Numerical Computing Methods 数值计算方法

LI, Xiao Peng

李晓鹏

(Email: x.p.li@szu.edu.cn)

Shenzhen University

04 Sep. 2023

引论

❶ 研究对象与特点

2 数值方法的基本内容

3 数值算法及其设计

4 误差分析

引论

❶ 研究对象与特点

2 数值方法的基本内容

❸ 数值算法及其设计

4 误差分析

什么是计算机数值方法?

数值计算方法(或数值分析)主要是研究如何运用计算机去获得数学问题的<mark>数</mark> <mark>值解</mark>的理论和方法。

什么是计算机数值方法?

数值计算方法(或数值分析)主要是研究如何运用计算机去获得数学问题的<mark>数</mark> <mark>值解</mark>的理论和方法。

牛顿-拉夫逊(Newton-Raphson)迭代法计算开平方:

```
\begin{array}{l} \textbf{function} \ \ y = \ \mathsf{mysqrt}(x) \\ \ \ \mathsf{guess} = x; \\ \ \mathsf{threshold} = 1e-9; \\ \ \ \textbf{while} \ \ \textbf{abs}(\mathsf{guess} \ * \ \mathsf{guess} - x) > \mathsf{threshold} \\ \ \ \ \mathsf{guess} = 0.5 \ * \ (\mathsf{guess} + x \ / \ \mathsf{guess}); \\ \ \ \textbf{end} \\ \ \ \ y = \mathsf{guess}; \\ \ \ \textbf{end} \end{array}
```

现代科学研究的三个重要组成部分

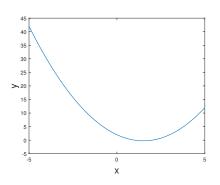
- 1. 理论计算
- 2. 科学实验
- 3. 科学计算

重要性

- 1. 仅靠数学理论的演绎和推导不能解决实际中的数值问题,只有与计算机科学相结合,才能研制出实用的好算法
- 2. 好的算法变成数值软件以后才可能为社会创造更大的财富

利用数学和计算机知识解决实际问题可分为两步

- 1. **建立数学模型:** 需要利用有关专业知识和数学理论,这属于应用数学范围
- 2. **提出数值问题与数值方法:** 将数学模型变成数值问题,进而研究该数值问题的数值方法,并设计有效的数值算法的过程,这属于计算方法的范围



现代计算方法的一个显著特点

已产生大量实用的"综合数学软件库",并逐步形成了数值软件产业,如:

- Mathematica: 综合数学软件包, 集符合演算, 数值计算和图形演示等
- Maple: 系统内置高级技术解决建模和仿真中的数学问题,符号计算、无限 精度数值计算等
- MATLAB: 集数值计算、图形演示等一体的综合数值软件库

Mathematica

```
(* Define variables *) a = 1; b = -3; c = 2; (* Solve the equation using the solve function *) solutions = Solve[a x^2 + b + c = 0, x; Print["The solutions are: ", solutions];
```

Maple

```
# Define variables
a := 1;
b := -3:
c := 2:
# Defining quadratic equations
equation := a*x^2 + b*x + c = 0:
# Solve the equation using the solve function
solutions := solve(equation, x);
print("The solutions are:", solutions);
```

MATLAB

```
% Define variables
a = 1;
b = -3;
c = 2;

% solution calculation of quadratic equations
solutions = roots([a, b, c]);

disp(['The-solutions-are:-', num2str(solutions')]);
```

本课程包含的主要内容:

- 1. 数值方法
- 2. 算法及其设计
- 3. 误差分析

"数值方法"(Numerical Methods)和"数值算法"(Numerical Algorithm)两个术语在实际应用中常常互相替换使用,但从严格的定义和应用角度来看,它们之间还是存在一些微妙的差异。

数值方法(Numerical Method)

数值方法通常是指用于解决数学问题的一套完整的数学框架或理论,这些数学问题通常无法通过精确的、封闭形式的解来解决。例如,微分方程、线性方程组、积分等问题在某些情况下难以得到精确解,因此需要使用数值方法来近似求解。

数值方法往往包括了对问题的建模、理解其数学性质(如稳定性、精度等)、 选择适当的近似手段等。

数值算法(Numerical Algorithm)

