

计算方法及 MATLAB 实现

郑勋烨 编著

主审： 高世臣 褚宝增 王祖朝 王翠香

副审： 李少琪 李明霞 赵琳琳 赵俊芳

国防工业出版社

第6节 数值微分

(Numerical Differentiation)

数值微分是用来求导的数值方法. 但是微分通常是非常敏感甚至“病态”的问题. 自变量数据的微小扰动可能引起巨大误差, 造成数值不稳定. 并且数值微分的截断误差与舍入误差构成一对类似“测不准原理” (Uncertainty Principle) 的矛盾: 截断误差与舍入误差二者不能同时达到最小. 我们将在本节证明这一结论.

但求解常或偏微分方程的近似解时我们有时需要数值微分. 如果原始函数充分光滑, 还可以用插值函数的一阶或二阶导函数近似原始函数的相应导函数值.

有限差分方法是用有限差分或有限差商来逼近导数，因为我们知道 导数即为差商的极限，因而可用差商逼近导数：

$$f'(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} f[x_0, x] = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

差分方法更一般的形式是用 Taylor 公式将连续可微函数 $f(x)$ 在微分点 a 附近展开到某阶余项的形式。显然，这一方法适合求某点的导数值。

如果摆在我们面前的是一张自变量与函数值的数据表 (Data Tabular):

| | | | | | | | |
|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| x_i | x_0 | x_1 | x_2 | x_3 | x_4 | x_5 | \cdots |
| $f(x_i)$ | $f(x_0)$ | $f(x_1)$ | $f(x_2)$ | $f(x_3)$ | $f(x_4)$ | $f(x_5)$ | \cdots |

则 多项式插值方法 更为适宜. 它可以同时导出多点的导数值. 倘若数据具有周期性, 也可考虑 三角多项式插值方法. 它的计算机实现要比 有限差分方法 容易.

此外, 经典的 理查森外推加速方法(Richardson's Extrapolation Acceleration) 可以加快数值微分公式的收敛性, 获得更高精度的导数值. 这是同时适用于数值微分和数值积分的古老方法.

- 1. 差分公式 (Difference Formulae)

最基本的几个 数值微分公式 包括 向前差分公式 (Forward Difference)、 向后差分公式 (Backward Difference) 和 中点公式 (Mid-point Formula). 它们都可以由 Taylor 公式轻松地导出.

【定义 1】数值微分 (Numerical Differentiation)

简言之，数值微分就是用函数值的线性组合来近似表达导函数值的方法.

【定理 1】向前差分公式与向后差分公式 (Forward and Backward Difference)

由 Taylor 公式，将连续可微函数 $f(x)$ 在点 a 附近展开到二阶余项形式：

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(\xi)}{2}(x - a)^2$$

这里我们选取 ξ 为微分中值点. 下面的记号 ξ_1, ξ_2 等等表示同样的意思.

取步长 $h > 0$, 令点 $x = a + h$, 则 $x - a = h$. 于是有

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

移项整理获得连续可微函数 $f(x)$ 在点 a 处的导函数值的表达

$$f'(a) = \frac{f(a + h) - f(a)}{h} - \frac{f''(\xi_1)}{2}h = \frac{f(a + h) - f(a)}{h} + O(h)$$

于是有

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a + h) - f(a)}{h} \quad (*)$$

称为 向前差分公式 (Forward Difference). 显然, 其余项为 $O(h)$, 故 向前差分公式 具有一阶精度.

同理, 取步长 $h > 0$, 令点 $x = a - h$, 则 $x - a = -h$. 于是有

$$f(a - h) = f(a) - f'(a)h + \frac{f''(\xi_2)}{2}h^2$$

移项整理获得连续可微函数 $f(x)$ 在点 a 处的导函数值的表达

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

于是有

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a) - f(a - h)}{h} \quad (*)$$

称为 向后差分公式 (Backward Difference). 显然, 其余项为 $O(h)$, 故 向后差分公式 具有一阶精度.

