計算科學的觀念

- 目的：用電腦來求取科學問題的解答
- 電腦的角色：忠實的執行者
- 科學程式設計：把解科學問題的方法步驟以程式語言描述給電腦

要點

- 了解電腦
- 熟悉程式語言
- 清楚解問題的方法
- 累積科學程式的經驗

課程回顧

- 電腦的軟硬體架構
- 抽象的電腦
- 作業系統與程式語言
- 演算法的描述

Runge-Kutta 二次的分析

- Runge-Kutta： 以起點求變率；用先算得的變率來取增點，求增變率；增取若干變率後，用所得變率來估算末點。
- Butcher 表

新增點值的變率組合權重

新增點的位置

0				
1/2	1/2			
1/2	0	1/2		
1	0	0	1	
	1/6	1/3	1/3	1/6

末點值的變率組合權重

- 中點法

0		
1/2	1/2	
	0	1

$$f_0 = f(t, y)$$

$$f_1 = f(t + \tau/2, y + \tau f_0/2)$$

$$y_f = y + \tau f_1$$

$$\frac{dy}{dt}=f(t,y)$$

中點法的推導

Taylor 展開 $y=y_1 t+y_2 t^2+y_3 t^3+O(t^4)$

$$f(t,y)=f_{00}+f_{10}t+f_{01}y+f_{11}ty+f_{20}t^2+f_{02}y^2++O(t^3)$$

比較係數

$$y_1=f_{00}$$

$$y_2=\frac{1}{2}(f_{10}+f_{01}f_{00})$$

$$y_3=\frac{1}{3}(f_{20}+f_{10}f_{01}+f_{11}f_{00}+f_{01}^2 f_{00}+f_{02}f_{00}^2)$$

中點變率

$$f_0=f_{00}$$

$$t=\tau/2 \qquad y=f_{00}\tau/2$$

$$f_1=f(\tau/2,f_{00}\tau/2)$$

$$=f_{00}+\frac{1}{2}(f_{10}+f_{01}f_{00})\tau+\frac{1}{4}(f_{11}f_{00}+f_{20}+f_{02}f_{00}^2)\tau^2+O(\tau^3)$$

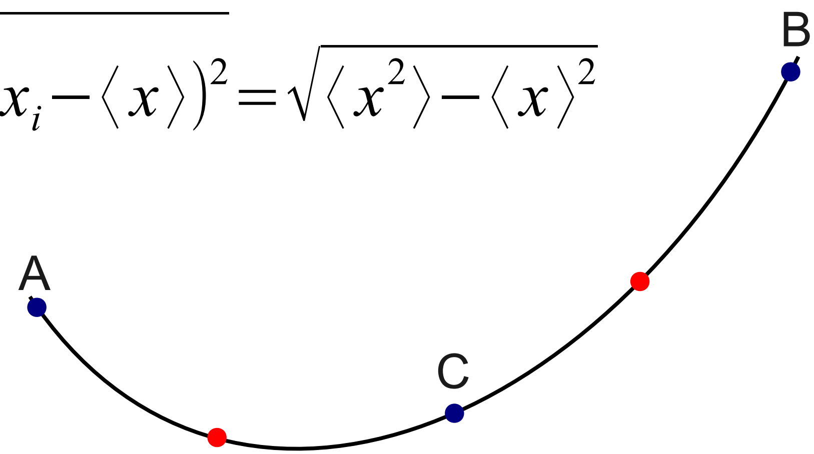
$$y(\tau)=f_1\tau+O(\tau^3)$$

簡易的數據分析

$$\{x_i | i=0\ldots n-1\}$$

平均值與標準差

$$\langle x\rangle=\sum_i x_i \qquad \Delta x=\sqrt{\frac{1}{n}\sum_i (x_i-\langle x\rangle)^2}=\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2}$$



最小平方法：將平方差最小化

回歸直線 $y=a+bx$

$$b=\frac{\langle x\,y\rangle-\langle x\rangle\langle y\rangle}{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2}$$

$$a=\langle y\rangle-b\langle x\rangle$$

最小化的演算法

啓始條件： A < C < B

f(C) < f(A), f(C) < f(B)

- 計算在 AC 與 CB 中點的 f 值
- 在維持啓條件下，重新指定原區間一半的 A, B, C

Monte Carlo 法積分題補充說明

- 給定點數 N ＝ 100, 400, 1600, 6400, 25600 分別用 seed = 1 到 1000 來作積分。
- 用在每個 N 得到的 1000 個積分值，估算積分標準差 S_N 。
- 假定 $S_N = f(N) = A N^{\alpha}$，可以用回歸直線在 $\mathrm{Log}(S_N)$ 對 $\mathrm{Log}(N)$ 的空間中求出 A 及 α 的最佳值。

一維的隨機漫遊

單一變數代表漫遊者位置
以 0~1 的隨機數來決定下一刻的位置：

```
if (rng.uniform() > p / (p + q)) x = x – 1;
else x = x + 1;
```

給定 p, q, L 及初始 x_0， 求

- 存活率 r
- 平均到家時間 τ_h
- 平均墜崖時間 τ_f

本週作業

1. 把 Runge-Kutta 二次的中點法改成取任意間點 c（Butcher 表如右）：

0		
c	c	
	a	b

試求 a 與 b 係數的值。

2. 寫一程式模擬前頁的隨機漫遊，統計在 Random Seed = 1 到 1000 中的前頁問題的數值解。

3. 用 2. 的程式計算 L=100,p=q=0.5 時 x_0=1~99 的平均到家時間 τ_h（作圖），假定 $\tau_h = a + bx_0 + cx_0^2$, $a = 0$, 以最小方差法求 b 及 c 的最佳值。

用 BASH 來作工

```
cp1@area:~$ hw7_rw
x0 L p q: 20 100 0.5 0.5
got 20 100 0.5 0.5
s_rate=0.799
t_home=1231
t_fall=2944.21
cp1@area:~$ echo 20 100 0.5 0.5|hw7_rw|grep '='
s_rate=0.799
t_home=1231
t_fall=2944.21
cp1@area:~$ eval `echo 20 100 0.5 0.5|hw7_rw|grep '='`
cp1@area:~$ echo -e "${x0}\t${s_rate}\t${t_home}\t${t_fall}"
100     0.799 1231  2944.21
cp1@area:~$ function prdt {
> eval `echo $1 100 0.5 0.5|hw7_rw|grep '='`
> echo -e "$1\t${s_rate}\t${t_home}\t${t_fall}"; }
cp1@area:~$
cp1@area:~$ x0=1;while ((x0<100));do
> prdt $x0;x0=$((x0+1));done>rw.txt
```

正常手動操作

無互動的操作

格式轉換

函數化

輸出到檔案