数值算法则更侧重于实现的细节,它是一种具体的、可以通过计算机编程来实 现的操作步骤,用于执行某一数值方法。数值算法考虑了如何高效、准确地进 行数值计算,包括迭代次数、计算复杂性、误差累积等因素。

数值算法可以看作是数值方法的一种实现方式,但一个数值方法可以有多种不同的数值算法。

以求解线性方程组 Ax = b 为例:

- **数值方法:** 可能会涉及使用高斯消元法、矩阵分解(如 LU 分解、QR 分解等)或迭代法(如雅可比迭代、Gauss-Seidel 迭代等)。
- 数值算法:对于高斯消元法,具体的算法可能会涉及到如何进行行交换以避免除以零,或者如何优化存储以减少计算量。

简而言之,数值方法通常更注重理论和数学框架,而数值算法则更侧重于实现和计算效率。两者是密切相关的,但侧重点不同。在解决实际问题时,通常需要综合考虑数值方法和数值算法。

引论

- 研究对象与特点
- 2 数值方法的基本内容

❸ 数值算法及其设计

4 误差分析

利用数学和计算机知识解决实际问题可分为两步:

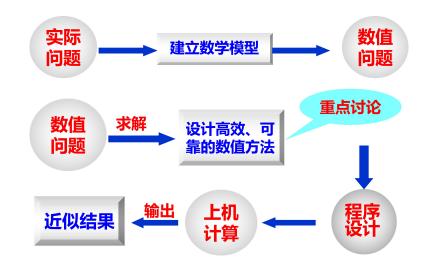
- 1. **建立数学模型:** 需要利用有关专业知识和数学理论,这属于应用数学范围
- 2. **提出数值问题与数值方法:** 将数学模型变成数值问题,进而研究该数值问题的数值方法,并设计有效的数值算法的过程,这属于计算方法的范围

数值问题:

有限个输入数据(问题的自变量、原始数据)与有限个输出数据(待求解数据)之间函数关系的一个明确无歧义的描述。

数值问题的分类:

- 1. 分析问题(连续问题)
- 2. 代数问题 (离散问题)
- 3. 概率与统计问题(随机问题)



什么"数学模型"是"数值问题"

- 1. 求方程 $ax^2 + bx + c = 0$ 的解。 输入a, b, c,则输出数据是根 x_1 和 x_2 ,故是"数值问题"
- 2. 求常微分方程

$$\begin{cases} y' = 2x + 3, \ x \in [0, a] \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

因输入数据为 2 和 3, x = 0和y = 0等,输出是函数解析表达式 $y = x^2 + 3x$,所以,不是"数值问题"。

如何将数学模型变成"数值问题"

将非"数值问题"转化为"数值问题"的方法: 离散化。

例如:将求解 $y = x^2 + 3x$ 的问题变成求

$$y(x_1), y(x_2), y(x_3), \dots, y(x_n)$$

 $0 < x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_n = a$

的问题。即将连续的情况变成在某些点上的值。

Remark: 求函数 $y = x^2 + 3x$ 在某些点的近似函数值是数值问题

数值方法:

将求解"数值问题"的一系列计算公式称为数值方法。也称为计算方法。

计算机数值方法 (数值方法):

指它的一系列计算公式中的运算和数据,必须是可以在计算机上执行。

计算机上可执的运算:四则运算和逻辑运算(与、或、非等)。

Remark: 计算公式不一定都属于计算机数值方法

下面哪些是数值方法?

$$y = 54 \times 2.5 + 100 \tag{1}$$

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{2}$$

$$y = \sin(60^\circ) \tag{3}$$

$$y = \log(5) \tag{4}$$

下面哪些是数值方法?

$$y = 54 \times 2.5 + 100$$
 (1)

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad \times \tag{2}$$

$$y = \sin(60^\circ) \quad \times \tag{3}$$

$$y = \log(5) \quad \times \tag{4}$$

计算机上不能直接执行的运算:

开方、超越函数、极限、微分、积分等 超越函数:三角函数、对数函数,反三角函数,指数函数

几个转化例子

$$e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!}$$

 $y' \approx \frac{y(x+h) - y(x)}{h}$
 $\sin(x) \approx x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!}$

