第一章 误差

误差是衡量某一个物理量的真实值与计算值之间的差异。真实值往往不可得，因此怎样去研究误差从而为实际服务是至关重要的。计算数学家为此提供了一套衡量误差好坏的标准。

1. 误差的来源和分类

- 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。数学模型与实际问题之间出现的误差称为模型误差。
- 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、电压等等，这些量显然也包含误差。这种由观测产生的误差称为观测误差。

■ 以上两种误差不在“数值分析”的讨论范围。数值分析只研究用数值方法求解数学模型产生的误差。

数值分析中的误差

- 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。由算法造成的近似解与精确解之间的误差称为截断误差（方法误差）。
- 有了计算公式后，在用计算机做数值计算时，受计算机字长限制等非数值算法因素的影响也会产生误差，这种误差称为舍入误差。

■有些数值方法的截断误差在理论上可以无限小，但是舍入误差总是有限制的。数值分析中的误差主要考虑数学模型建立后的误差，也即截断误差和舍入误差。

例：近似计算 $\int_0^1 e^{-x^2}dx = 0.747\ldots\ldots$

解法之一：将 e^{-x^2} 作Taylor展开后再积分

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx = \int_0^1 \left(1 - x^2 + \frac{x^4}{2!} - \frac{x^6}{3!} + \frac{x^8}{4!} - \cdots\right) dx$$

$$= \underbrace{1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{2!}\times\frac{1}{5} - \frac{1}{3!}\times\frac{1}{7}}_{S_4} + \underbrace{\frac{1}{4!}\times\frac{1}{9} - \cdots}_{R_4}$$

取 $\int_0^1 e^{-x^2}dx \approx S_4$ ， S_4 R_4 /* Remainder */

则 $R_4 = \frac{1}{4!}\times\frac{1}{9} - \frac{1}{5!}\times\frac{1}{11} + \cdots$ 称为截断误差 /* Truncation Error */

这里 $|R_4| < \frac{1}{4!}\times\frac{1}{9} < 0.005$

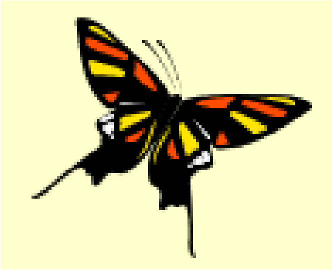
$$S_4 = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{10} - \frac{1}{42} \approx 1 - 0.333 + 0.1 - 0.024 = 0.743$$

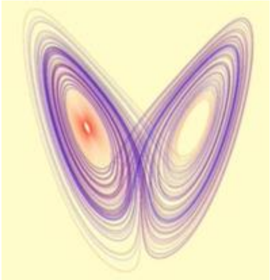
| 舍入误差 /* Roundoff Error */ | $< 0.0005 \times 2 = 0.001$

| 计算 $\int_0^1 e^{-x^2}dx$ 的总体误差 | $< 0.005 + 0.001 = 0.006$

2. 误差传播与积累

例： 蝴蝶效应 ---亚马逊河的一致蝴蝶煽动几下翅膀，可以在一段时间后引起南海的一场龙卷风。





大家思考下，蝴蝶效应中的蝴蝶是造成“龙卷风”的原因吗?

千丈之堤，以蝼蚁之穴溃；百尺之室，以突隙之炽焚。

--- 《韩非子·喻老》

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

公式一： $I_n = 1 - n\, I_{n-1}$

$$I_0 = \frac{1}{e}\int_0^1 e^x dx = 1 - \frac{1}{e} \approx 0.63212056 \overset{\text{记为}}{=\!=} I_0^*$$

注意此公式精确成立

则初始误差 $|E_0| = |I_0 - I_0^*| < 0.5\times 10^{-8}$

$$\frac{1}{e}\int_0^1 x^n \cdot e^0\, dx < I_n < \frac{1}{e}\int_0^1 x^n \cdot e^1\, dx \qquad \therefore \frac{1}{e(n+1)} < I_n < \frac{1}{n+1}$$

$$I_1^* = 1 - 1\cdot I_0^* = 0.36787944$$

$\ldots\ldots\ldots\ldots$

$$I_{10}^* = 1 - 10\cdot I_9^* = 0.08812800$$

$$I_{11}^* = 1 - 11\cdot I_{10}^* = 0.03059200$$

$$I_{12}^* = 1 - 12\cdot I_{11}^* = 0.63289600 \; ?$$

$$I_{13}^* = 1 - 13\cdot I_{12}^* = -7.2276480 \; ??$$

$$I_{14}^* = 1 - 14\cdot I_{13}^* = 94.959424 \; ?!$$

$$I_{15}^* = 1 - 15\cdot I_{14}^* = -1423.3914 \; !!$$

What happened ?!

