9.6 数值微分

(Numerical Differentiation)

在实际问题中，往往会遇到某函数f(x) 是用表格表示的,用通常的导数定义无法求导,因此要寻求其他方法近似求导。插值法是我们找到的一个最简单的方法.

用f(x)的代数插值函数p(x)来近似f(x)，用p(x) 的导数来代替f(x)导数作近似计算。

插值型求导公式　P313

设$\varphi_n(x)$是f(x)的过点$\{x_0, x_1, x_2, \ldots x_n\} \subset [a, b]$的n 次插值多项式，由Laglange插值余项, 对任意给定的$x \in [a, b]$，总存在如下关系式:

$$f(x)=\varphi_n(x)+\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \qquad a<\xi<b$$

若取数值微分公式　$f'(x) \approx \varphi_n'(x)$

误差为:

$$R_n'(x)=f'(x)-\varphi_n'(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x)+\omega_{n+1}(x)\frac{d}{dx}\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}$$

误差为:

$$R_n'(x)=f'(x)-\varphi_n'(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x)+\omega_{n+1}(x)\frac{d}{dx}\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}$$

在插值节点处 $\omega_{n+1}(x_i)\frac{d}{dx}\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}=0$,此时的余项为

$$R_n'(x_i)=f'(x_i)-\varphi_n'(x_i)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_i)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_i)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_i)}{(n+1)!}\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}(x_i-x_k)$$

因此插值型求导公式常用于求节点处的导数值

$$f'(x_i)\approx\varphi_n'(x_i)=\sum_{k=0}^{n}f(x_k)l'_{n,k}(x_i) \qquad i=0,1,\ldots,n$$

$$l_{n,k}(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}$$

称为n+1点求导公式。

常用的数值微分公式是n=1,2的插值型微分公式.

当n=1时,有 $f'(x_i)\approx\varphi_1'(x_i)=\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0} \qquad i=0,1$

$$R_1'(x_i)=f'(x_i)-\varphi_1'(x_i)=\frac{f^{(2)}(\xi_i)}{2!}\omega_2'(x_i) \quad i=0,1$$

$$f'(x_0)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}-\frac{h}{2}f''(\xi_1) \quad (1)$$

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

(1)，(2)分别称为x_0点的向前(向后)差商公式。$h>0$

将x_i统一表为x_0, 公式(2)写成如下形式

例1　设f(x)=$\ln x$，x_0=1.8，用2点公式计算f'(x_0)。

解：计算$f'(x_0)$的误差为 $\dfrac{|hf''(\xi)|}{2}=\dfrac{h}{2\xi^2}$,

这里　$1.8<\xi<1.8+h$　或　$1.8-h<\xi<1.8$

列表计算如下：

h	$\frac{f(1.8+h)-f(1.8)}{h}$	$\frac{h}{2(1.8)^2}$	$\frac{f(1.8)-f(1.8-h)}{h}$	$\frac{h}{2(1.8-h)^2}$
0.1	0.5406722	0.0154321	0.5715841	0.0173010
0.01	0.5540180	0.0015432	0.5571045	0.0015605
0.001	0.5554013	0.0001543	0.55570993	0.0001545

$$f'(1.8)=0.55\dot{5}$$

当 n=2 时，取节点为等距节点: $x_1=x_0+h$, $x_2=x_0+2h$, $h>0$, ，则有

$$f'(x_0)=\frac{-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)}{2h}+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)$$
$$f'(x_1)=\frac{f(x_2)-f(x_0)}{2h}-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)$$
$$f'(x_2)=\frac{f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)}{2h}+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_2)$$

这里 $x_1=x_0+h,\quad x_2=x_0+2h,\quad x_0<\xi_i<x_2$

n=2时，计算 $f'(x_0)$ 的误差是 $O(h^2)$,且（4）的误差最小。

有时，也将 x_i 统一表为 x_0,将上述公式写成如下形式

$$f'(x_0)=\frac{-3f(x_0)+4f(x_0+h)-f(x_0+2h)}{2h}+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)\quad(3)$$
$$f'(x_0)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)\quad(4)$$
$$f'(x_0)=\frac{f(x_0-2h)-4f(x_0-h)+3f(x_0)}{2h}+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_2)\quad(5)$$

