

# 第二章 数值微分和数值积分

主讲：纪庆革副教授

中山大学数据科学与计算机学院

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：

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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：

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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



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

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。

吉祥如意

Q & A  
Thanks!