考察第n步的误差 $|E_n|$

$$|E_n| = |I_n - I_n^*| = |(1-nI_{n-1}) - (1-nI_{n-1}^*)| = n|E_{n-1}| = \cdots = n!|E_0|$$

可见初始的小扰动 $|E_0| < 0.5\times10^{-8}$ 迅速积累，误差呈递增走势。

造成这种情况的是不稳定的算法，这种算法不好，我们有责任改变。

公式二： $I_n = 1 - n\,I_{n-1} \quad \Rightarrow \quad I_{n-1} = \frac{1}{n}(1 - I_n)$

方法：先估计一个 I_N，再反推要求的 $I_n\,(n << N)$。

$$\because \quad \frac{1}{e(N+1)} < I_N < \frac{1}{N+1}$$

可取 $I_N^* = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{e(N+1)} + \frac{1}{N+1}\right] \approx I_N$

当 $N \to +\infty$ 时，$|E_N| = |I_N - I_N^*| \to 0$

注意此公式与公式一在理论上等价。

取 $I_{15}^* = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{e\cdot 16} + \frac{1}{16}\right] \approx 0.042746233$

$$\Rightarrow I_{14}^* = \frac{1}{15}(1 - I_{15}^*) \approx 0.063816918$$

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

$$I_{12}^* = \frac{1}{13}(1 - I_{13}^*) \approx 0.071779214$$

$$I_{11}^* = \frac{1}{12}(1 - I_{12}^*) \approx 0.077351732$$

$$I_{10}^* = \frac{1}{11}(1 - I_{11}^*) \approx 0.083877115$$

$$\vdots$$

$$I_{1}^* = \frac{1}{2}(1 - I_{2}^*) \approx 0.36787944$$

$$I_{0}^* = \frac{1}{1}(1 - I_{1}^*) \approx 0.63212056$$

考察反推一步的误差:

$$|E_{N-1}| = \left|\frac{1}{N}(1-I_N) - \frac{1}{N}(1-I_N^*)\right| = \frac{1}{N}|E_N|$$

以此类推，对 $n < N$ 有:

$$|E_n| = \frac{1}{N(N-1)\ldots(n+1)}|E_N|$$

误差逐步递减, 这样的算法称为稳定的算法 /* stable algorithm */

■在我们今后的讨论中，误差将不可回避，算法的稳定性会是一个非常重要的话题。

3 误差与有效数字 /* Error and Significant Digits */

➢ 绝对误差 /* absolute error */

$$e^* = x^* - x$$ 其中x为精确值，x^*为x的近似值。

$|e^*|$的上限记为ε^*，称为绝对误差限 /* accuracy */,

工程上常记为 $x = x^* \pm \varepsilon^*$，例如: $\int_0^1 e^{-x^2} dx = 0.743 \pm 0.006$

■ e* 理论上讲是唯一确定的，可能取正，也可能取负。 e* > 0 不唯一，当然 e* 越小越具有参考价值。

➢有效数字 /* significant digits */

有效数字 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，则 x^* 有 n 位有效数字。

- 例如：$\pi = 3.14159265\ldots\ldots$

按四舍五入原则取四位小数 $\pi \approx 3.1416$，

取五位小数则有 $\pi \approx 3.14159$，他们的绝对误差不超过末位数的半个单位，也即

$$|\pi - 3.1416| \le \frac{1}{2}\times 10^{-4}, \quad |\pi - 3.14159| \le \frac{1}{2}\times 10^{-5}$$

