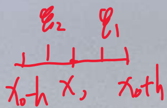
数值微分.

对于函数没有解析表达式的 $y=f(x)$，而给出的是 $n+1$ 个节点 x_k 上的函数值 $y_k=f(x_k)(k=0,1,\cdots,n)$，据此去求 $f'(x_k)$ 的值，这称为数值微分问题。

显式

1 Taylor展开式方法



借助 Taylor 展开式，可以构造函数 $f(x)$ 在点 $x=x_0$ 的一阶导数和二阶导数的数值微分公式。取步长 $h>0$ 则

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(\xi_1) \quad \xi_1\in(x_0,x_0+h)$$

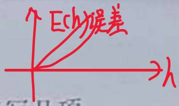
所以

$$f'(x_0)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}-\frac{h}{2}f''(\xi_1) \quad \xi_1\in(x_0,x_0+h)$$ 向前差商

同理

$$f(x_0-h)=f(x_0)-hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(\xi_2) \quad \xi_2\in(x_0-h,x_0)$$

$$f'(x_0)=\frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}+\frac{h}{2}f''(\xi_2) \quad \xi_2\in(x_0-h,x_0)$$ 向后差商.



其截断误差为$O(h)$，为提高精度，将 Taylor 展开式多写几项

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)+\frac{h^3}{6}f'''(x_0)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_1)\quad \xi_1\in(x_0,x_0+h)$$

$$f(x_0-h)=f(x_0)-hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)-\frac{h^3}{6}f'''(x_0)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_2)\quad \xi_2\in(x_0-h,x_0)$$

两式相减得

$$f'(x_0)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''(x_0)+O(h^4)$$

上式计算$f'(x_0)$其截断误差为$O(h^2)$，精度高。

中心差分，
二阶精度

$$f''(x_0)=\frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)\quad \xi\in(x_0-h,x_0+h)$$

$f''(x_0)$的数值微分公式,其截断误差为$O(h^2)$。

例 设函数$f(x)=\ln x, x_0=2, h=0.1$，试用数值微分公式计算$f'(2)$的值。

$$f'(2)\approx\frac{\ln 2.1-\ln 2}{0.1}\approx 0.4879.$$

$$f'(2)\approx\frac{\ln 2-\ln 1.9}{0.1}\approx 0.5129.$$

$$f'(2)\approx\frac{\ln 2.1-\ln 1.9}{0.2}\approx 0.5004$$

中心格式计算结果精度高。

还要考虑物理性质

2.插值方法（隐式）

设函数 $y=f(x)$ 具有 $n+1$ 个实验数据：$(x_j, f(x_j))(j=0,1,2,\cdots,n)$，

我们希望估计 $f'(x)$ 的值，特别 $x=x_j$ 时，估计 $f'(x_j)$ 的值。

基于插值方法的数值微分做法是，由已知 $(x_j, f(x_j))(j=0,1,\cdots,n)$ 建立 Lagrange 插值多项式或 Newton 插值多项式，即

$$f(x)=L_n(x)+R_n(x) \quad 或 \quad f(x)=N_n(x)+R_n(x)$$

于是

$$f'(x)=L'_n(x)+R'_n(x)=N'_n(x)+R'_n(x)$$

当 $x=x_j$ 时，有

$$f'(x_j)=L'_n(x_j)+R'_n(x_j)=N'_n(x_j)+R'_n(x_j) \quad (j=0,1,2,\ldots,n)$$

等间距时.

其中

$$R'_n(x_j)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'_{n+1}(x_j)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{\substack{i=0\\i\neq j}}^{n}(x_j-x_i) = \prod_{\substack{i=0\\i\neq j}}^{n} -(i-j)h$$

略去误差项有

$$f'(x_j)\approx L'_n(x_j)=N'_n(x_j) \quad (j=0,1,2,\ldots,n)$$

类似地，也可有

$$f''(x_j)\approx L''_n(x_j)=N''_n(x_j) \quad (j=0,1,2,\ldots,n)$$

实际运用中，等距节点更为常见。

设 $h=\frac{b-a}{n}, x_j=a+jh(j=0,1,2,\cdots,n)$，$x=a+th$，于是有

$$f(x)=y_0+\frac{t}{1!}\Delta y_0+\frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 y_0+\dots+\frac{t(t-1)\dots(t-n+1)}{n!}\Delta^n y_0+R_n(x)$$

所以

$$f'(x_j)=\frac{1}{h}\frac{d}{dt}\left\{y_0+\frac{t}{1!}\Delta y_0+\dots+\frac{t(t-1)\dots(t-n+1)}{n!}\Delta^n y_0\right\}_{t=j}$$
$$+\frac{h^n f_n^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{n}(j-i)$$

$$L_1(x)=y_0 l_0(x)+y_1 l_1(x)$$
$$=y_0\frac{x-x_1}{x_0-x_1}+y_1\frac{x-x_0}{x_1-x_0}$$
$$=y_0\frac{x-x_1}{h}+y_1\frac{x-x_0}{h}$$