若设在闭区间 $I = [a - h, a + h]$ 上连续可微函数 $f(x)$ 的二阶导函数 $f''(x)$ 具有最大值 $M_2 > 0$, 即

$$\max_{[a-h, a+h]} |f''(x)| \leq M_2$$

则显然 向前和向后公式 均有 误差估计

$$|f'(a) - G(h)| \leq \frac{M_2}{2}h \quad (*)$$

【定理 2】 中点公式 (Mid-point Formula) 或中心差分公式 (Central Difference)

由 Taylor 公式，将连续可微函数 $f(x)$ 在点 a 展开到三阶余项形式：

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2}(x - a)^2 + \frac{f'''(\xi)}{6}(x - a)^3$$

取步长 $h > 0$, 令点 $x = a + h$, 则 $x - a = h$. 于是有

$$f(a + h) = f(a) + f'(a)h + \frac{f''(a)}{2}h^2 + \frac{f'''(\xi_1)}{6}h^3$$

同理, 令点 $x = a - h$, 则 $x - a = -h$. 于是有

$$f(a - h) = f(a) - f'(a)h + \frac{f''(a)}{2}h^2 - \frac{f'''(\xi_2)}{6}h^3$$

以上两个式子左右对应相减获得

$$f(a+h) - f(a-h) = 2f'(a)h + \frac{f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)}{6}h^3$$

于是移项整理获得连续可微函数 $f(x)$ 在点 a 处的导函数值的表达

$$\begin{aligned} f'(a) &= \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - \frac{f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)}{12}h^2 \\ &= \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - \frac{f'''(\zeta)}{6}h^2 \end{aligned}$$

$$\text{这里 } f'''(\zeta) := \frac{f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)}{2}$$

为三阶导函数的中值.

这里定义

$$G(h) := \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

则有

$$f'(a) = G(h) - \frac{f'''(\zeta)}{6}h^2 = G(h) + O(h^2)$$

从而有数值微分近似公式

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} \quad (*)$$

称为 中心差分公式 (Central Difference) 或 中点公式 (Mid-point Formula). 显然, 其余项为 $O(h^2)$, 故 中点公式 具有二阶精度.

若设在闭区间 $I = [a - h, a + h]$ 上连续可微函数 $f(x)$ 的三阶导函数 $f'''(x)$ 具有最大值 $M_3 > 0$, 即

$$\max_{[a-h, a+h]} |f'''(x)| \leq M_3$$

则显然 中点公式 有 误差估计

$$|f'(a) - G(h)| \leq \frac{M_3}{6} h^2 \quad (*)$$

【命题 1】 中点公式的截断误差 (Truncation Error of Mid-point Formula)

由 Taylor 公式, 将连续可微函数 $f(x)$ 在点 a 展开到高阶形式:

$$\begin{aligned} f(x) = & f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(x-a)^3 \\ & + \frac{f^{(4)}(a)}{4!}(x-a)^4 + \frac{f^{(5)}(a)}{5!}(x-a)^5 + \cdots \end{aligned}$$

取步长 $h > 0$, 令点 $x = a + h$, 则 $x - a = h$. 于是有

$$\begin{aligned} f(a+h) &= f(a) + f'(a)h + \frac{f''(a)}{2!}h^2 + \frac{f'''(a)}{3!}h^3 \\ &+ \frac{f^{(4)}(a)}{4!}h^4 + \frac{f^{(5)}(a)}{5!}h^5 + \dots \end{aligned}$$

同理, 令点 $x = a - h$, 则 $x - a = -h$. 于是有

$$\begin{aligned} f(a-h) &= f(a) - f'(a)h + \frac{f''(a)}{2!}h^2 - \frac{f'''(a)}{6}h^3 \\ &+ \frac{f^{(4)}(a)}{4!}h^4 - \frac{f^{(5)}(a)}{5!}h^5 + \dots \end{aligned}$$

以上两个式子左右对应相减获得

$$f(a+h) - f(a-h) = 2f'(a)h + 2\frac{f'''(a)}{3!}h^3 + 2\frac{f^{(5)}(a)}{5!}h^5 + \dots$$

于是代入 中点公式 获得表达

$$G(h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} = f'(a) + \frac{f'''(a)}{3!}h^2 + \frac{f^{(5)}(a)}{5!}h^4 + \dots$$

于是有结论： 中点公式的步长 h 越小，截断误差就越小.