五位有效数值　　　　六位有效数值

用科学计数法，记 $x^* = \pm 0.a_1a_2\cdots a_n \times 10^m$(其中 $a_1 \neq 0$ ）。若 $|x - x^*| \leq 0.5\times 10^{m-n}$（即 a_n的截取按四舍五入规则），则称 x^*为有n 位有效数字，精确到 10^{m-n}。

例： $\pi = 3.14159265358979 32\cdots\cdots$； $\pi^* = 3.1415$

问： π^* 有几位有效数字？请证明你的结论。

证明： $\because \pi^* = 0.31415\times 10^1$，

$$|\pi^* - \pi| < 0.5\times 10^{-3} = 0.5\times 10^{1-4}$$

$\therefore \pi^*$ 有4位有效数字，精确到小数点后第3位。

例：以下数字是经四舍五入得到的，判定各有几位有效数字。

187.9325	0.00369246	3.1415926	2.000072
(7)	(6)	(8)	(7)

➢有效数字与相对误差的关系

☞ **有效数字 ⇒ 相对误差限**

已知 x^* 有 n 位有效数字，则其相对误差限为

$$\varepsilon_r^* = \left|\frac{\varepsilon^*}{x^*}\right| = \frac{0.5\times 10^{m-n}}{0.a_1a_2\cdots a_n\times 10^m} = \frac{10^{-n}}{2\times 0.a_1\cdots}$$

$$\le \frac{1}{2a_1}\times 10^{-n+1}$$

☞ **相对误差限 ⇒ 有效数字**

已知 x^* 的相对误差限可写为 $\varepsilon_r^* = \dfrac{1}{2(a_1+1)}\times 10^{-n+1}$

则 $|x-x^*| \le \varepsilon_r^*\cdot|x^*| = \dfrac{10^{-n+1}}{2(a_1+1)}\times 0.a_1a_2\cdots\times 10^m$

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

可见 x^* 至少有 n 位有效数字。

4. 函数的误差估计/*Error Estimation for Functions*/

问题：对于 $A = f(x)$，若用 x^* 取代 x，将对A 产生什么影响？

➢绝对误差分析： $e^*(x) = x^* - x$

$e^*(A) = f(x^*) - f(x) = f'(\xi)(x^* - x)$， 当$x^*$ 与 x 非常接近时，可认为 $f'(\xi) \approx f'(x^*)$，因此有

$$|e^*(A)| \approx |f'(x^*)||e^*(x)|$$

■x^*产生的误差经过 f 作用后被放大/缩小了$|f'(x^*)|$倍。故称$|f'(x^*)|$为放大因子 /* amplification factor */ 或 绝对条件数 /* absolute condition number */.

➢相对误差分析：

$$|e_r^*(x)| = |e^*(x)|/x^*$$

$$|e_r^*(A)| = \frac{|e^*(A)|}{|f(x^*)|} = \left|\frac{f(x^*)-f(x)}{x^*-x}\frac{x^*}{f(x^*)}\frac{x^*-x}{x^*}\right|$$

$$\approx \left|x^*\frac{f'(x^*)}{f(x^*)}\right||e_r^*(x)|$$

导数定义

相对误差条件数

■f 的条件数在某一点是小\大，则称 f 在该点是好条件的 /* well-conditioned */\坏条件的 /* ill-conditioned */。

5. 小结：几点注意事项/* Remarks */

- 1. 避免相近的两数相减

  例：a1 = 0.12345，a2 = 0.12346，各有5位有效数字。

  而 a2 - a1 = 0.00001，只剩下1位有效数字。

■几种经验性的避免方法

$$\sqrt{x+\varepsilon}-\sqrt{x}=\frac{\varepsilon}{\sqrt{x+\varepsilon}+\sqrt{x}};$$

$$\ln(x+\varepsilon)-\ln x=\ln\left(1+\frac{\varepsilon}{x}\right);$$

当 $|x| << 1$ 时:

$$1-\cos x=2\sin^2\frac{x}{2};$$

- 2.　避免数量级相差很大的两数相加。
- 3.　避免小分母：分母小会造成浮点溢出 /* over flow */
- 4.　先化简再计算，减少步骤，避免误差积累。
- 5.　选用稳定的算法。