# 数值分析上机习题报告 (6)

张宏毅 1500017736

March 25, 2017

## 1 Problem A

### 1.1 Description

设 $f(x)=\ln x$，分别取 $h=1/10^k$ $(k=1,2,\cdots,10)$，用下列三个公式计算 $f'(0.7)$：

$$f'(x)\approx\frac{f(x+h)-f(x)}{h};\tag{i}$$

$$f'(x)\approx\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h};\tag{ii}$$

$$f'(x)\approx\frac{f(x-2h)-8f(x-h)+8f(x+h)-f(x+2h)}{12h}.\tag{iii}$$

（1）用双精度计算，列表比较三个公式的计算误差；

（2）推导第三个公式及其截断误差的阶；

（3）从这里我们可以得出什么结论?

### 1.2 Solution

我们先来推导微分的近似公式 (iii)。将 $f(x+h)$ 和 $f(x-h)$ 在 $x$ 点处进行 Taylor 展开，有

$$f(x+h)=f(x)+f'(x)h+\frac{f''(x)}{2}h^2+\frac{f'''(x)}{6}h^3+\frac{f^{(4)}(x)}{24}h^4+O(h^5),$$
$$f(x-h)=f(x)-f'(x)h+\frac{f''(x)}{2}h^2-\frac{f'''(x)}{6}h^3+\frac{f^{(4)}(x)}{24}h^4+O(h^5).$$

把上面两个式子相减可得

$$f(x+h)-f(x-h)=2hf'(x)+\frac{f'''(x)}{3}h^3+O(h^5).\tag{1}$$

再将步长从 $h$ 改为 $2h$，有

$$f(x+2h)-f(x-2h)=4hf'(x)+\frac{8f'''(x)}{3}h^3+O(h^5).\tag{2}$$

用八倍的 (1) 式减去 (2) 式可得

$$8f(x+h)-8f(x-h)-f(x+2h)+f(x-2h)=12hf'(x)+O(h^5).\tag{3}$$

于是便导出了近似公式 (iii)，且有截断误差估计

$$f'(x)-\frac{f(x-2h)-8f(x-h)+8f(x+h)-f(x+2h)}{12h}=O(h^4), \tag{4}$$

即截断误差为四阶。

下面利用近似公式进行数值微分求解。已知精确解为 $f'(0.7)=10/7=1.428571428571\cdots$。表 1 的前四列列出了三个公式在不同步长下的计算结果，后三列则进一步比较了三个公式的绝对误差。

表 1: 三个数值微分公式的计算结果对比

| $h$ | $f_1(x,h)$ | $f_2(x,h)$ | $f_3(x,h)$ | $\epsilon_1(h)$ | $\epsilon_2(h)$ | $\epsilon_3(h)$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $10^{-1}$ | 1.335313926245 | 1.438410362259 | 1.428058262260 | 9.3258e-02 | 9.8389e-03 | 5.1317e-04 |
| $10^{-2}$ | 1.418463499196 | 1.428668622203 | 1.428571380937 | 1.0108e-02 | 9.7194e-05 | 4.7634e-08 |
| $10^{-3}$ | 1.427551991185 | 1.428572400390 | 1.428571428567 | 1.0194e-03 | 9.7182e-07 | 4.7202e-12 |
| $10^{-4}$ | 1.428469397472 | 1.428571438289 | 1.428571428571 | 1.0203e-04 | 9.7180e-09 | 3.1641e-13 |
| $10^{-5}$ | 1.428561224581 | 1.428571428663 | 1.428571428565 | 1.0204e-05 | 9.1832e-11 | 6.2377e-12 |
| $10^{-6}$ | 1.428570408191 | 1.428571428597 | 1.428571428624 | 1.0204e-06 | 2.5219e-11 | 5.2974e-11 |
| $10^{-7}$ | 1.428571325679 | 1.428571427819 | 1.428571427634 | 1.0289e-07 | 7.5194e-10 | 9.3697e-10 |
| $10^{-8}$ | 1.428571427819 | 1.428571436146 | 1.428571440309 | 7.5194e-10 | 7.5747e-09 | 1.1738e-08 |
| $10^{-9}$ | 1.428571372308 | 1.428571372308 | 1.428571339927 | 5.6263e-08 | 5.6263e-08 | 8.8645e-08 |
| $10^{-10}$ | 1.428571705375 | 1.428571705375 | 1.428571890412 | 2.7680e-07 | 2.7680e-07 | 4.6184e-07 |

从表格中我们可以初步得到一些步长、截断误差的阶与实际绝对误差之间的关系。给定一个数值微分的近似公式，在一定范围内，公式的计算误差会随步长的减小而减小，之后反而会随着步长的进一步减小而增大，即步长存在一个阶，使得计算误差的阶达到极高，不妨称此时的步长为临界步长。