【命题 2】 中点公式的舍入误差 (Roundoff Error of Mid-point Formula)

由 中点公式

$$G(h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

显然, 步长 h 越小, $f(a+h)$ 与 $f(a-h)$ 越接近, 即两个相近的数相减, 我们知道这将造成有效数字的大量损失, 从而使得中点公式的舍入误差 (Roundoff Error) 迅速增加. 于是有结论: 中点公式的步长 h 越小, 舍入误差就越大.

由以上命题，我们看到一对不可调和的矛盾：步长 h 越小，截断误差就越小，但舍入误差却越大。因此步长 h 不可太小，也不可太大。鱼与熊掌不可得兼。“中庸之道”又在此适用。如何选取“恰当的”或“最优的” (optimal) 步长，成为关键的问题。那么如何选取呢？

假定在求函数值 $f(a + h)$ 和 $f(a - h)$ 时获得近似计算值为 $\tilde{f}(a + h)$ 和 $\tilde{f}(a - h)$, 并分别产生舍入误差 $e(a + h)$ 和 $e(a - h)$, 则有

$$f(a + h) = \tilde{f}(a + h) + e(a + h)$$

$$f(a - h) = \tilde{f}(a - h) + e(a - h)$$

代入中点公式有

$$\begin{aligned} f'(a) &= G(h) - \frac{f'''(\zeta)}{6} h^2 \\ &= \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - \frac{f'''(\zeta)}{6} h^2 \\ &= \frac{\tilde{f}(a+h) + e(a+h) - \tilde{f}(a-h) - e(a-h)}{2h} - \frac{f'''(\zeta)}{6} h^2 \\ &= \frac{\tilde{f}(a+h) - \tilde{f}(a-h)}{2h} + \frac{e(a+h) - e(a-h)}{2h} - \frac{f'''(\zeta)}{6} h^2 \end{aligned}$$

产生的 近似总误差 为

$$\begin{aligned} f'(a) - \tilde{G}(h) &= f'(a) - \frac{\tilde{f}(a+h) - \tilde{f}(a-h)}{2h} \\ &= \frac{e(a+h) - e(a-h)}{2h} - \frac{f'''(\zeta)}{6}h^2 \end{aligned}$$

其中 $\frac{e(a+h) - e(a-h)}{2h}$ 为 舍入误差 部分, $-\frac{f'''(\zeta)}{6}h^2$ 为 截断误差 部分.

设在闭区间 $I = [a - h, a + h]$ 上连续可微函数 $f(x)$ 的三阶导函数 $f'''(x)$ 具有最大值 $M_3 > 0$, 即

$$\max_{[a-h, a+h]} |f'''(x)| \leq M_3$$

并设舍入误差 $e(a + h)$ 和 $e(a - h)$ 存在小上界 $\varepsilon > 0$, 即

$$\max_{[a-h, a+h]} |e(a \pm h)| \leq \varepsilon$$

则显然 中点公式 有 误差上界估计

$$|f'(a) - \tilde{G}(h)| \leq \frac{\varepsilon + \varepsilon}{2h} + \frac{M_3}{6}h^2 = \frac{\varepsilon}{h} + \frac{M_3}{6}h^2$$

显然, 步长 h 越小, 截断误差上界 $\frac{M_3}{6}h^2$ 就越小, 但舍入误差上界 $\frac{\varepsilon}{h}$ 却越大. 我们要确定一个 最优步长 (optimal step-size).

引入关于步长 h 的 误差上界函数

$$T(h) = \frac{\varepsilon}{h} + \frac{M_3}{6}h^2$$

导函数

$$T'(h) = -\frac{\varepsilon}{h^2} + \frac{M_3}{3}h$$

驻点由方程 $T'(h) = 0$ 决定, 即

$$-\frac{\varepsilon}{h^2} + \frac{M_3}{3}h = 0$$

从而 最优步长 (optimal step-size) 为

$$h = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{M_3}}$$

由此我们有如下结论.

