第一章：绪论

目录

课程简介

- 先修课程：线性代数、高等数学、编程
- 课程内容：插值与逼近、数值积分、常微分方程数值解、方程求根、线性方程组求解、特征值与特征向量的计算
- 考核：参见课程大纲
- 作业：作业在 canvas 上提交
- 课本：李庆扬、王能超、易大义，数值分析 (第 5 版)，华中科技大学出版

拓展阅读

- **人物传记**

  《冯康——一位杰出数学家的故事》

  `https://global-sci.org/intro/article_detail/mc/11340.html`

- **学科发展论文**

  汤涛. 科学计算的历史与展望 [J]. 计算物理, 2023, 40(1): 4-13.

目录

计算数学概述

实际问题的建模：应用数学范畴

计算方法：计算数学的主要研究部分；研究计算问题的共性部分

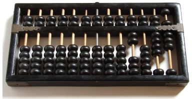
计算力学、计算物理、计算化学、计算生物、计算经济学、众多工程领域、人工智能、量子计算 ···

编程与应用：实际应用方法与验证有效性

历史

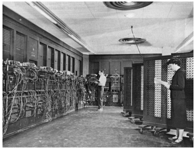
早期：算盘、算表等

- 牛顿插值公式、牛顿求根法
- 高斯消去法
- 秦九韶（多项式求和）



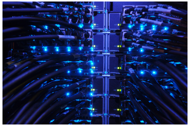
近代：ENIAC

- 1946 年，世界上第一台通用计算机
- 计算速度飞速提高



当代：

- 并行计算
- GPU 计算
- 计算机集群
- 量子计算



流程图

- 问题
  - 连续：比如积分问题
  - 离散：比如求解线性方程
- 理论
  - 误差
  - 稳定性
  - 收敛性
  - 复杂性（计算时间、存储空间）
- 编程
  - 验证理论
- 应用
  - 解决实际问题

例子：计算 n 阶线性方程组

$n = 20$

- 若使用克拉默法则（Cramer）需要 9.7×10^{20} 次方乘除法运算
- 若使用高斯消去法，仅需要 3060 次乘除运算

若我们有一台 CPU 主频为 3G 的计算机（约每秒 30 亿次计算）:

- Cramer 法：至少 1 万年
- 高斯消去法：不足一秒

计算方法的重要性!

目录

计算数学讨论什么误差?

- 模型误差（不考虑）：数学模型和实际问题之间的误差
- 观测误差（不考虑）：物理测量的误差
- 数值误差（核心）

$$f(x) = \underbrace{f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n}_{P_n(x)} + \underbrace{\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1}}_{R_n(x)}.$$

R_n 为截断误差

- 舍入误差（有时考虑）

$$\pi \approx 3.14 \qquad \text{(三位有效数字)}$$

该误差主要来源于计算机的有限位元（浮点误差）和初始数据的误差

误差：绝对误差

x 为精确值，x^* 为近似

- 绝对误差 $e^* = x^* - x$
- 误差限：对于 e^* 的一个上界，标记为 ε^* （$|e^*| \le \varepsilon^*$）
  例子：毫米尺的误差限为 0.5 mm
- 因此 $x^* - \varepsilon^* \le x \le x^* + \varepsilon^*$ （标记为 $x = x^* \pm \varepsilon^*$）
- 绝对误差和误差限是有量纲的

误差：相对误差

- 相对误差：$\frac{e^*}{x} = \frac{x^* - x}{x}$
- 实际使用的相对误差：$e_r^* = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$
- 相对误差限：$\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon^*}{|x^*|}$
- 相对误差是无量纲的
- $x = 10 \pm 1$ 和 $y = 1000 \pm 5$ 的相对误差限是多少?

有效数字

近似的时候，常用的是四舍五入法：

- $|\pi - 3.14| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$, $|\pi - 3.1416| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4}$

误差不超过末尾的半个单位

定义：若近似值 x^* 的误差限是某一位的半个单位，该位到 x^* 的第一个非零数字共有 n 位，则说 x^* 有 n 位有效数字。

$x^* = \pm 10^m \times \left(a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}\right) = \pm 10^m \times (a_1.a_2a_3 \cdots a_n)$,

其中 $a_1 \neq 0$, m 为整数，$a_i \in \{0, 1, 2 \cdots, 9\}$，且

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$$

有效数字

练习： 写出如下各数的具有 5 位有效数字的近似数：

$$187.9325, \qquad 8.000033, \qquad 2.7182818$$

答案见课本例题 1.2

有效数字越多，相对误差越小

定理 设近似数为

$$x^* = \pm 10^m \times \left(a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}\right),$$

