., Numerical Mathematics, Springer, 2000. 科学出版社影印。
- David Kincaid, Ward Cheney, Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing, Third Edition, Brooks/Cole, 2002. 机械工业出版社影印和翻译。

考核方式与成绩评定

- 平时成绩(出勤, 实践表现及作业)
- 期末考核方式: 闭卷
- 考试
 - 平时成绩30% + 期末成绩70%
- 考查:
 - 平时成绩50% + 期末成绩50%, 总分达到60分即为通过

问题：单摆问题



- 截断误差：求解数学模型时，所采用的求解方法常常是不精确的。要获得数学问题的精确解需要进行无限次或者无法接受的大量算术运算，因此需要寻找问题的近似解来替代其精确解。
- 舍入误差：计算机表示的数的位数有限，把数据输入计算机、完成算术运算和输出数据时要进行舍入操作。

误差的数学定义

设 x^* 是某个量的精确值, 而 x 为其的一个近似值, 则称

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

为 x 的绝对误差。

而称 $e_r(x) = \frac{x - x^*}{x^*}$, ($x^* \neq 0$)

为 x 的相对误差。

如果存在一个适当小的正数 ε ，使得

$$|e(x)| = |x - x^*| \leq \varepsilon$$

则称 ε 为 x 的绝对误差限。

如果存在一个适当小的正数 ε_r ，使得

$$|e_r(x)| = \left| \frac{x - x^*}{x^*} \right| \leq \varepsilon_r$$

则称 ε_r 为 x 的相对误差限。

有效数字概念

若近似值 x 的绝对误差限是某一位上的半个单位, 该位到 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。

例：取 π 的有效位数如下 ($\pi \approx 3.1415926$)

取 $x_1 = 3.14$, ? 位有效数字;

取 $x_2 = 3.1415$, ? 位有效数字;

取 $x_3 = 3.1416$, ? 位有效数字。

有效数字与误差的关系

用科学计数法，记 $x = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m$ ，其中 a_i 是0-9中的任一整数，且 $a_1 \neq 0$ 。

若绝对误差限满足：

$$|e(x)| = |x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

则 x 有 n 位有效数字。

问： n 位有效数字的相对误差限满足？

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?

数值运算的误差估计

- 函数计算的误差估计（准确值 $y^* = f(x^*)$ ）

$$\varepsilon(f(x)) \approx |f'(x)| \varepsilon(x)$$

- 算术运算的误差估计

$$\varepsilon(x_1 \pm x_2) = \varepsilon(x_1) + \varepsilon(x_2)$$

$$\varepsilon(x_1 x_2) \approx |x_2| \varepsilon(x_1) + |x_1| \varepsilon(x_2)$$

$$\varepsilon(x_1/x_2) \approx \frac{|x_2| \varepsilon(x_1) + |x_1| \varepsilon(x_2)}{|x_2|^2}, \quad x_2 \neq 0.$$

例 二次方程 $x^2 - 16x + 1 = 0$, 取 $\sqrt{63} \approx 7.937$, 求
 $x_1 = 8 - \sqrt{63}$ 使具有4位有效数字

数值计算中的基本原则

- 避免绝对值小的数做除数
- 避免两相近数相减
- 防止大数“吃”小数现象(注意运算次序)
- 减少计算工作量(乘、除法运算次数)

例 计算多项式

$$p_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

的值。（秦九韶算法）

算法的数值稳定性

例 计算 $I_n = e^{-1} \int_0^1 x^n e^x dx$ ($n = 0, 1, \dots$) 并估计误差。

算法的数值稳定性

例 计算 $I_n = e^{-1} \int_0^1 x^n e^x dx$ ($n = 0, 1, \dots$) 并估计误差。其递推公式

$$\begin{cases} I_n = 1 - nI_{n-1}, & n = 1, 2, \dots, \\ I_0 = e^{-1} \int_0^1 e^x dx = 1 - e^{-1} \end{cases}$$

- 误差的传播与积累
- 一个算法如果输入数据有误差，而在计算过程中舍入误差不增长，则称此算法是数值稳定的；否则则称此算法为不稳定的。



Xiaozhou

谢谢！