

0.1 数值计算的误差

用计算机解决科学计算问题首先要建立数学模型,它是对被描述的实际问题进行抽象、简化而得到的,因而是近似的.我们把数学模型与实际之间出现的这种误差称为**模型误差**.只有实际问题提法正确,建立数学模型时又抽象、简化得合理,才能得到好的结果.

由于这种误差难于用数量表示,通常都假定数学模型是合理的,这种误差可忽略不计,在“数值分析”中不予讨论.在数学模型中往往还有一些根据观测得到的物理量,如温度、长度、电压等,这些参量显然也包含误差.这种由观测产生的误差称为**观测误差**,在“数值分析”中也不讨论这种误差.数值分析只研究用数值方法求解数学模型产生的误差.

当数学模型不能得到精确解时,通常要用数值方法求它的近似解,其近似解与精确解之间的误差称为**截断误差**或**方法误差**.

定义 0.1 (误差和误差限)

设 x 为准确值, x^* 为 x 的一个近似值, 称 $e^* = x^* - x$ 为近似值的**绝对误差**, 简称**误差**.

误差 e^* 绝对值的一个上界 ε^* 叫做近似值的**绝对误差限**或**误差限**, 它总是正数.

对于一般情形, $|x^* - x| \leq \varepsilon^*$, 即

$$x^* - \varepsilon^* \leq x \leq x^* + \varepsilon^*$$

这个不等式有时也表示为 $x = x^* \pm \varepsilon^*$.

定义 0.2 (相对误差和相对误差限)

x 本身的大小. 我们把近似值的误差 e^* 与准确值 x 的比值

$$\frac{e^*}{x} = \frac{x^* - x}{x}$$

称为近似值 x^* 的**相对误差**, 记作 e_r^* . 在实际计算中, 通常取

$$e_r^* = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}.$$

相对误差也可正可负, 它的绝对值上界叫做**相对误差限**, 记作 ε_r^* , 即 $\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon^*}{|x^*|}$.

注 相对误差与相对误差限是无量纲的, 而绝对误差与误差限是有量纲的.

注 相对误差 e_r^* 取 $\frac{e^*}{x^*}$ 的原因: 在实际计算中, 由于真值 x 总是不知道的, 通常取

$$e_r^* = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$$

作为 x^* 的相对误差, 条件是 $e_r^* = \frac{e^*}{x^*}$ 较小, 此时

$$\frac{e^*}{x} - \frac{e^*}{x^*} = \frac{e^*(x^* - x)}{x^*x} = \frac{(e^*)^2}{x^*(x^* - e^*)} = \frac{(e^*/x^*)^2}{1 - (e^*/x^*)}$$

是 e_r^* 的平方项级, 故可忽略不计.

例题 0.1 当准确值 x 有多位数时, 常常按四舍五入的原则得到 x 的前几位近似值 x^* , 例如

$$x = \pi = 3.14159265 \cdots$$

取 3 位 $x_3^* = 3.14, \varepsilon_3^* \leq 0.002$,

取 5 位 $x_5^* = 3.1416, \varepsilon_5^* \leq 0.000008$,

定义 0.3 (有效数字)

若近似值 x^* 的误差限是某一位的半个单位, 该位到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位, 就说 x^* 有 n 位有效数字. 它可表示为

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

其中 $a_i (i = 1, 2, \cdots, n)$ 是 0 到 9 中的一个数字, $a_1 \neq 0, m$ 为整数, 且

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



例题 0.2 按四舍五入原则写出下列各数的具有 5 位有效数字的近似数: 187.9325, 0.03785551, 8.000033, 2.7182818.

解 按定义, 上述各数的具有 5 位有效数字的近似数分别是

$$187.93, 0.037856, 8.0000, 2.7183$$

注意 $x = 8.000033$ 的 5 位有效数字近似数是 8.0000 而不是 8, 因为 8 只有 1 位有效数字. □

例题 0.3 如果以 m/s^2 为单位, 重力常数 $g \approx 9.80 \text{ m/s}^2$; 若以 km/s^2 为单位, $g \approx 0.00980 \text{ km/s}^2$, 它们都具有 3 位有效数字, 因为按第一种写法

$$|g - 9.80| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

根据 (1) 式, 这里 $m = 0, n = 3$; 按第二种写法

$$|g - 0.00980| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-5}$$

这里 $m = -3, n = 3$. 它们虽然写法不同, 但都具有 3 位有效数字. 至于绝对误差限, 由于单位不同结果也不同, $\varepsilon_1^* = \frac{1}{2} \times 10^{-2} \text{ m/s}^2, \varepsilon_2^* = \frac{1}{2} \times 10^{-5} \text{ km/s}^2$. 而相对误差相同, 因为

$$\varepsilon_r^* = 0.005/9.80 = 0.000005/0.00980.$$

笔记 这个例题说明有效位数与小数点后有多少位数无关.

定理 0.1

设近似数 x^* 表示为

$$x^* = \pm 10^m \times (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_l \times 10^{-(l-1)})$$

其中 $a_i (i = 1, 2, \cdots, l)$ 是 0 到 9 中的一个数字, $a_1 \neq 0, m$ 为整数. 若 x^* 具有 n 位有效数字, 则其绝对误差限

$$\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}.$$

反之, 若 x^* 的绝对误差限 $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$, 则 x^* 具有 n 位有效数字.



笔记 这个定理说明, 在 m 相同的情况下, n 越大则 10^{m-n+1} 越小, 故有效位数越多, 绝对误差限越小.