【定理 3】 数值微分中点公式的误差上界估计和最优步长 (optimal step-size)

设在闭区间 $I = [a - h, a + h]$ 上连续可微函数 $f(x)$ 的三阶导函数 $f'''(x)$ 具有最大值 $M_3 > 0$, 即

$$\max_{[a-h, a+h]} |f'''(x)| \leq M_3$$

并设舍入误差 $e(a + h)$ 和 $e(a - h)$ 存在小上界 $\varepsilon > 0$, 即

$$\max_{[a-h, a+h]} |e(a \pm h)| \leq \varepsilon$$

则 中点公式

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

有 误差上界估计

$$|f'(a) - \tilde{G}(h)| \leq \frac{\varepsilon}{h} + \frac{M_3}{6}h^2$$

并且 最优步长 (optimal step-size) 为

$$h = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{M_3}}$$

类似地我们有关于数值微分向前差分公式的误差上界估计和最优步长 (optimal step-size) 的命题. 其证明亦类似.

【定理 4】 数值微分向前差分公式的误差上界估计和最优步长 (optimal step-size)

设在闭区间 $I = [a - h, a + h]$ 上连续可微函数 $f(x)$ 的二阶导函数 $f''(x)$ 具有最大值 $M_2 > 0$, 即

$$\max_{[a-h, a+h]} |f''(x)| \leq M_2$$

并设舍入误差 $e(a + h)$ 和 $e(a - h)$ 存在小上界 $\varepsilon > 0$, 即

$$\max_{[a-h, a+h]} |e(a \pm h)| \leq \varepsilon$$

则 向前差分公式

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

有 误差上界估计

$$|f'(a) - \tilde{G}(h)| \leq \frac{2\varepsilon}{h} + \frac{M_2}{2}h$$

并且 最优步长 (optimal step-size) 为 $h = 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{M_2}}$.

此估计同样适用于 向后差分公式.

【例 1】 向前差分公式 试利用 向前差分公式 (Forward Difference)

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

及 误差估计

$$|f'(a) - G(h)| \leq \frac{M_2}{2}h$$

对于函数 $f(x) = \ln x$, 求点 $a = 1.8$ 处的数值微分 $f'(a) = f'(1.8)$. 并估计误差上界.

其精确值是 $f'(1.8) = \frac{1}{1.8} \approx 0.5555556$.

对于函数 $f(x) = \ln x$, 在点 $a = 1.8$ 处的数值微分由 向前差分公式 (Forward Difference) 为

$$\begin{aligned} f'(a) &\approx G(h) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} = \frac{f(1.8+h) - f(1.8)}{h} \\ &= \frac{\ln(1.8+h) - \ln(1.8)}{h} \end{aligned}$$

由于函数 $f(x) = \ln x$ 的导函数为

$$f'(x) = \frac{1}{x}, \quad f''(x) = -\frac{1}{x^2}, \quad f'''(x) = \frac{2}{x^3}$$

在区间 $[a, a + h]$ 二阶导函数 $f''(x)$ 具有最大值 $M_2 > 0$ 即

$$M_2 = \max_{[a, a+h]} |f''(x)| = \max_{[a, a+h]} \left| \frac{1}{x^2} \right| \leq \frac{1}{a^2}$$

进而 误差估计 为

$$|f'(a) - G(h)| \leq \frac{M_2}{2}h \leq \frac{h}{2a^2}$$

即在 $[1.8, 1.8 + h]$ 上, 误差上界估计 为

$$|f'(1.8) - G(h)| \leq \frac{M_2}{2}h \leq \frac{h}{2(1.8)^2}$$

例如，取步长 $h = 0.1$ 时，函数值

$$f(a + h) = f(1.8 + 0.1) = \ln 1.9$$

$$= 0.64185388617239477599103597720349,$$

向前差分公式 (Forward Difference) 确定的数值微分值

$$\begin{aligned}
 G(h) &= \frac{f(a+h) - f(a)}{h} = \frac{f(1.8+h) - f(1.8)}{h} \\
 &= \frac{\ln(1.8+0.1) - \ln(1.8)}{0.1} \\
 &= \frac{0.641853886 - 0.58778666}{0.1} \\
 &= 0.540672212
 \end{aligned}$$

误差上界估计 为

$$|f'(1.8) - G(h)| \leq \frac{M_2}{2}h \leq \frac{0.1}{2(1.8)^2} = 0.0154321$$

【例 2】 中点公式 (Mid-point Formula)

试利用 中点公式 (Mid-point Formula)

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

及 误差估计

$$|f'(a) - G(h)| \leq \frac{M_3}{6} h^2$$

对于函数 $f(x) = \sin x$, 求点 $a = 0.9$ 处的数值微分 $f'(a) = f'(0.9)$. 并估计误差上界.

