数值方法

----截断误差与泰勒级数

秦 品 乐

中北大学大数据学院

截断误差

截断误差是由于用近似过程代替准确过程而产生的误差，如伞兵下降问题。

$$\frac{dv}{dt} \cong \frac{\Delta v}{\Delta t} = \frac{v(t_{1+i})-v(t_i)}{t_{i+1}-t_i}$$

由于差分方程仅仅是对导数真值的近似，所以将截断误差引入到数值解中。

为了深入了解这种误差的特点，我们借助数值方法中用以近似表示函数的数学公式：泰勒级数(Taylor series)

泰勒定理的理解

泰勒定理

在包含a和x的区间上，如果一个函数f及其前n+1阶导数都是连续的，那么函数在x处的值可以表示为如下形式：

$$\mathrm{f(x)=f(a)+f'}(a)(x-a)+\frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2$$

$$+\frac{f^{(3)}(a)}{3!}(x-a)^3+\cdots$$

$$+\frac{f(n)^{(a)}}{n!}(x-a)^n+R_n$$

其中Rn是余项，有多种表示形式，如皮亚诺余项，拉格朗日余项，积分余项等等。

泰勒定理的理解

其中积分形式的余项表达式为：

$$\mathrm{R}_{\mathrm{n}} = \int_a^x \frac{(x-t)^n}{n!} f^{(n+1)}(t)dt$$

拉格朗日余项形式表达式为：

$$\mathrm{R}_{\mathrm{n}} = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-a)^{n+1}$$

泰勒定量中余项的推导

一阶积分中值定理：在包含a和x的区间上，如果函数g是连续的那么，在a和x之间必存在一个点ξ ，使下式成立。

$$\int_a^x g(t)dt = g(\xi)(x-a)$$

二阶积分定理：在区间[a,x]上，如果函数g和h均为连续可积的，并且h在该区间上符号恒定不变，那么在a和x之间必存一数，使下式成立

$$\int_a^x g(t)h(t)dt = g(\xi)\int_a^x h(t)dt$$

从工程中理解泰勒级数

泰勒定理和泰勒级数在数值方法的研究中具有重要的价值。从本质上讲，泰勒级数可以根据函数在某一点的函数值和导数值来预测函数在另一点的值。尤其是，泰勒定理指出，任何光滑函数都可以用多项式来逼近。

深入了解泰勒级数的一种有效方式是逐项建立泰勒级数，如级数的第一项为（表示0阶近似）：

$$f(x_{i+1}) \cong f(x_i)$$

实例

当 $x_i = 0, h = 1$(表示步长) 时，用零阶到四阶泰勒级数展开式来逼近下面的函数，即，预测函数在 $x_{i+1} = 1$ 处的函数值。

$$f(x) = 0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$$

结论：n阶多项式的n阶泰勒级数展开得到的结果将是准确的。

用泰勒级数估计截断误差

泰勒级数对于估计截断误差极其有用，如何将泰勒级数展开式实际运用于数值方法？

用泰勒级数估计截断误差

以伞兵跳伞为例

$$v(t_{i+1})=v(t_i)+v'(t_i)(t_{i+1}-t_i)+\frac{v''(t_i)}{2!}(t_{i+1}-t_i)^2+\cdots+R_n$$

现在，截去上式一阶导数项以后的各项

$$v(t_{i+1})=v(t_i)+v'(t_i)(t_{i+1}-t_i)+R_1$$

$$\Downarrow$$

$$v'(t_i)=\underbrace{\frac{v(t_{i+1})-v(t_i)}{t_{i+1}-t_i}}_{\text{一阶逼近}}+\underbrace{\frac{R_1}{t_{i+1}-t_i}}_{\text{截断误差}}$$