$a_1 \neq 0$。若 x^* 具有 n 位有效数字，则其相对误差限

$$\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2a_1} 10^{-(n-1)}$$

反之，若相对误差限 $\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2(a_1+1)} 10^{-(n-1)}$ 则 x^* 至少具有 n 位有效数字。

运算的误差估计

例子： 某场地长 $l^* = 110$ m，宽 $d^* = 80$ m。已知 $|l - l^*| \le 0.2$ m，$|d - d^*| \le 0.1$ m。试求面积的绝对误差限和相对误差限。

运算的误差估计

数值误差的运算

$$
\begin{aligned}
\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) &\leq \varepsilon(x_1^*) + \varepsilon(x_2^*) \\
\varepsilon(x_1^* x_2^*) &\approx |x_1^*|\varepsilon(x_2^*) + |x_2^*|\varepsilon(x_1^*) \\
\varepsilon(x_1^*/x_2^*) &\approx \frac{|x_1^*|\varepsilon(x_2^*) + |x_2^*|\varepsilon(x_1^*)}{|x_2^*|^2}
\end{aligned}
$$

目录

数值稳定性

计算 $I_n = e^{-1}\int_0^1 x^n e^x \, \mathrm{d}x \ (n = 0, 1, \cdots)$ 并估计误差。

由分部积分

$$I_0 = 1 - e^{-1}, \qquad I_n = 1 - nI_{n-1}, \qquad n = 1, 2, \cdots$$

$I_0 \approx 0.63212055882855 77$。假设我们使用较少的有效数字 $I_0 \approx 0.6321$。

- 通过上述的迭代法求真实值，我们能观察到误差怎么变化?
- 能否通过数学来解释?

数值稳定性

一个算法如果输入数据有误差，而且在计算过程中舍入误差不增加，则称该算法是数值稳定的；否则称此算法为数值不稳定。

病态问题

求线性方程组的解:

$$
\begin{aligned}
x + \alpha y &= 1 \\
\alpha x + y &= 0
\end{aligned}
$$

- 当 $\alpha = 0.99$, x 的值是什么?
- 当 $\alpha = 0.991$, x 的值是什么?

病态问题

对一个数值问题如果本身输入数据有微小扰动，引起输出数据相对误差很大，即我们称该问题为病态问题。

提示：问题的病态程度是该问题固有的一种性质，与计算方法无关。

避免误差的危害

技巧 1：避免相近的数字相减

我们想计算 $\sqrt{9.01}-3$。若 $\sqrt{9.01}\approx 3.0016662\approx 3.00$，我们得不到任何有效数字。方法如下：

$$\sqrt{9.01}-3=\frac{0.01}{\sqrt{9.01}+3}\approx\frac{0.01}{6}\approx 0.00167$$

真实值：0.0016662，因此我们可以得到 3 位有效数字。

一些常用技巧：

- 当 $x_1\approx x_2$ 时，$\log(x_1)-\log(x_2)=\log(x_1/x_2)$
- 当 x 很大时，$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$

技巧 2：避免大数吃小数

例 1：如果你想算：$(10^9 + 10^{-9} - 10^9)/10^{-9} = 1$

```
In [6]: (10**9 + 10**-9 - 10**9)/(10**-9)
Out[6]: 0.0

In [7]: (10**9 + 10**-9) == 10**9
Out[7]: True
```

问：这里发生了什么问题？

例 2：在五位十进制计算机上，计算

$$A = 52492 + \sum_{i=1}^{1000} \delta_i, \qquad 0.1 \le \delta_i \le 0.9$$

方法：避免非同数量级的数字先运算（让同数量级的数字先运算）。

目录

秦九韶算法

若我们给定 n 次多项式

$$p(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_{n-1}x + a_n, \qquad a_0 \neq 0$$

求 x^* 处的值 $p(x^*)$。

方法 1 直接求每一项 a_ix^{n-i} 再相加，我们需要多少次乘法和加法?

方法 2（秦九韶，南宋，1247） 采用

$$p(x) = (\cdots(a_0x + a_1)x + \cdots + a_{n-1})x + a_n \qquad \text{即} \qquad \begin{cases} b_0 = a_0 \\ b_i = b_{i-1}x + a_i \end{cases}$$

我们需要多少次乘法和加法?