本课程重点是介绍常见的行之有效的计算机数值方法。

引论

- 研究对象与特点
- ② 数值方法的基本内容
- ❸ 数值算法及其设计

4 误差分析

数值算法及其设计

数值算法:

有步骤地完成求解数值问题的过程

数值算法特性:

- 1. 目的性: 算法目的明确,条件和结论均应明确;
- 2. 确定性: 算法必须精确地给出每一步的操作;
- 3. 可执行性: 算法中的每个操作都是可执行的;
- 4. 有穷性: 算法必须在有限步内结束解题过程。
- 5. **通用性:** 算法是针对某一类问题的计算,而不是只适用于解决某个具体例题的计算;

```
牛顿-拉夫逊(Newton-Raphson)迭代法计算开平方:
function y = mysqrt(x)
    guess = x;
    threshold = 1e-9;
    while abs(guess * guess - x) > threshold
        guess = 0.5 * (guess + x / guess);
    end
    y = guess;
end
```

目的性? 确定性? 可执行性? 有穷性? 通用性?

例: 等差数列1,2,3,…,10000的求和算法:

- (1) 取 N = 0, S = 0;
- (2) $N+1 \Rightarrow N, S+N \Rightarrow S$;
- (3) 若 N < 10000 转 (2), 否则, 转 (4);
- (4) 输出 N 和 S

目的性? 确定性? 可执行性? 有穷性? 通用性?

数值算法及其设计

计算机上的算法分类:

- 按求解问题的不同,可分为:
 - 1. 数值算法: 用于求解数值问题的算法
 - 2. 非数值算法: 用于求解非数值问题(公式推导等)的算法
- 按面向计算机的不同, 可分为:
 - 1. 面向串行计算机的串行算法,只有一个进程:
 - 2. 面向并行计算机的并行算法, 含两个以上的进程
- 根据算法内部的特点,可分为:
 - 1. 确定性算法,每完成一步确切知道下一步该做什么
 - 2. 非确定性算法(智能算法)

Remark: 非确定性算法是一种可能产生不同输出(即使输入相同)的算法,或者其内部操作的顺序可能会随机变化。这些算法通常依赖于概率或随机数生成。

MATLAB program

```
\begin{array}{ll} \text{syms } \times \\ \text{f} &= sin(x); \\ \text{df} &= diff(f, x) \end{array}
```

数值算法? 非数值算法?

```
MATLAB program
```

```
% Initialize the vector
original_array = [1, 2, 3, 4, 5];
\% Create an empty vector to store the results
squared_array = zeros(1, length(original_array));
% Use a for—loop for serial computing
for i = 1:length(original_array)
    squared_array(i) = original_array(i)^2;
end
disp('Result from serial computing:');
disp(squared_array);
```

串行算法?并行算法?

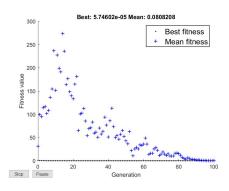
MATLAB program

```
% Initialize the vector
original_array = [1, 2, 3, 4, 5];
\% Create an empty vector to store the results
squared_array = zeros(1, length(original_array));
% Use parfor for parallel computing
parfor i = 1: length (original_array)
    squared_array(i) = original_array(i)^2;
end
disp('Result - from - parallel - computing:');
disp(squared_array);
```

串行算法?并行算法?

MATLAB program

```
\% This function takes a solution vector x
% and returns a scalar value
fitnessFunction = \mathbb{Q}(x) \times (1)^2;
% Set algorithm parameters
\% In this case 1, as we have only one variable x
nVars = 1:
% Set options to plot the best fitness function
options = gaoptimset('PlotFcns', @gaplotbestf);
% Execute the genetic algorithm
[x, fval] = ga(fitnessFunction, nVars, ...
    [], [], [], [], [], options);
% Display the result
fprintf('The optimal solution is x = %.4 f with a function v
```



数值算法及其设计

不同算法及其计算复杂性有很大差异

例如: (对于大型数值问题): 求解20阶线性方程组

- 利用Gramer法则: 需要乘、除法运算次数 9.7×10^{20}
- 利用Gauss消去法求解,只需2670次乘、除法

例如: 排序算法的计算复杂度

冒泡排序: O(n²)

