

首先推导出各阶导数的差分公式：

	$f_i$	$f_{i+1}$	$f_{i+2}$	$f_{i+3}$	$f_{i+4}$
$hf'(x_i) =$	-1	1			
$h^2 f''(x_i) =$	1	-2	1		
$h^3 f'''(x_i) =$	-1	3	-3	1	
$h^4 f^{iv}(x_i) =$	1	-4	6	-4	1

+O(h)

图表 1  $O(h)$ 的差分公式

	$f_{i-2}$	$f_{i-1}$	$f_i$	$f_{i+1}$	$f_{i+2}$
$2hf'(x_i) =$		-1	0	1	
$h^2 f''(x_i) =$		1	-2	1	
$2h^3 f'''(x_i) =$	-1	2	0	-2	1
$h^4 f^{iv}(x_i) =$	1	-4	6	-4	1

+O(h<sup>2</sup>)

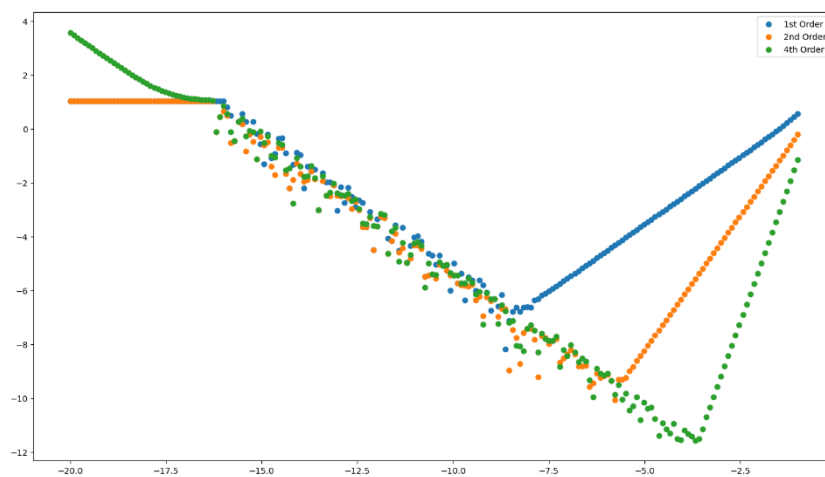
图表 2  $O(h^2)$ 的差分公式

	$f_{i-3}$	$f_{i-2}$	$f_{i-1}$	$f_i$	$f_{i+1}$	$f_{i+2}$	$f_{i+3}$
$12hf'(x_i) =$		1	-8	0	8	-1	
$12h^2 f''(x_i) =$		-1	16	-30	16	-1	
$8h^3 f'''(x_i) =$	1	-8	13	0	-13	8	-1
$6h^4 f^{iv}(x_i) =$	-1	12	-39	56	-39	12	-1

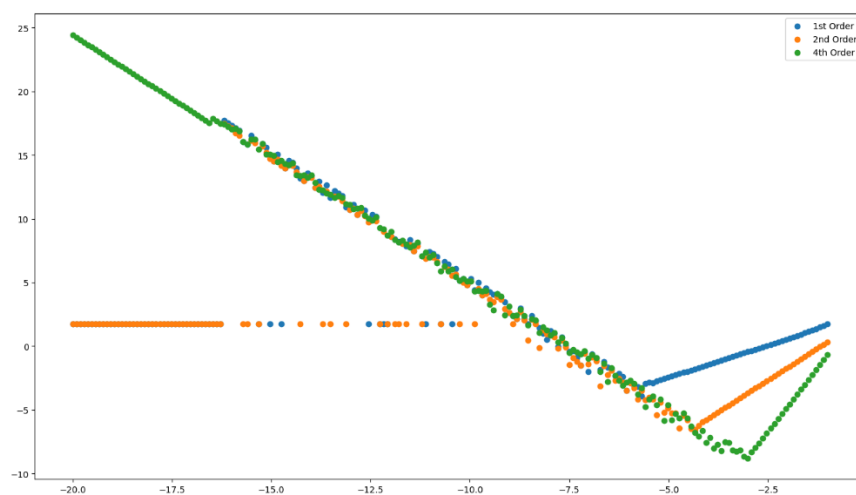
+O(h<sup>4</sup>)