其精确值是

$$f'(0.9) = \cos 0.9 \approx 0.62160996827066445648471615140713.$$

【解】

对于函数 $f(x) = \sin x$, 在点 $a = 1.8$ 处的数值微分由 中点公式 (Mid-point Formula) 为

$$\begin{aligned} f'(a) &\approx G(h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} \\ &= \frac{f(0.9+h) - f(0.9-h)}{2h} \\ &= \frac{\sin(0.9+h) - \sin(0.9-h)}{2h} \end{aligned}$$

由于函数 $f(x) = \sin x$ 的导函数为

$$f'(x) = \cos x, \quad f''(x) = -\sin x, \quad f'''(x) = -\cos x$$

在区间 $[a - h, a + h]$ 三阶导函数 $f'''(x)$ 具有最大值 $M_3 > 0$ 即

$$M_3 = \max_{[a-h, a+h]} |f'''(x)| = \max_{[a-h, a+h]} |\cos x|$$

进而 误差估计 为

$$|f'(a) - G(h)| \leq \frac{M_3}{6} h^2 \leq \frac{1}{6} h^2 \max_{[a-h, a+h]} |\cos x|$$

例如，取步长 $h = 0.1$ 时，在点 $a = 0.9$ 处由 中点公式 (Mid-point Formula) 确定的数值微分值

$$\begin{aligned} G(h) &= \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} = \frac{f(0.9+h) - f(0.9-h)}{2h} \\ &= \frac{\sin(0.9+0.1) - \sin(0.9-0.1)}{0.2} = \frac{\sin 1 - \sin(0.8)}{0.2} \\ &= \frac{0.8414709848 - 0.71735609}{0.2} \\ &= 0.620574469 \end{aligned}$$

在区间 $[0.8, 1]$ 上, 误差上界估计 为

$$\begin{aligned} |f'(1.8) - G(h)| &\leq \frac{M_3}{6} h^2 \leq \frac{1}{6} \times 0.1^2 \times \max_{[0.8, 1]} |\cos x| \\ &\leq \frac{1}{6} \times 0.1^2 \times \cos 0.8 \\ &= \frac{0.01}{6} \times 0.69670670934716542092074998164232 \\ &= 0.0011611778489119423682012499694039 \end{aligned}$$

- 3. 插值型数值微分公式 (Interpolation Method)

下面我们利用 Lagrange 插值多项式来构造数值微分公式. 由此获得的一系列数值微分公式包括 三点公式 和 五点公式 等等通称为 插值型数值微分公式.

【定义 2】 插值型数值微分公式 (Interpolation Method)

选取可微函数 $y = f(x)$ 在区间 $I = [a, b]$ 上某种剖分（分点等距或不等距） $a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$ 下的

插值函数 $L_n(x) = \sum_{j=0}^n l_j(x) f(x_j)$ 作为它的近似，则它在区间

$I = [a, b]$ 上的微分也近似等于插值函数在区间 $I = [a, b]$ 上的微分：

$$f'(x) \approx L'_n(x)$$

自变量点 $a = x_0, x_1, x_2, \cdots, x_{n-1}, x_n = b$ 是微分节点同时也是插值节点；区间 $I = [a, b]$ 是微分区间同时也是插值区间。

插值型数值微分公式 即

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

这里辅助函数 $\omega_{n+1}(x)$ 定义如前，是以微分节点为零点的 $n+1$ 次首一多项式：

$$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0) \cdots \cdots (x - x_n) = \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

因插值余项为：

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

$$= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

故微分余项为 插值余项的微分：

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

$$= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x) + \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!} \frac{df^{(n+1)}(\xi)}{dx}$$

对于限定在某个节点 $x = x_k$ 处的数值微分, 由于

$$\begin{aligned}\omega_{n+1}(x_k) &= 0, \quad \omega'_{n+1}(x_k) = \prod_{k \neq j, j=0}^n (x_k - x_j) \\ &= (x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)\end{aligned}$$

从而上述 插值余项的微分 的第二项为 0. 而第一项成为一个确定的表示, 形式上看就是对插值余项的辅助函数 $\omega_{n+1}(x)$ 在某个节点 $x = x_k$ 处的微分 $\omega'_{n+1}(x_k)$.