$x_0-h<\xi_i<x_0+h, i=0,1,2.$ (3)、(4)、(5)称为3点公式。

$$f'(x_0)=\frac{-3f(x_0)+4f(x_0+h)-f(x_0+2h)}{2h}+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)\quad(3)$$
$$f'(x_0)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)\quad(4)$$
$$f'(x_0)=\frac{f(x_0-2h)-4f(x_0-h)+3f(x_0)}{2h}+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_2)\quad(5)$$

例2 设 $f(x)=xe^x$，$x_0=2$，用3点公式计算 $f'(x_0)$。

x	$f(x)$	h	公式（3）	公式（4）	公式（5）
1.8	10.889365	0.1	22.032310	22.228790	22.054525
1.9	12.703199	0.2		22.414163	
2.0	14.778112	误差	1.35×10^{-1}	-6.16×10^{-2} / -2.47×10^{-1}	1.13×10^{-1}
2.1	17.148957				
2.2	19.855030				

$f'(x)=(x+1)e^x,\ f'(2)=22.167168$

公式(4)计算 $f'(2)$ 较准确。

高阶数值微分公式，计算 $f''(x_0)$.

由Taylor公式：

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{1}{2}f''(x_0)h^2+\frac{1}{3!}f^{(3)}(x_0)h^3+\frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi_1)h^4\quad(8)$$
$$f(x_0-h)=f(x_0)-hf'(x_0)+\frac{1}{2}f''(x_0)h^2-\frac{1}{3!}f^{(3)}(x_0)h^3+\frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi_2)h^4\quad(9)$$

这里，$x_0<\xi_1<x_0+h,\quad x_0-h<\xi_2<x_0$

（8）+（9）得：

$$f(x_0+h)+f(x_0-h)=2f(x_0)+f''(x_0)h^2+\frac{1}{4!}[f^{(4)}(\xi_1)+f^{(4)}(\xi_2)]h^4\quad(10)$$
$$\Rightarrow f''(x_0)=\frac{1}{h^2}[f(x_0+h)+f(x_0-h)-2f(x_0)]-\frac{1}{4!}[f^{(4)}(\xi_1)+f^{(4)}(\xi_2)]h^2\quad(11)$$

假设 $f^{(4)}(x)$ 在 $[x_0-h, x_0+h]$ 上连续，则存在 $\xi\in(x_0-h, x_0+h)$，使得

$$f^{(4)}(\xi)=\frac{1}{2}[f^{(4)}(\xi_1)+f^{(4)}(\xi_2)]$$
$$f''(x_0)=\frac{1}{h^2}[f(x_0+h)+f(x_0-h)-2f(x_0)]-\frac{1}{12}f^{(4)}(\xi)h^2\quad(12)$$
$$x_0-h<\xi<x_0+h$$

公式（12）计算 $f''(x_0)$ 的误差是 $O(h^2)$。

在构造数值微分公式时，不仅要考虑公式的截断误差，而且还要考虑公式的舍入误差。

考察公式：

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

从截断误差 $(h^2/6)f^{(3)}(\xi_1)$ 的角度看，h 越小误差越小。但从舍入误差的角度看，h不能太小。

例3 设 $f(x)=\sin x$，计算 $f'(0.900)=\cos 0.900$ 的近似值。

解：利用公式

$$f'(0.900)\approx\frac{f(0.900+h)-f(0.900-h)}{2h}$$

计算。

h	近似 $f'(0.900)$	误差
0.001	0.62500	0.00339
0.002	0.62250	0.00089
0.005	0.62200	0.00039
0.010	0.62150	−0.00011
0.020	0.62150	−0.00011
0.050	0.62140	−0.00021
0.100	0.62055	−0.00106

Richardson's Extrapolation: 若 $\alpha_1 < \alpha_2 < \cdots \alpha_m \cdots$,且

$$M = N(h) + k_1 h^{\alpha_1} + k_2 h^{\alpha_2} + \cdots + k_m h^{\alpha_m} + O(h^{\alpha_m}) \quad (8)$$