图表 3  $O(h^4)$ 的差分公式

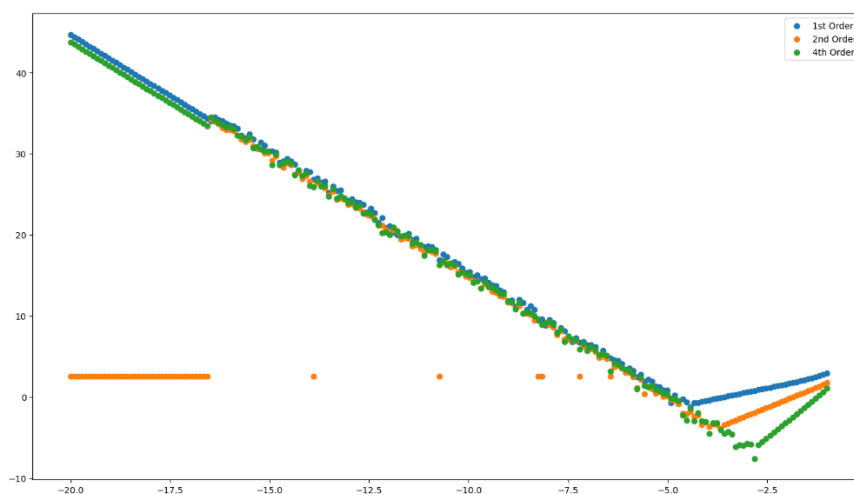
利用 python 画出  $h - \delta$  的对数值函数图 ( $\delta$  为误差绝对值)



图表 4 一阶导函数的差分误差对数图像



图表 5 二阶导函数的差分误差对数图像



图表 6 三阶导函数的差分误差对数图像

通过观察上图我们可以发现：

①不同的 $\mathcal{O}(h)$ 的图像都会有一个拐点，在这个拐点右侧，图像大致为一条直线，而拐点左侧则为不连续的散点，比较离散。

②更高阶的 $\mathcal{O}(h)$ 的差分公式对导函数值的拟合更加精确，图像上反应出的就是更低的曲线点。

③同时当 $h$ 小到一定值时，图像变得平直。

现对上述异常现象做出解释。

利用计算机并通过公式 $\frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$ 估计近似值时，其同时会产生两种误差，一类是截断误差（truncation error），其与 $h$ 的值成正相关；另一类是由于算法问题以及机器精度导致的舍入误差（round-off error），其与机器精度成正相关，与 $h$ 成负相关。这两类误差的和组成了这一计算公式导致的总误差，并且由于两类误差与 $h$ 的相关性不同，这就导致当 $h$ 减小时，截断误差在减小，而舍入误差在增大。可以写出两类误差具体的表达式：

截断误差：

$$e_{tru} = \frac{h}{2f''(x)}$$

舍入误差：

$$e_{rou} = \frac{2cf(x)}{h}$$

其中 $c$ 为机器精度

于是总误差为：

$$e = e_{tru} + e_{rou} = \frac{h}{2f''(x)} + \frac{2cf(x)}{h}$$

当 $h$ 在 $10^{-2}, 10^{-8}$ 中时，截断误差的影响占主导地位，所以此时总误差会随着 $h$ 的减小而减小，而当 $h > 10^{-8}$ 时，截断误差趋近于 0，舍入误差的影响占主导地位了，所以此时总误差会随着 $h$ 的减小而增大。而当 $h > 10^{-16}$ 时，此时， $h$ 接近于甚至小于机器精度  $c$  值，于是 $f(x+h) - f(x)$ 在计算机的运算过程被直接舍入为 0 了，所以此时近似值为 0。