用泰勒级数估计截断误差

由于采用的是泰勒级数逼近函数，泰勒级数的余项表达式可知

$$\frac{R_1}{t_{i+1}-t_i}=\frac{v''(\xi)}{2!}(t_{i+1}-t_i)$$

可见截断误差与步长是成正比的，同理推得如果是二阶逼近的话，截断误差是与长步的平方成正比的，以此类推：误差与步长的**n**次方成正比。

数值微分

上面伞兵问题在数值方法中称为有限差商，可以一般化表示为

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} + O(x_{i+1} - x_i)$$

或

$$f'(x_i) = \frac{\Delta f_i}{h} + O(h)$$

h称为步长，分子称为一阶前向差分。

数值微分

由泰勒级数推导在数值上逼近导数的差商还有很多形式，如**后向差商逼近**和**中心差商逼近**

一阶后向差商逼近：可以将泰勒级数向后展开，从而根据函数当前值计算其前一个值。如

$$\mathrm{f}(\mathrm{x}_{i-1})=\mathrm{f}(\mathrm{x}_i)-\mathrm{f}'(x_i)h+\frac{f''(x_i)}{2!}h^2-\cdots$$

截去上面方程中一阶导数以后各项，重新整理可得

$$f'(x_i)\cong\frac{f(x_i)-f(x_{i-1})}{h}$$

误差的阶为 $O(h)$

数值微分

一阶导数的中心差商逼近：前向泰勒展开-后向泰勒展开

一阶后向差商逼近：可以将泰勒级数向后展开，从而根据函数当前值计算其前一个值。如

$$\mathrm{f}(\mathrm{x}_{i+1})=\mathrm{f}(\mathrm{x}_{i-1})+2\mathrm{f}'(\mathrm{x}_i)\mathrm{h}+\frac{2\mathrm{f}^{(3)}(\mathrm{x}_i)}{3!}h^3+\cdots$$

变换后可得

$$f'(x_i)=\frac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{2h}-\frac{f^{(3)}(x_i)}{6}h^2-\cdots=\frac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{2h}-O(h^2)$$

数值微分

一阶导数的前向差商逼近：
一阶导数的后向差商逼近：
步长减半，误差减为原来的二分之一

一阶导数的中心差商逼近：步长减半，误差减为原来的四分之一

实例

用前、后、中心三种差商逼近下式的一阶导数：

$$f(x) = -0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$$

估计点为x=0.5,步长为h=0.5。用h=0.25重复计算。

误差的传播

自变量的误差对函数值的影响

$$\Delta f(\tilde{x}) = \left| f(x) - f(\tilde{x}) \right|$$

f(x)未知，如何求？

如果**x**的估计接近**x**，并且函数连续可微，就可以采用泰勒逼近解决上述问题，如下：

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

$$f(x) - f(\tilde{x}) \cong f'(\tilde{x})(x-\tilde{x})$$

实例

给定一个值 $\tilde{x}=2.5$ ，其误差为$\Delta\tilde{x}=0.01$，估计由此导致的函数值 $f(x)=x^3$ 的误差

解：

$$\Delta f(\tilde{x})\cong f'(\tilde{x})(x-\tilde{x})=3(2.5)^2(0.01)=0.1875$$

由于f(2.5)=15.625

f(2.5)=15.625±0.1875

稳定性与稳定条件

如果输入值的不确定性通过数值方法在总体上是放大的，就称一个计算在数值上是不稳定的。

可以用下面的一阶泰勒级数表示这些概念：

$$f(x) \cong f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})(x-\tilde{x})$$

可以用该关系式估计$f(x)$的相对误差，如下：

$$\frac{f(x)-f(\tilde{x})}{f(x)} = \frac{f'(\tilde{x})(x-\tilde{x})}{f(x)}$$

x的相对误差由下式给出：$\dfrac{(x-\tilde{x})}{\tilde{x}}$

相对误差之比=$\dfrac{\tilde{x}f'(\tilde{x})}{f(x)}$

比值等于1，说明相对误差相等，小于1说明函数相对误差减小，大于1说明相对误差增大，如果非常大，函数是病态的。

总数值误差

总数值误差是截断误差与舍入误差之和。最小化舍入误差可以通过增加计算机的有效数字的个数，计算次数的增加或减性抵消会增大舍入误差；从分析实例中可以看到减小步长，可以减小截断误差，但减小步长会增大计算量，从而增大舍入误差，所以有矛盾的地方，可根据实际来确定如何操作。

误差分析是一门艺术，在许多工程中，误差估计都基于工程师的经验和判断。但可以给出几种实用的编程准则：

1. 避免两个大致相等的数相减。(解决办法：扩大精度或对问题进行变换)。
2. 当对数进行加减运算时，最好将数排序，让较小的数先计算避免有效数字的丢失。
3. 当涉及人的生命和重大经济问题，多组独立进行，比较结果