证明 从 (2) 式可得到具有 n 位有效数字的近似数 x^* , 其绝对误差限为

$$\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}.$$

反之, 若 x^* 的绝对误差限 $\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$, 则

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

故 x^* 具有 n 位有效数字. □

定理 0.2

设近似数 x^* 表示为

$$x^* = \pm 10^m \times (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_l \times 10^{-(l-1)}), \quad (3)$$

其中 $a_i (i = 1, 2, \dots, l)$ 是 0 到 9 中的一个数字, $a_1 \neq 0, m$ 为整数. 若 x^* 具有 n 位有效数字, 则其相对误差限

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

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



笔记 这个定理说明, 有效位数越多, 相对误差限越小.

证明 由 (3) 式可得

$$a_1 \times 10^m \leq |x^*| < (a_1 + 1) \times 10^m$$

当 x^* 具有 n 位有效数字时

$$\varepsilon_r^* = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{0.5 \times 10^{m-n+1}}{a_1 \times 10^m} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$$

反之, 由

$$|x - x^*| = |x^*| \varepsilon_r^* < (a_1 + 1) \times 10^m \times \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-n+1} = 0.5 \times 10^{m-n+1}$$

故 x^* 至少具有 n 位有效数字. 证毕. □

定理 0.3

设两个近似数 x_1^* 与 x_2^* 的误差限分别为 $\varepsilon(x_1^*)$ 及 $\varepsilon(x_2^*)$, 则它们进行加、减、乘、除运算得到的误差限分别满足不等式

$$\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) \leq \varepsilon(x_1^*) + \varepsilon(x_2^*),$$

$$\varepsilon(x_1^* x_2^*) \leq |x_1^*| \varepsilon(x_2^*) + |x_2^*| \varepsilon(x_1^*),$$

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



证明 □

定理 0.4

1. 设 $f(x)$ 是一元可微函数, x 的近似值为 x^* , 以 $f(x^*)$ 近似 $f(x)$, 其误差界记作 $\varepsilon(f(x^*))$, 则函数的误差限

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)| \varepsilon(x^*).$$

2. 设 f 为多元函数时, 令 $A = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$. 如果 x_1, x_2, \dots, x_n 的近似值为 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$, 记 A 的近似值为 $A^* = f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$, 则 A^* 的误差 $e(A^*)$ 为

$$e(A^*) = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* e_k^*.$$

A^* 的误差限

$$\varepsilon(A^*) \approx \sum_{k=1}^n \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \right| \varepsilon(x_k^*). \quad (4)$$

而 A^* 的相对误差限为

$$\varepsilon_r^* = \varepsilon_r(A^*) = \frac{\varepsilon(A^*)}{|A^*|} \approx \sum_{k=1}^n \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \right| \frac{\varepsilon(x_k^*)}{|A^*|}.$$



证明

1. 由泰勒展开

$$f(x) - f(x^*) = f'(x^*)(x - x^*) + \frac{f''(\xi)}{2}(x - x^*)^2, \quad \xi \text{ 介于 } x, x^* \text{ 之间},$$

取绝对值得

$$|f(x) - f(x^*)| \leq |f'(x^*)|\varepsilon(x^*) + \frac{|f''(\xi)|}{2}\varepsilon^2(x^*).$$

假定 $f'(x^*)$ 与 $f''(x^*)$ 的比值不太大, 可忽略 $\varepsilon(x^*)$ 的高阶项, 于是可得计算函数的误差限

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)|\varepsilon(x^*).$$

2. 由泰勒展开得函数值 A^* 的误差 $e(A^*)$ 为

$$\begin{aligned} e(A^*) &= A^* - A = f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) - f(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ &\approx \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_k} \right) (x_k^* - x_k) = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* e_k^*, \end{aligned}$$

于是误差限

$$\varepsilon(A^*) \approx \sum_{k=1}^n \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \right| \varepsilon(x_k^*),$$

而 A^* 的相对误差限为

$$\varepsilon_r^* = \varepsilon_r(A^*) = \frac{\varepsilon(A^*)}{|A^*|} \approx \sum_{k=1}^n \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \right| \frac{\varepsilon(x_k^*)}{|A^*|}.$$

□

例题 0.4 已测得某场地长 l 的值为 $l^* = 110$ m, 宽 d 的值为 $d^* = 80$ m, 已知 $|l - l^*| \leq 0.2$ m, $|d - d^*| \leq 0.1$ m. 试求面积 $s = ld$ 的绝对误差限与相对误差限.

解 因 $s = ld$, $\frac{\partial s}{\partial l} = d$, $\frac{\partial s}{\partial d} = l$, 由 (4) 式知

$$\varepsilon(s^*) \approx \left| \left(\frac{\partial s}{\partial l} \right)^* \right| \varepsilon(l^*) + \left| \left(\frac{\partial s}{\partial d} \right)^* \right| \varepsilon(d^*),$$

其中

$$\left(\frac{\partial s}{\partial l} \right)^* = d^* = 80 \text{ m}, \quad \left(\frac{\partial s}{\partial d} \right)^* = l^* = 110 \text{ m}.$$

而 $\varepsilon(l^*) = 0.2$ m, $\varepsilon(d^*) = 0.1$ m, 于是绝对误差限

$$\varepsilon(s^*) \approx 80 \times (0.2) + 110 \times (0.1) = 27 \text{ (m}^2\text{)},$$

相对误差限

$$\varepsilon_r(s^*) = \frac{\varepsilon(s^*)}{|s^*|} = \frac{\varepsilon(s^*)}{l^* d^*} \approx \frac{27}{8800} = 0.31\%.$$

□