此时我们有 插值型数值微分公式 即

$$\begin{aligned} f'(x_k) &= L'_n(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x_k) \\ &= \sum_{j=0}^n l'_j(x_k) f(x_j) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_k))}{(n+1)!} \prod_{k \neq j, j=0}^n (x_k - x_j) \end{aligned}$$

称为 $n+1$ 点公式 ($n+1$ -point Formula).

插值型数值微分余项 即

$$\begin{aligned} R[f] &= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x_k) \\ &= \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_k))}{(n+1)!} \prod_{k \neq j, j=0}^n (x_k - x_j) \end{aligned}$$

【定理 1】 两点公式 (Two-point Formula)

回顾简单的 线性插值函数 (Linear Interpolating Function)

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

定义步长 $h = x_1 - x_0$, 则有线性组合表达

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

关于 x 求导得

$$\begin{aligned} L'(x) &= -\frac{1}{h}f(x_0) + \frac{1}{h}f(x_1) \\ &= \frac{1}{h}(f(x_1) - f(x_0)) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \end{aligned}$$

从而我们有 两点公式 即

$$\begin{cases} L'(x_0) = \frac{1}{h}(f(x_1) - f(x_0)) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \\ L'(x_1) = \frac{1}{h}(f(x_1) - f(x_0)) = \frac{f(x_1) - f(x_1 - h)}{h} \end{cases}$$

由于线性插值余项

$$R_1(x) = \frac{f''(\xi)}{2!}\omega_2(x) = \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_0)(x - x_1)$$

从而 两点公式的余项 为

$$\left\{ \begin{array}{l} R_1'(x_0) = \frac{f''(\xi(x_0))}{2!} \omega_2'(x_0) \\ \quad = \frac{f''(\xi(x_0))}{2!} (x_0 - x_1) = -\frac{f''(\xi(x_0))}{2!} h \\ R_1'(x_1) = \frac{f''(\xi(x_1))}{2!} \omega_2'(x_1) \\ \quad = \frac{f''(\xi(x_1))}{2!} (x_1 - x_0) = \frac{f''(\xi(x_1))}{2!} h \end{array} \right.$$

此时我们有挂有余项的 两点公式 即

$$\begin{cases} f'(x_0) = L'(x_0) + R'_1(x_0) = \frac{1}{h}(f(x_1) - f(x_0)) - \frac{f''(\xi)}{2!}h \\ f'(x_1) = L'(x_1) + R'_1(x_1) = \frac{1}{h}(f(x_1) - f(x_0)) + \frac{f''(\xi)}{2!}h \end{cases}$$

【定理 2】 三点公式 (Three-point Formula)

回顾 抛物插值函数 (Parabolic Interpolation)

$$\begin{aligned} L_2(x) &= l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + l_2(x)y_2 \\ &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \\ &\quad \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2) \end{aligned}$$

现在取等距节点，定义步长 $h = x_1 - x_0$ ，则节点为 $x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$. 引入新参数 t ，令 $x = x_0 + th$ ，于是有表达 (如下的节点线性变换技巧在 Newton-Cotes 公式系数计算亦可运用)：

$$\begin{aligned}
L_2(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \\
&\quad \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_1)(x_2-x_1)}f(x_2) \\
&= \frac{(t-1)(t-2)h^2}{2h^2}f(x_0) + \frac{(t-0)(t-2)h^2}{-h^2}f(x_1) + \\
&\quad \frac{(t-0)(t-1)h^2}{2h^2}f(x_2) \\
&= \frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0) - t(t-2)f(x_1) + \frac{1}{2}t(t-1)f(x_2)
\end{aligned}$$

即

$$L_2(x_0 + th) = \frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0) - t(t-2)f(x_1) + \frac{1}{2}t(t-1)f(x_2)$$

