数值误差的避免 1

求平均的误差

N 数平均的误差来源于求和、除以 N 两个过程; 在 N 较大时, 除以大数所引入的误差相对较小, 此时求和的误差占主要成分。

两数相加时,引入的相对误差为机器精度 $\frac{\epsilon_{\mathcal{Y}}}{2}$; 记 $x_0 = \max |x_i|$, 考虑最坏的情况,即可能的误差 最大值,这一情形在每个 $x_i \to x_0$ 时取到。不妨设 x_i 均为正数,此时求和的上限为:

$$f \circ f \circ \cdots \circ f(x_0) \equiv f^{N-1} \circ (x_0), \quad f(x) = (x + x_0) \left(1 + \frac{\epsilon_M}{2} \right)$$
 (1.1)

这里 f 是每次数值求和操作的函数表示。

作用于 x ₀	$\mathcal{O}(1)$ 项	$\mathcal{O}(rac{\epsilon_M}{2})$ 系数
$f^0 = 1$	x_0	0
f^1	$2x_0$	$2x_0$
f^2	$3x_0$	$5x_0$
:	:	:
f^k	$x_0 + kx_0$	c_k

f 的作用规律: 先加 x_0 , 再乘以 $\left(1+\frac{\epsilon_M}{2}\right)$

考察 $\frac{\epsilon_{M}}{2}$ 的系数,设 f^{k} 作用后的 $\frac{\epsilon_{M}}{2}$ 系数为 c_{k} ,则不难发现:

$$c_k = c_{k-1} + x_0 + kx_0 (1.2)$$

其中 kx_0 源于前一步 $\mathcal{O}(1)$ 项的系数。已知 $c_0=0$,展开此递推关系,即得:

$$c_{N-1} = \frac{(N+2)(N-1)}{2} x_0,$$

$$\epsilon_M = (N+2)(N-1) \epsilon_M + N \epsilon_M$$
(1.3)

均值的误差限: $\frac{1}{N} \cdot c_{N-1} \frac{\epsilon_M}{2} = \frac{(N+2)(N-1)}{2N} \frac{\epsilon_M}{2} \max |x_i| \sim \frac{N}{2} \frac{\epsilon_M}{2} \max |x_i|$

方差计算的稳定性 1.2

两种方差计算公式如下:

$$S^{2} = \frac{1}{N-1} \left\{ \sum_{i} x_{i}^{2} - N\bar{x}^{2} \right\}$$

$$= \frac{1}{N-1} \sum_{i} (x_{i} - \bar{x})^{2}$$
(1.4a)

沿用前文给出的估计办法,可以给出两式的误差限;有:

$$e_{(a)} \sim S^2 \frac{\epsilon_M}{2} + \left\{ \frac{N}{2} \frac{\epsilon_M}{2} \max |x_i|^2 + \frac{N}{2} \frac{\epsilon_M}{2} \max |x_i| \times 2 \right\}$$

$$= \left(S^2 + \frac{N}{2} \max |x_i|^2 + N \max |x_i| \right) \frac{\epsilon_M}{2}, \qquad (1.5)$$

$$e_{(b)} \sim \frac{N}{2} \frac{\epsilon_M}{2} \max |x_i - \bar{x}|^2$$

可见,多数情况下第一式 (1.4a) 将带来较大误差;特别是在 x_i 很大但方差却很小的情况下,此时 将产生大数相消,从而大量损失有效数字。相比之下,第二式 (1.4b) 较为稳定和准确。

递归计算的稳定性 1.3

考察 $I_n = \int_0^1 \mathrm{d}x \, \frac{x^n}{x+5}$, 首先有 $I_0 = \ln(x+5)\big|_0^1 = \ln\frac{6}{5}$, 而:

$$I_k + 5I_{k-1} = \int_0^1 dx \, \frac{x^k + 5x^{k-1}}{x+5} = \int_0^1 dx \, x^{k-1} = \frac{x^k}{k} \Big|_0^1 = \frac{1}{k}, \quad k = 1, 2, \dots$$
 (1.6)

从而可以递归地给出 I_k 的值。

关注这一过程的误差传递,设计算值 $\hat{I}_{k-1} = I_{k-1} + \epsilon_{k-1}$,则相应地:

$$\hat{I}_k \sim \left(\frac{1}{k} - 5\hat{I}_{k-1}\right) \left(1 + \frac{\epsilon_M}{2}\right)$$

$$\sim I_k - 5\epsilon_{k-1} + I_k \frac{\epsilon_M}{2} \tag{1.7}$$

$$\sim I_k - 5\epsilon_{k-1} + I_k \frac{\epsilon_M}{2} \tag{1.7}$$

即有:
$$\epsilon_k \sim -\left(\frac{5}{I_k}\right)\epsilon_{k-1}+\frac{\epsilon_M}{2}$$
系数 $\kappa=|5/I_k|$ 是关键;若 $\kappa<1$,则误差将得到控制,不会进一步放大。

然而,不幸的是,本问题中的 $I_n < I_0 < 1$,即始终有 $\kappa > 1$,初始误差 ϵ 将随递归过程不断(指数) 放大, 可见这一算法是不稳定的。