快速排序: 𝒪(nlogn)

数值算法及其设计

算法设计的主要目的:

- 1. 研制可靠性好的数值方法(精度要求)
- 2. 选择计算复杂性好的数值方法(速度快、存贮少)
- 3. 方便编码和软件维护

目前流行的软件开发方法:

- 1. 面向过程的"自顶向下、逐步细化"的结构化方法;
- 2. 面向对象的"自下而上"的组装开发方法,其主要工具是"类"(特殊模块),利用它可组装数值算法和求解程序。

Remark: 本课程只介绍前者

"自顶向下,逐步细化"法,其关键有三个方面:

- 划分模块, 主要原则是模块功能要单一, 即独立性好
- 设计或选择模块算法, 先总体, 后具体
- 充实细节,考虑计算公式的效率和其他要求

例:求解二次方程为例说明算法设计

$$ax^2 + bx + c = 0$$

解上述方程需要考虑三个细节:

- 1. 判别式: $d = b^2 4ab$ 大于零或小于零;
- 2. 当d>0 且 $\sqrt{d}\approx b$ 时,会出现两个近似数相减而影响有效数字的位数;
- 3. 若|a|较|b|和|c|相对小很多时,可能出现舍入误差增大的问题。

数值算法及其设计

在数值软件中,算法常用的表达方法

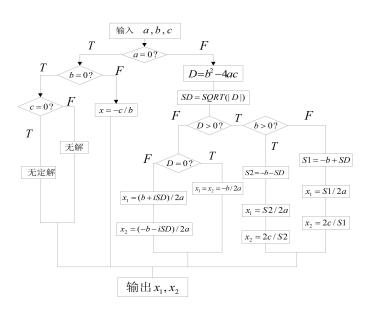
- 自然语言法; 用文字有步骤的表示算法
- 图示法: 又分为"流程图"和"结构化框图"

自然语言法:

$$ax^2 + bx + c = 0$$

- (1) 输入数据a,b,c
- (2) 如果 a = 0, 转 (3), 否则转 (4)
- (3) 如果 $b \neq 0$, 则 $x_1 = -c/b$, 转(7); 否则,无解停止
- (4) 设 $D = b^2 4ac$, SD = SQRT(|D|) 如果 D = 0, $x_1 = x_2 = -b/2a$, 转(7) 如果 D < 0, $x_1 = (-b + iSD)/2a$, $x_2 = (-b iSD)/2a$, 转(7)
- (5) 如果 b > 0 不成立, $S_1 = -b + SD$, $x_1 = S_1/2a$, $x_2 = 2c/S_1$, 转(7)
- (6) $S_2 = -b SD$, $x_1 = S_2/2a$, $x_2 = 2c/S_2$
- (7) 输出 x_1 和 x_2

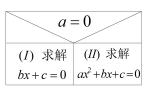
图示法-流程图法



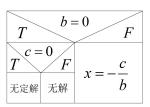
图示法-结构化框图法

1. 顶层设计:

2. 第1层设计: 细化(II)

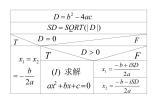


3. 第2层设计: a) 细化 (I)



图示法-结构化框图法

3. 第2层设计: b) 细化 (II)



4. 第3层设计: 细化

T $b>0$ F	
S2 = -b - SD	S1 = -b + SD
$x_1 = S2/2a$	$x_1 = S1/2a$
$x_2 = 2c/S2$	$x_2 = 2c/S1$

引论

● 研究对象与特点

- 2 数值方法的基本内容
- ❸ 数值算法及其设计
- 4 误差分析

误差分析

数值计算中的误差来源

- 1. 模型误差: 从实际问题中抽象出数学模型
- 2. 观测误差: 通过观测得到模型中某些参数(或物理量)的值
- 3. **含入误差**: 由于计算机的字长有限,原始数据在计算机中的表示、运算产生的误差
- 4. 截断误差: 由数学问题化成数值问题产生的误差

