1.数理算法原理

f(x)的泰勒展开:

 $f(x+\Delta x)=f(x)+\Delta x f'(x)+\Delta x^2rac{f''(x)}{2!}+\ldots+\Delta x^nrac{f^{(n)}(x)}{n!}$

将(1)式保留到三阶项,可得:

$$f(x+\Delta x) = f(x) + \Delta x f'(x) + \Delta x^2 \frac{f''(x)}{2!} + \Delta x^3 \frac{f'''(x)}{3!} + O(\Delta x^4)$$
 (2) $f(x-\Delta x) = f(x) - \Delta x f'(x) + \Delta x^2 \frac{f''(x)}{2!} - \Delta x^3 \frac{f'''(x)}{3!} + O(\Delta x^4)$

两式相减得到一阶导数的中心差分格式:

$$f'(x)=rac{f(x+\Delta x)-f(x-\Delta x)}{2\Delta x}+\Delta x^2rac{f'''(x)}{3!}+O(\Delta x^3) \hspace{0.5cm} (1.c)$$

同理对(1)式保留到四阶项,两式相加得到二阶导数的中心差分格式:

$$f''(x) = rac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{2\Delta x^2} + \Delta x^2 rac{f''''(x)}{4!} + O(\Delta x^3) \hspace{0.5cm} (2.c)$$

从推导中可以看到二者均为二阶精度

将(1)式保留到二阶项并移项得到一阶导数的前向差分格式:

$$f'(x) = rac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x} + \Delta x rac{f''(x)}{2!} + O(\Delta x^2) \hspace{0.5cm} (1.f)$$

将(1)式做替换并保留到三阶项可得到:

$$f(x+2\Delta x) = f(x) + 2\Delta x f'(x) + 4\Delta x^2 rac{f''(x)}{2!} + 8\Delta x^3 rac{f'''(x)}{3!} + O(\Delta x^4) \hspace{0.5cm} (3)$$

(3) - 2(2)得到二阶导数的前向差分格式:

$$f''(x) = rac{f(x+2\Delta x) - 2f(x+\Delta x) + f(x)}{\Delta x^2} + \Delta x f'''(x) + O(x^2) \hspace{0.5cm} (2.f)$$

从推导中可以看到二者均为一阶精度

2.代码生成和调试

打开./src/HW2.cpp,输入步长和自变量取值,可以得到以上差分与精确值的误差(以sin(x)为例)

3.结果讨论和解释

在程序输入中改变步长,控制自变量取值不变,可以发现误差受到步长和精度的影响。具体来说,误差与步长成正比,与精度成反比。

从1.中公式我们可以对原因进行分析:

将所有公式中误差的高阶小量略去,可以得到截断误差的最主要部分如下:

$$err_{1f}pprox \Delta xrac{f''(x)}{2!} \ err_{1c}pprox \Delta x^2rac{f'''(x)}{3!} \ err_{2f}pprox \Delta x f'''(x)$$

$$err_{2c}pprox \Delta x^2rac{f''''(x)}{4!}$$

从公式中可以看出,步长(即 Δx)越大,截断误差越大,而精度为n阶时,截断误差近似为 Δx^n 项,因此截断误差与精度成反比。而舍入误差是因为浮点数存储位数有限产生的,因此与步长和精度均无关。两者相加得到误差,因此误差与步长成正比,与精度成反比。实际上,截断误差 $err \propto \Delta x^n$,这里n为近似值精度的阶数。

控制其他变量不变,单精度存储的误差要高于双精度,这是因为舍入在单精度数发生的位数早于双精度数,因此单精度的舍入误差大于双精度。

附录1: AI工具使用声明表

AI工具名称 生成代码 功能

Deepseek R1 第26-30行 用于为模板功能提供示例,用模板功能可以使函数返回值类型根据输入变化,使得代码更加灵活

核心代码生成行数占比: 83.333%

附录2: 本次commit截图

Commit截图