第二章 数值微分和数值积分

主讲：纪庆革副教授
软件工程与应用研究所
数据科学与计算机学院
中山大学，广州
E-Mail: 1024180018@qq.com

数值微分

1. 函数f(x)以**离散点列**给出时，而要求我们给出导数值，
2. 函数f(x)过于**复杂**

这两种情况都要求我们用数值的方法求函数的导数值

微积分中，关于导数的定义如下：

$$f'(x)=\lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x)}{h}=\lim_{h\to 0}\frac{f(x)-f(x-h)}{h}=\lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$

自然，而又简单的方法就是，取极限的近似值，即**差商**

向前差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

由**Taylor**展开

$$f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!} f''(\xi), x_0 \le \xi \le x_0 + h$$

因此，有误差

$$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} = -\frac{h}{2!} f''(\xi) = O(h)$$

向后差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$$

由Taylor展开

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!} f''(\xi), x_0 \le \xi \le x_0 + h$$

因此，有误差

$$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} = \frac{h}{2!} f''(\xi) = O(h)$$

中心差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$$

由Taylor展开

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(x_0)+\frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1), x_0 \le \xi_1 \le x_0+h$$

$$f(x_0-h)=f(x_0)-hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(x_0)-\frac{h^3}{3!}f'''(\xi_2), x_0-h \le \xi_2 \le x_0$$

因此，有误差

$$R(x)=f'(x_0)-\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$$

$$=\frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2)]=\frac{h^2}{6}f'''(\xi)=O(h^2)$$

由误差表达式，h越小，误差越小，但同时舍入误差增大，所以，有个**最佳步长**。

可以用**事后误差估计**的方法来确定。

设D(h),D(h/2)分别为步长为h,h/2的差商公式。则

$$\left| D(h) - D(\frac{h}{2}) \right| < \varepsilon$$

时的步长h/2就是合适的步长

例：

$f(x)=exp(x)$

h	f′(1.15)	R(x)		h	f′(1.15)	R(x)
0.10	3.1630	-0.0048		0.05	3.1590	-0.0008
0.09	3.1622	-0.0040		0.04	3.1588	-0.0006
0.08	3.1613	-0.0031		0.03	3.1583	-0.0001
0.07	3.1607	-0.0025		0.02	3.1575	-0.0007
0.06	3.1600	-0.0018		0.01	3.1550	-0.0032

插值型数值微分

插值是建立**逼近函数**的手段，用以研究原函数的性质。因此，可以用插值函数的导数**近似**为原函数的导数

$$f^{(k)}(x) \approx L_n^{(k)}(x)$$

误差

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) = f(x) - L_n(x)$$

$$R_n^{(k)}(x) = \frac{d^k}{dx^k}\left[\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\right]$$

(1)两点公式

过节点做线性插值多项式,并记$h=x_1-x_0$, 则

$$P_1(x)=\frac{x-x_0}{h}f(x_1)-\frac{x-x_1}{h}f(x_0)$$

两边求导数得

$$P_1'(x)=\frac{1}{h}(f(x_1)-f(x_0))$$

于是得两点公式

$$f'(x_0)=f'(x_1)\approx\frac{1}{h}(f(x_1)-f(x_0))$$

其**截断误差**为

$$\begin{cases}R_1(x_0)=-\frac{h}{2}f''(\xi)\\ R_1(x_1)=\frac{h}{2}f''(\xi)\end{cases}$$

例:

给定点列$\{(x_i, f(x_i))\}_{i=0}^{2}$ 且$x_2 - x_1 = x_1 - x_0 = h$ ，求

$f'(x_2), f'(x_1), f'(x_0)$

解:

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{-h^2} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2h^2} f(x_2)$$

$$L'_2(x) = \frac{(x-x_1+x-x_2)}{2h^2} f(x_0) + \frac{(x-x_0+x-x_2)}{-h^2} f(x_1) + \frac{(x-x_0+x-x_1)}{2h^2} f(x_2)$$

$$f'(x_0) \approx L'_2(x_0) = \frac{1}{2h}\left(-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)\right)+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$$

$$f'(x_1) \approx L'_2(x_1) = \frac{1}{2h}\left(-f(x_0)+f(x_2)\right)-\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$$

$$f'(x_2) \approx L'_2(x_2) = \frac{1}{2h}\left(f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)\right)+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$$

$$f''(x_0) \approx L''_2(x_0) = \frac{1}{h^2}\left(f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)\right)+[-hf'''(\xi_1)+\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_2)]$$

$$f''(x_1) \approx L''_1(x_2) = \frac{1}{h^2}\left(f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)\right)-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)$$

$$f''(x_2) \approx L''_2(x_2) = \frac{1}{h^2}\left(f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)\right)+[hf'''(\xi_1)-\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_2)]$$

Taylor展开分析，可以知道，它们都是 $O(h^2)$ 称为**三点公式**

其截断误差为

$$\begin{cases} R_2(x_0)=f'(x_0)-P_2'(x_0)=\dfrac{1}{3}h^2f'''(\xi) \\ R_2(x_1)=f'(x_1)-P_2'(x_1)=-\dfrac{1}{6}h^2f'''(\xi) \\ R_2(x_2)=f'(x_2)-P_2'(x_2)=\dfrac{1}{3}h^2f'''(\xi) \end{cases}$$

如果要求f(x)的二阶导数,可用P''_2(x)作为的近似值,于是有

$$f''(x_i)\approx P_2''(x_i)=\frac{1}{h^2}(f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2))$$

其截断误差为 $f''(x_i)-P_2''(x_i)=o(h^2)$

(3)五点公式 (选学内容)

过五个节点上的函数值,重复同样的手续,不难导出下列五点公式:

$$\begin{cases} f'(x_0) \approx \dfrac{1}{12h}[-25f(x_0)+48f(x_1)-36f(x_2)+16f(x_3)-3f(x_4)] \\ f'(x_1) \approx \dfrac{1}{12h}[-3f(x_0)-10f(x_1)+18f(x_2)-6f(x_3)+f(x_4)] \\ f'(x_2) \approx \dfrac{1}{12h}[f(x_0)-8f(x_1)+8f(x_3)-f(x_4)] \\ f'(x_3) \approx \dfrac{1}{12h}[-f(x_0)+6f(x_1)-18f(x_2)+10f(x_3)+3f(x_4)] \\ f'(x_4) \approx \dfrac{1}{12h}[3f(x_0)-16f(x_1)+36f(x_2)-16f(x_3)+3f(x_4)] \end{cases}$$

$$
\begin{cases}
f''(x_0) \approx \dfrac{1}{12h^2}[35f(x_0) - 104f(x_1) + 114f(x_2) - 56f(x_3) + 11f(x_4)] \\
f''(x_1) \approx \dfrac{1}{12h^2}[11f(x_0) - 20f(x_1) + 6f(x_2) + 4f(x_3) - f(x_4)] \\
f''(x_2) \approx \dfrac{1}{12h^2}[-f(x_0) + 16f(x_1) - 30f(x_3) + 16f(x_3) - f(x_4)] \\
f''(x_3) \approx \dfrac{1}{12h^2}[-f(x_0) + 4f(x_1) + 6f(x_2) - 20f(x_3) + 11f(x_4)] \\
f''(x_4) \approx \dfrac{1}{12h^2}[11f(x_0) - 56f(x_1) + 11f(x_2) - 104f(x_3) + 35f(x_4)]
\end{cases}
$$

不难导出这些求导公式的余项，并由此可知，用五点公式求节点上的导数值往往可以获 得满足的结果。

Thanks!