目录

算法复杂度的符号

计算复杂度是由某个（某些）计算资源被使用的次数来衡量：

- 计算 $N \times N$ 的矩阵所有元素的和需要 $N^2 - 1$ 次加法运算。当 N 很大的时候，$N^2 - 1$ 和 N^2 没有本质区别，所以，我们使用符号 $\mathcal{O}(N^2)$ 来简化。

  运算复杂度是关于某个量 N 的一个函数 $N \to f(N)$，符号 "$f = \mathcal{O}(N^2)$" 的意思是存在某个常数 C 使得，$\lim_{N\to\infty} \left|\frac{f(N)}{N^2}\right| \le C$.

- 判断题：当 $N \gg 1$，
  - 若 $f(N) = 3N^3 - 3N^2 + N$，则 $f = \mathcal{O}\left(N^3\right)$.
  - 若 $f(N) = e^N$，则 $f = \mathcal{O}\left(N^2\right)$.

算法复杂度的符号

计算复杂度是由某个（某些）计算资源被使用的次数来衡量：

- 计算 $N \times N$ 的矩阵所有元素的和需要 $N^2 - 1$ 次加法运算。当 N 很大的时候，$N^2 - 1$ 和 N^2 没有本质区别，所以，我们使用符号 $\mathcal{O}(N^2)$ 来简化。

  运算复杂度是关于某个量 N 的一个函数 $N \to f(N)$，符号 "$f = \mathcal{O}(N^2)$" 的意思是存在某个常数 C 使得，$\lim_{N\to\infty}\left|\frac{f(N)}{N^2}\right| \le C$.

- 判断题：当 $N \gg 1$，
  - 若 $f(N) = 3N^3 - 3N^2 + N$，则 $f = \mathcal{O}(N^3)$.
    答案：真命题
  - 若 $f(N) = e^N$，则 $f = \mathcal{O}(N^2)$.
    答案：该命题为假，如上的 C 并不存在

Big-O 符号在误差分析中的应用

在泰勒展开中，

$$f(x) = \underbrace{f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n}_{P_n(x)} + \underbrace{\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1}}_{R_n(x)}.$$

n 阶泰勒展开近似在 $x \approx 0$ 时是精确的，其中截断误差可以被写成

$$\mathcal{O}\left(|x|^{n+1}\right)$$

- 意思就是存在某个常数 C，使得对于足够小的 $x \to 0$，
$$|f(x) - P_n(x)| \leq C|x|^{n+1}.$$
- 亦或者说存在某个常数 C' 使得
$$\lim_{x \to 0} \frac{|f(x) - P_n(x)|}{|x|^{n+1}} \leq C'.$$

在使用 Big-O 符号时，其中的自变量是考虑数值比较大时的极限，还是比较小时的极限是通过问题的背景来确定的。

练习： 对于函数 $f(x) = \sin(x)$ 关于 $x \approx 0^+$ 的泰勒展开，如下哪些表达式是对的？

- A $\sin(x) = x + \mathcal{O}(x^3)$
- B $\sin(x) = x + \mathcal{O}(x^4)$
- C $\sin(x) = x - \frac{x^3}{6} + \mathcal{O}(x^4)$
- D $\sin(x) = x - \frac{x^3}{6} + \mathcal{O}(x^5)$

在使用 Big-O 符号时，其中的自变量是考虑数值比较大时的极限，还是比较小时的极限是通过问题的背景来确定的。

练习： 对于函数 $f(x) = \sin(x)$ 关于 $x \approx 0^+$ 的泰勒展开，如下哪些表达式是对的？

A $\sin(x) = x + \mathcal{O}(x^3)$

B $\sin(x) = x + \mathcal{O}(x^4)$

C $\sin(x) = x - \frac{x^3}{6} + \mathcal{O}(x^4)$

D $\sin(x) = x - \frac{x^3}{6} + \mathcal{O}(x^5)$

答案是 ACD。其中 C 是正确的，但是对于误差的估计的确没有 D 选项来得精确。

总结

- 了解计算数学的范围以及其需要解决的问题
- 了解误差、有效数字等基本概念
- 了解数值稳定性的重要性、病态问题等
- 了解秦九韶算法（计算数学的历史至少可以追溯到南宋）
- 回顾泰勒展开、Big-O 符号的运算。（后续的课程内容将频繁使用相应公式和概念）