则有

$$\begin{cases} N_1(h) = N(h) \\ N_{j+1}(h) = \dfrac{N_j(qh) - q^{\alpha_j} N_j(h)}{1 - q^{\alpha_j}}, \quad 0 < q < 1 \quad (9) \\ M = N_j(h) + O(h^{\alpha_j}), \quad j = 1, 2, \cdots, m-1. \end{cases}$$

$O(h^{\alpha_1})$	$O(h^{\alpha_2})$	$O(h^{\alpha_3})$	$O(h^{\alpha_4})$
$1: N_1(h) = N(h)$			
$2: N_1(qh)$	$3: N_2(h)$		
$4: N_1(q^2 h)$	$5: N_2(qh)$	$6: N_3(h)$	
$7: N_1(q^3 h)$	$8: N_2(q^2 h)$	$9: N_3(qh)$	$10: N_4(h)$

外推顺序表 (1)

例1 已知

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(x_0) - \frac{h^4}{120} f^{(5)}(x_0) - \cdots$$

构造Richardson's Extrapolation,求f'(x_0).

$$f'(x_0) - \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} = \frac{h^2}{6} f^{(3)}(x_0) + \frac{h^4}{120} f^{(5)}(x_0) + \cdots$$

解：取 $N_1(h) = \dfrac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}, q = \dfrac{1}{2}$, 对比 (8), 这里 $\alpha_i = 2i$

$$\begin{cases} N_{j+1}(h) = \dfrac{N_j(\frac{h}{2}) - (\frac{1}{2})^{2j} N_j(h)}{1 - (\frac{1}{2})^{2j}} = N_j(\frac{h}{2}) + \dfrac{N_j(\frac{h}{2}) - N_j(h)}{4^j - 1} \quad (10) \\ f'(x_0) = N_j(h) + O(h^{2j}) \end{cases}$$

例2 设 $f(x)=xe^x, x_0=2.0$, $h=0.2$,用例1中的外推法，求f'(2).

解：取 $N_1(h) = \dfrac{f(2+h) - f(2-h)}{2h}$, $N_{j+1}(h) = N_j(\dfrac{h}{2}) + \dfrac{N_j(\frac{h}{2}) - N_j(h)}{4^j - 1}$

$O(h^2)$	$O(h^4)$	$O(h^6)$
$1: N_1(0.2) = 22.414160$		
$2: N_1(0.1) = 22.228786$	$3: N_2(0.2) = 22.166995$	
$4: N_1(0.05) = 22.182564$	$5: N_2(0.1) = 22.167157$	$6: N_3(0.2) = 22.167168$

外推顺序表 (2)

f'(2)=22.167168…精确到小数点后6位。

注意：外推次数不能过多，否则，步长减小，舍入误差会增大。

可以证明 3点公式: $f'(x_0) \approx \dfrac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}$ 经过1次外推

即导出 5点公式:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 - 2h_1) - 8f(x_0 - h_1) + 8f(x_0 + h_1) - f(x_0 + 2h_1)}{12h_1}, h_1 = \frac{h}{2}$$

在表（2）中，$N_2(0.2)$就是5点公式当$h_1=0.1$时的结果；
$N_2(0.1)$就是5点公式当$h_1=0.05$时的结果。

注意：外推次数不能过多，否则，步长减小，舍入误差会增大。

三次样条插值误差定理

- 定理1 设被插函数 $f(x) \in C^4[a,b]$，插值区间的划分为 $\Delta: a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$
- 并记最大步长 $h = \max\limits_{0 \le i \le n-1} (x_{i+1} - x_i)$，则第一、二边界条件下的三次样条插值多项式*s(x)*及其导数*s'(x)*和*s"(x)*具有误差估计

$$\left\| f^{(k)}(x) - s^{(k)}(x) \right\|_\infty \le c_k h^{4-k} \left\| f^{(4)}(x) \right\|_\infty, k = 0,1,2$$

其中，$c_0 = \dfrac{5}{384}, c_1 = \dfrac{1}{24}, c_2 = \dfrac{3}{8}$。

$$\| f(x) \|_\infty = \max_{a \le x \le b} | f(x) |$$

作业

习题 9
P324: 9