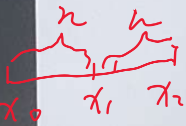
$$L_1'(x)=\frac{y_1-y_0}{h}$$

(1)两点公式 $(n=1)$

$$\begin{cases} f'(x_0)=\frac{1}{h}(y_1-y_0) & R'(x_0)=-\frac{h}{2}f''(\xi) \\ f'(x_1)=\frac{1}{h}(y_1-y_0) & R'(x_1)=\frac{h}{2}f''(\xi) \end{cases}$$

（2）三点公式（n=2）

二阶迎风格式.



$$\begin{cases} f'(x_0)=\frac{1}{2h}(-3y_0+4y_1-y_2) & R'(x_0)=\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi) \\ f'(x_1)=\frac{1}{2h}(-y_0+y_2) & R'(x_1)=-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi) \\ f'(x_2)=\frac{1}{2h}(y_0-4y_1+3y_2) & R'(x_0)=\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi) \end{cases}$$

$$L_2(x)=y_0 l_0(x)+y_1 l_1(x)+y_2 l_2(x)$$

$$L_2'(x)=y_0 l_0'(x)+y_1 l_1'(x)+y_2' l_2'(x).$$

$$l_0(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2}$$

$$l_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{-h^2}$$

$$l_0'(x)=\frac{x-x_2+x-x_1}{2h^2}=\frac{2x-(x_1+x_2)}{2h^2}$$

$$l_1'(x)=\frac{2x-(x_0+x_2)}{-h^2}$$

$$l_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2h^2}$$

$$l_2'(x) = \frac{2x-(x_0+x_1)}{2h^2}$$

$$l_0'(x_0) = \frac{-3h}{2h^2} = -\frac{3}{2h}.$$

$$l_1'(x_0) = \frac{x_0-x_2}{-h^2} = \frac{-2h}{-h^2} = \frac{2}{h}$$

$$l_2'(x_0) = \frac{2x_0-(x_0+x_1)}{2h^2} = \frac{-h}{2h^2} = -\frac{1}{2h}$$

$$f'(x_0) \approx L_2(x_0) = -\frac{3}{2h}y_0 + \frac{2}{h}y_1 - \frac{1}{2h}y_2$$

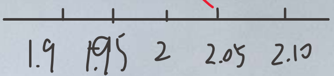
(3)五点公式（n=4）

$$
\begin{cases}
f'(x_0)=\dfrac{1}{12h}(-25y_0+48y_1-36y_2+16y_3-3y_4) & R'(x_0)=\dfrac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi) \\
f'(x_1)=\dfrac{1}{12h}(-3y_0-10y_1+18y_2-6y_3+y_4) & R'(x_1)=-\dfrac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi) \\
f'(x_2)=\dfrac{1}{12h}(y_0-8y_1+8y_3-y_4) & R'(x_2)=-\dfrac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi) \\
f'(x_3)=\dfrac{1}{12h}(-y_0+6y_1-18y_2+10y_3+3y_4) & R'(x_3)=-\dfrac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi) \\
f'(x_4)=\dfrac{1}{12h}(3y_0-16y_1+36y_2-48y_3+25y_4) & R'(x_0)=\dfrac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi)
\end{cases}
$$

(4)七点公式（n=6）

$$
f'(x_3)=\frac{1}{60h}(-y_0+9y_1+45y_2+45y_4-9y_5+y_6) \qquad R'(x_3)=-\frac{h^6}{140}f^{(7)}(\xi)
$$

例　设 $f(x)=\ln x$，取 $h=0.05$，试分别用三点公式和五点公式计算 $f'(2)$ 的近似值。



解

$$
f'(2)=\frac{1}{2\times0.05}(-3f(2)+4f(2.05)-f(2.10))=0.499802861
$$

$$
f'(2)=\frac{1}{2\times0.05}(-f(1.95)+f(2.05))=0.500104205
$$

$$
f'(2)=\frac{1}{2\times0.05}(f(1.90)-4f(1.95)+3f(2))=0.499779376
$$

$$f'(2)=\frac{1}{12\times 0.05}(f(1.90)-8f(1.95)+6f(2.05)-f(2.10))=0.499999843$$

与真值 $f'(2)=0.5$ 相比，三点公式已有相当满意精度，而五点公式的结果是十分满意的。

隐式格式

前述的数值微分格式均称为显式格式，即直接由已知的 $f(x_j)(j=0,1,2,\ \cdots,n)$，经过适当的算术四则运算，立即可得 $f'(x_j)$ 的近似值。显式格式优点是计算方便，工作量小，缺点是数值不稳定。为克服后一缺点，隐式格式常常具有数值稳定性。