例: 若计算机仅能表示6位十进制数,则将表示为

$$\pi^* = 3.14159$$

$$R_1 = \pi - \pi^* = 0.0000026...$$

若将其与数9.21000进行加法运算,得

$$s = 3.14159 + 9.21000 \approx 1.23516 \times 10$$

$$R_2 = 12.3516 - 12.35159 = 0.00001$$

 R_1 和 R_2 都是舍入误差。

计算ex的数值时

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots$$

由算法的有限性, 故利用截断部分和

$$p(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!}$$

来近似代替,由此产生的误差即为截断误差,估计为

$$R_n(x) = e^x - p(x) = \frac{e^{\zeta}}{(n+1)!} x^{n+1}$$

MATLAB 实验: 取 x = 2, n = 10

```
1 - clear
2 - close all
3
4 - x = 2;
5 - S = 1;
6 - for n = 1:10
7 - S = S + 1/ factorial(n)*x^n;
8 - end
9 - R1 = exp - S;
```

运行结果: 7.3890, 而 $e^2 = 7.3891$

若取n = 5, 运行结果: 7.2667

误差的量度

误差的量度

- 1. 绝对误差
- 2. 相对误差
- 3. 有效数字

绝对误差

绝对误差定义:

设 x 为准确值, x^* 为 x 的一个近似值,称

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

为近似值 x^* 的(绝对)误差,简记为E.

此外, 圆周率的近似值 $\pi^* = 3.14$, 绝对误差 E = 0.00159...

一般来说,E的准确值很难求出,只能估计出|E|的某个上界 $\epsilon(x^*)$,即

$$|E(x^*)| = |x^* - x| \le \epsilon(x^*)$$

 $\epsilon(x^*)$ 称为近似值 x^* 的(绝对)误差限,简记为 ϵ .

$$x^* - \epsilon \le x \le x^* + \epsilon(x^*)$$

这个不等式有时可以表示为

$$x = x^* \pm \epsilon(x^*)$$

相对误差

相对误差定义:

近似值 x^* 的误差 E 与准确值 x 之比

$$E_r(x^*) = \frac{E(x^*)}{x} = \frac{x^* - x}{x}$$

为近似值 x^* 的相对误差,简记为 E_r .

 E_r 绝对值的任一上界 $\epsilon_r(x^*)$, 称为相对误差限,简记为 ϵ_r .

$$|E_r(x^*)| = \left|\frac{E(x^*)}{x}\right| = \left|\frac{x^* - x}{x}\right| \le \epsilon_r(x^*)$$

由于x的准确值难以确定,通常利用

$$E_r^* = E_r^*(x^*) = \frac{E_r(x^*)}{x^*}$$

Remark: 绝对误差限与相对误差限不唯一; 它们越小越好。

绝对误差:必须为正?

相对误差:必须为正?

绝对误差:误差可正可负,常常是无限位的

相对误差: 相对误差也可正可负

有效数字

对于准确值x取近似值最常用的方法是采用"四舍五入"的原则。由此产生了一个专有名词一有效数字。

有效数字定义:

如果近似值 x^* 的误差的绝对值不超过某一位数字的半个单位,且该位数字到的第一位非零数字共有 n 位,则称用 x^* (近似 x 时)具有n位有效数字。

设 x 的近似值 x^* 有如下标准形式

$$x^* = \pm 10^m \times 0.x_1 x_2 \cdots x_n x_{n+1} \cdots x_p,$$

其中, m 为正数, $\{x_1\} \in \{0, 1, 2, \dots, 9\}$ 且 $x_1 \neq \{0, p \geq n\}$ 如果使

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

成立的最大整数为 n,则称 x^* 为 x 的具有 n 位有效数字

$$|3.1416 - \pi| = 0.0000074 \dots \le \frac{1}{2} \times 10^{-4} = \frac{1}{2} \times 10^{1-5}$$
$$|3.14 - \pi| = 0.0015 \dots \le \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \frac{1}{2} \times 10^{1-3}$$
$$|3.1415 - \pi| = 0.0000926 \dots \le \frac{1}{2} \times 10^{-3} = \frac{1}{2} \times 10^{1-4}$$

小数点后位数越多,有效数字位数越多?