对不同的近似公式进行横向比较，可以发现并不总是近似公式截断误差的阶越高，计算精度就越高，当步长小于临界步长时，高阶公式的误差并不比低阶公式小。但有两个规律是普适的：高阶公式临界步长的阶比低阶公式的要低，而同时，在临界步长处所能达到的极大精度比低阶公式要高。具体地，若近似公式的截断误差为 $O(h^n)$，舍入误差由公式形式知可设为 $O(\epsilon/h)$，其中 $\epsilon$ 为机器精度，则总误差

$$E(h)=C_1h^n+C_2\frac{\epsilon}{h}.$$

容易知道，当临界步长 $h^*=O(\epsilon^{\frac{1}{n+1}})$ 时，能达到最佳精度 $O(\epsilon^{\frac{n}{n+1}})$，数值稳定性随着近似公式阶的增加而有所提高。因而在利用此类公式进行数值微分计算的过程中，要综合考虑所选公式的精度限制、步长的选取以及公式稳定性的好坏。

# 2 Problem B

## 2.1 Description

设 $f(x)=\mathrm{e}^{-x/4}$，$0\le x\le 1$。取 $h=1/10$，$x_i=ih\ (i=0,1,\cdots,10)$，分别用显式中心格式和隐式格式计算 $f(x)$ 在节点 $x_1,x_2,\cdots,x_9$ 处的一阶导数值并与精确值作比较。

## 2.2 Solution

显式中心格式的计算公式为

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2). \tag{5}$$

隐式格式的思路为，先对 $f(x+h)$ 和 $f(x-h)$ 分别作 Taylor 展开至五阶余项和六阶余项，可得

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(x) + O(h^4), \tag{6}$$

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(x) + O(h^4). \tag{7}$$

对 (7) 式求导并代入 (6) 式，忽略 $O(h^4)$ 项，可得近似方程组

$$m_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \frac{1}{6}(m_{i+1} - 2m_i + m_{i-1}),\ 1 \le i \le n-1.$$

其中 $m_i$ 为 $f'(x_i)$ 的近似值。假设 $m_0 = f'(x_0)$ 和 $m_n = f'(x_n)$ 已知，那么我们就可以得到关于微分近似值 $m_0, m_1, \cdots, m_n$ 的一个线性方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ \vdots \\ m_{n-1} \\ m_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f'(x_0) \\ \frac{3}{h}(f_2 - f_0) \\ \vdots \\ \frac{3}{h}(f_n - f_{n-2}) \\ f'(x_n) \end{bmatrix}. \tag{8}$$

这是一个严格对角占优的三对角方程组，可以在 $O(n)$ 时间内解得所有点处的导数近似值。

表 2 列出了在两种格式的计算下各点处一阶导数的近似值及其实际的精确值，并比较了两者的误差，精确值的计算利用了等式 $f'(x) = -f(x)/4$。可以看出，在给定条件下，利用隐式格式计算得到的微分近似值，其精确度比显式格式要高两阶左右。事实上，显式格式 (5) 的截断误差为 $O(h^2)$，而隐式格式 (8) 的截断误差为 $O(h^4)$，所以隐式格式的精确度相对而言比显式格式要好，同时由前面 1.2 节的结论可知，隐式格式拥有更好的数值稳定性，最佳误差为 $O(\epsilon^{4/5})$。

表 2: 显式格式与隐式格式的数值微分结果对比

| $x$ | 显式格式 | 隐式格式 | 精确值 | 显式误差 | 隐式误差 |
|---|---|---|---|---|---|
| 0.1 | -0.24385288 | -0.24382050 | -0.24382748 | 2.540e-05 | 6.979e-06 |
| 0.2 | -0.23783213 | -0.23780923 | -0.23780736 | 2.477e-05 | 1.870e-06 |
| 0.3 | -0.23196003 | -0.23193537 | -0.23193587 | 2.416e-05 | 5.035e-07 |
| 0.4 | -0.22623292 | -0.22620950 | -0.22620935 | 2.356e-05 | 1.413e-07 |
| 0.5 | -0.22064721 | -0.22062416 | -0.22062423 | 2.298e-05 | 6.446e-08 |
| 0.6 | -0.21519941 | -0.21517711 | -0.21517699 | 2.241e-05 | 1.137e-07 |
| 0.7 | -0.20988612 | -0.20986386 | -0.20986426 | 2.186e-05 | 3.932e-07 |
| 0.8 | -0.20470401 | -0.20468414 | -0.20468269 | 2.132e-05 | 1.456e-06 |
| 0.9 | -0.19964985 | -0.19962362 | -0.19962905 | 2.080e-05 | 5.435e-06 |