数值微分的隐式格式建立方法常用通过 Taylor 展开式方法或数值积分方法等不同途径。下面我们用 Taylor 展开式方法来推导数值微分的隐式格式。

$g(x)=f'(x).$

$$f'(x_k)=\frac{1}{2h}[f(x_k+h)-f(x_k-h)]-\frac{h^2}{6}f'''(x_k)+O(h^4)$$

$$f''(x_k)=\frac{1}{h^2}[f(x_k+h)-2f(x_k)+f(x_k-h)]-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi) \quad g'(x)$$

$$f'''(x_k)=\frac{1}{h^2}[f'(x_k+h)-2f'(x_k)+f'(x_k-h)]-\frac{h^2}{12}f^{(5)}(\xi) \quad g''(x)$$

将最后 $f'''(x_k)$ 表达式代入 $f'(x_k)$ 表达式可得

$$\boxed{f'(x_k)=\frac{1}{2h}[f(x_k+h)-f(x_k-h)]-\frac{1}{6}[f'(x_k+h)-2f'(x_k)+f'(x_k-h)]+O(h^4)}$$

略去误差项 $O(h^4)$，并且 m_k 表示 $f'(x_k)$ 的近似值，则有

$$m_{k-1}+4m_k+m_{k+1}=\frac{3}{h}[f(x_{k+1})-f(x_{k-1})]$$

上式是关于$n+1$个未知量$m_0,m_1,\cdots m_n$的$n-1$个方程，如果已知

$m_0 = f'(x_0), m_n = f'(x_n)$，或用五点公式补充出

$$m_0 = \frac{1}{12h}[-25f(x_0)+48f(x_1)-36f(x_2)+16f(x_3)-3f(x_1)]$$

$$m_n = \frac{1}{12h}[3f(x_{n-4})+16f(x_{n-3})+36f(x_{n-2})-48f(x_{n-1})+25f(x_n)]$$

记$d_k = \frac{3}{h}[f(x_{k+1})-\cancel{16}f(x_{k-1})]$，故有方程组：

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & & \\ & 1 & 4 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & 1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ \vdots \\ m_{n-2} \\ m_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 - m_0 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1} - m_n \end{bmatrix}$$

就是求$m_1,m_2,\cdots,m_{n-1}$得线性方程组。由于系数矩阵是严格对角占优的三对角矩阵，因此非奇异，解存在且唯一，可由追赶法求解，且数值稳定。

同理我们也可以建立求二阶导数$f''(x_k)$的隐式格式，可得：

$$\begin{bmatrix} 10 & 1 & & & & \\ 1 & 10 & 1 & & & \\ & 1 & 10 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & 10 & 1 \\ & & & & 1 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 - M_0 \\ D_2 \\ D_3 \\ \vdots \\ D_{n-2} \\ D_{n-1} - M_n \end{bmatrix}$$

其中：$D_k = \frac{12}{h^2}[f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k+1})]$（k=1,2,...n），$M_k = f''(x_k)$ （k=1,2,...n-1），如果已知$M_0 = f''(x_0), M_n = f''(x_n)$，或类似五点公式补充出。

式(5.5.19)就是求$M_1, M_2, \cdots, M_{n-1}$的线性方程组。同样，由于系数矩阵是严格对角占优的三对角矩阵，故式(5.5.19)解存在且唯一，用追赶法求解，有较好效果。

数值，及$f'(1.5), f'(2.0)$如表所示。试用数值微分隐式格式求出相应节点上一阶和二阶导数的近似值。

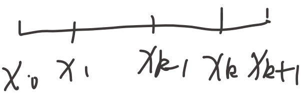
x	$f(x)$	$f'(x)$
1.5	0.405465108	0.666666667
1.6	0.470003629	
1.7	0.530628251	
1.8	0.587786664	
1.9	0.641853886	
2.0	0.69314718	0.500000000

解上述两方程组得：

$$m_1 = 0.625011309 \qquad M_1 = -0.39062154$$
$$m_2 = 0.588230988 \qquad M_2 = -0.34601889$$
$$m_3 = 0.555555784 \qquad M_3 = -0.3086402$$
$$m_4 = 0.526315789 \qquad M_4 = -0.27700733$$

与 $f'(x)=\frac{1}{x}, f''(x)=\frac{-1}{x^2}$ 在各相应节点上数值相比，上述结果约有五位有效数字，应当说有满意的精度，如果 h 适当小些，其结果会有更为满意的精度。

$$\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} f'(x)\,dx = f(x_{k+1}) - f(x_{k-1})$$



$$\frac{2h}{6}\left[f'(x_{k-1}) + 4f'(x_k) + f'(x_{k+1})\right]$$

$$m_{k-1} + 4m_k + m_{k+1} = \frac{3}{h}\left[f(x_{k+1}) - f(x_k)\right].$$

$$\frac{2h}{2}\left[f'(x_{k+1}) + f'(x_{k-1})\right] =$$