小数点后位数越多,有效数字位数越多?

$$|3.142 - \pi| = 0.0004 \dots \le \frac{1}{2} \times 10^{-3} = \frac{1}{2} \times 10^{1-4}$$

 $|3.1415 - \pi| = 0.0000926 \dots \le \frac{1}{2} \times 10^{-3} = \frac{1}{2} \times 10^{1-4}$

近似值的有效数字与相对误差之间的关系

设 x^* 是 x 的近似值,它的表达式为

$$x^* = \pm 10^m \times 0.x_1 x_2 \cdots x_n$$

则 x^* 的有效位数和 x^* 的相对误差之间的关系如下:

1. 若 x^* 具有 n 位有效数字,则 x^* 的相对误差 E_x^* 满足

$$|E_r^*| \le \frac{1}{2} \times 10^{-n+1}$$

2. 若 x^* 的相对误差 E_r^* 满足

$$|E_r^*| \le \frac{1}{2} \times 10^{-n}$$

则 x^* 至少具有 n 位有效数字。(证明P19)

Remark: 近似值的有效位数越多,即 n 越大,相对误差(或限)就越小。反之,相对误差(或限)就越小,n就可能越大,有效数字位数就可能越多。

例: 设 x = 1.986, $x^* = 1.98$, 则

$$|1.986 - 1.98| = 0.006 \le \frac{1}{2} \times 10^{-1}$$

x* 有2位有效数字。

$$|E_r^*(x^*)| = \left|\frac{x^* - x}{x^*}\right| = \frac{|1.986 - 1.98|}{1.98} \le \frac{1}{2} \times 10^{-2} < \frac{1}{2} \times 10^{-2+1}$$

另一方面:

$$|E_r^*(x^*)| \le \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

x*至少有2位有效数字。

Remark: 上界 $\frac{1}{2} \times 10^{-2+1}$ 并不是最小的。

误差分析

数值方法的稳定性与算法设计原则

- 1. 设计和选择算法<mark>首要关心</mark>的问题是精度要求,要建立一些定性分析准则用于判断结果的可靠性,这是<mark>数值稳定性问题</mark>。
- 2. 对于一个数值方法,若对原始数据或某一步有舍入误差,在执行过程中, 这些误差能得到控制,则称<mark>该数值方法稳定</mark>。否则,称为不稳定的。
- 3. 利用两种数值方法A和B解输入和舍入误差规则相同的同一问题,若用A发比B法得到的计算解精度更高,则称A法比B法具有较大的稳定性。

例: 计算积分
$$I_n = \frac{1}{e} \int_0^1 x^n e^x dx$$
, $n = 0, 1, 2, \dots, 15$

解:由于

$$e = \int_0^1 (x^n e^x)' dx = \int_0^1 x^n e^x dx + n \int_0^1 x^{n-1} e^x dx$$

所以

$$I_n = 1 - nI_{n-1} (1)$$

 I_0 ?

方法一: 使用公式 (1)先计算 I_0 , 然后依次计算 $I_1, I_2, \cdots I_{15}$

$$I_{0} = \frac{1}{e} \int_{0}^{1} e^{x} dx = 1 - \frac{1}{e} \approx 0.63212056$$

$$I_{1} = 1 - I_{0} = 0.36787944$$

$$\vdots$$

$$I_{10} = 1 - 10I_{9} = 0.08812800$$

$$I_{11} = 1 - 11I_{10} = 0.03059200$$

$$I_{12} = 1 - 12I_{11} = 0.63289600$$

$$I_{13} = 1 - 13I_{12} = -7.2276480$$

$$I_{14} = 1 - 14I_{13} = 94.959424$$

$$I_{15} = 1 - 15I_{14} = -1423.3914$$

Remark: 初始误差 $|E_0| < 0.5 \times 10^{-8}$, 然而 $|E_n| = n! |E_0|$

方法二: 使用公式
$$I_{n-1}=rac{1-I_n}{n}$$
,先计算 I_{15} ,然后依次计算 I_{14},\cdots,I_1,I_0

$$I_{15} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{16e} - \frac{1}{16} \right) \approx 0.042746233$$

$$I_{14} = \frac{1}{15} (1 - I_{15}) = 0.063816918$$

$$I_{13} = \frac{1}{14} (1 - I_{14}) = 0.066870220$$

$$\vdots$$

$$I_{1} = \frac{1}{2} (1 - I_{2}) = 0.036787944$$

$$I_1 = \frac{1}{2}(1 - I_2) = 0.036787944$$

$$I_0 = \frac{1}{1}(1 - I_1) = 0.63212056$$

因此, 方法一为不稳定算法, 而方法二为稳定算法。

在我们今后的讨论中,误差将不可回避,算法的稳定性将会是一个非常重要的 话题。

蝴蝶效应

<mark>蝴蝶效应</mark>是气象学家洛伦兹1963年提出来的。其大意为:一只南美洲亚马孙河流域热带雨林中的蝴蝶,偶尔扇动几下翅膀,可能在两周后引起美国德克萨斯引起一场龙卷风。

蝴蝶效应在社会学界用来说明:一个坏的微小的机制,如果不加以及时地引导、调节,会给社会带来非常大的危害,戏称为"龙卷风"或"风暴"

例: 求线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = \frac{11}{6} \\ \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{3}x_2 + \frac{1}{4}x_3 = \frac{13}{12} \\ \frac{1}{3}x_1 + \frac{1}{4}x_2 + \frac{1}{5}x_3 = \frac{47}{60} \end{cases}$$

其精确解为

$$x_1 = x_2 = x_3 = 1$$

但是, 若对数据取3位有效数字, 利用 Gauss 消去法求解, 则计算解:

$$x_1 \approx 1.09, x_2 \approx 0.0488, x_3 \approx 0.491$$

同样对方程

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 1\\ 4x_1 + 2 + 5x_3 = 4\\ 2x_1 + 2x_3 = 6 \end{cases}$$

利用 Gauss 消去法, 取 3 位有效数字,则得到准确解:

$$x_1 = 9, x_2 = -1, x_3 - 6$$

- 1. "数值问题"计算解的精度,不但与数值方法的稳定有关,而且还与数值问题的性态好坏有关。
- 2. 在数值问题中,若输出数据对输入数据的扰动(误差)很敏感(小的变化 会引起较大的变化),称这类数值问题为病态问题;否则称为良态问题。

选用计算公式和设计算法时的普遍原则

一. 四则运算中的稳定性问题

1. 防止大数吃小数

$$0.3684676 + 10^7 \times 0.6327544 + 0.4932001 + 0.4800100 = 10^7 \times 0.6327544$$

预防方法: 先加小数, 由小到大逐次相加

$$0.3684676 + 0.4800100 + 0.4932001 + 10^{7} \times 0.6327544 = 10^{7} \times 0.6327545$$

- 2. 要避免两个相近数相减相近数相减为。 相近数相减会严重损失有效数值的位数 $1-\cos(x)$ 可改为 $2\sin^2(x/2)$
- 3. 避免小数作除数和大数作乘法 这样可避免误差放大

选用计算公式和设计算法时的普遍原则

二. 提高算法效率问题

1. 尽量减少运算次数:

$$x^{255} = x \times x^2 \times x^4 \times x^8 \times x^{16} \times x^{32} \times x^{64} \times x^{128}$$

254次乘法 ⇒ 14次乘法

例: 计算
$$p_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + a_{n-2} x^{n-2} + \dots + a_1 x + a_0$$

直接计算需要n(n+1)/2次乘法和n次加法若将公式变成递推公式:

$$\begin{cases} s_n = a_n \\ s_k = x s_{k+1} + a_k, k = n - 1, n - 2, \dots, 1, 0 \\ p_n(x) = s_0 \end{cases}$$

后,再计算 $p_n(x)$,只需做 n 次乘法和 n 次加法。 充分利用递推公式,可提高算法效率。

选用计算公式和设计算法时的普遍原则

2. 充分利用耗时少的运算 例如: k + k 比 2k, a * a 比 a^2 , b * 0.25 比 b/4 等节省时间。

- 3. 充分利用存贮空间
 - 节省原始数据的存贮单元;
 - 节省工作单元。

例如: S = SPARSE(X) converts a sparse or full matrix to sparse form by squeezing out any zero elements.

选用计算公式和设计算法时的普遍原则