利用求导的链式法则，关于 t 求导得 (注意 $x_0 + th$ 关于 t 求导得 h)

$$\begin{aligned}
 hL_2'(x_0 + th) &= \\
 &= \frac{1}{2}(2t - 3)f(x_0) - (2t - 2)f(x_1) + \frac{1}{2}(2t - 1)f(x_2) \\
 &= \frac{1}{2}[(2t - 3)f(x_0) - (4t - 4)f(x_1) + (2t - 1)f(x_2)]
 \end{aligned}$$

从而

$$\begin{aligned} & L_2'(x_0 + th) \\ &= \frac{1}{2h}[(2t - 3)f(x_0) - (4t - 4)f(x_1) + (2t - 1)f(x_2)] \end{aligned}$$

从而分别取参数 $t = 0, 1, 2$, 对应 $x = x_0, x_1, x_2$. 于是我们有三点公式 即

$$\left\{ \begin{array}{lcl} L_2'(x_0) & = & \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)] \\ L_2'(x_1) & = & \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)] \\ L_2'(x_2) & = & \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)] \end{array} \right.$$

由于抛物插值余项

$$\begin{aligned} R_2(x) &= \frac{f'''(\xi)}{3!} \omega_3(x) = \frac{f'''(\xi)}{6} \omega_3(x) \\ &= \frac{f'''(\xi)}{6} (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \end{aligned}$$

从而 三点公式的余项 为

$$\left\{ \begin{array}{l} R_2'(x_0) = \frac{f'''(\xi(x_0))}{6} \omega_3'(x_0) \\ \quad = \frac{f'''(\xi(x_0))}{6} (x_0 - x_1)(x_0 - x_2) = \frac{f'''(\xi(x_0))}{3} h^2 \\ R_2'(x_1) = \frac{f'''(\xi(x_1))}{6} \omega_3'(x_1) \\ \quad = \frac{f'''(\xi(x_1))}{6} (x_1 - x_0)(x_1 - x_2) = -\frac{f'''(\xi(x_1))}{6} h^2 \\ R_2'(x_2) = \frac{f'''(\xi(x_2))}{6} \omega_3'(x_2) \\ \quad = \frac{f'''(\xi(x_2))}{6} (x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = \frac{f'''(\xi(x_2))}{3} h^2 \end{array} \right.$$

此时我们有挂有余项的 三点公式 即

$$\left\{ \begin{array}{l} f'(x_0) = L'_2(x_0) + R'_2(x_0) \\ \quad = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)] + \frac{f'''(\xi(x_0))}{3}h^2 \\ f'(x_1) = L'_2(x_1) + R'_2(x_1) \\ \quad = \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)] - \frac{f'''(\xi(x_1))}{6}h^2 \\ f'(x_2) = L'_2(x_2) + R'_2(x_2) \\ \quad = \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)] + \frac{f'''(\xi(x_2))}{3}h^2 \end{array} \right.$$

由于节点为 $x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$. 于是 三点公式 即

$$\left\{ \begin{array}{l} f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] \\ \quad + \frac{f'''(\xi_0)}{3}h^2 \\ f'(x_0 + h) = \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_0 + 2h)] \\ \quad - \frac{f'''(\xi_1)}{6}h^2 \\ f'(x_0 + 2h) = \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_0 + h) + 3f(x_0 + 2h)] \\ \quad + \frac{f'''(\xi_2)}{3}h^2 \end{array} \right.$$

或可在后两个公式里，将 $x_0 + h$ 替换为 x_0 和将 $x_0 + 2h$ 替换为 x_0 ，由此获得在点 x_0 处的三个数值微分公式

$$\left\{ \begin{array}{l} f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] \\ \quad + \frac{f'''(\xi_0)}{3}h^2 \\ f'(x_0) = \frac{1}{2h}[f(x_0 + h) - f(x_0 - h)] \\ \quad - \frac{f'''(\xi_1)}{6}h^2 \\ f'(x_0) = \frac{1}{2h}[f(x_0 - 2h) - 4f(x_0 - h) + 3f(x_0)] \\ \quad + \frac{f'''(\xi_2)}{3}h^2 \end{array} \right.$$

显然，其中第二个公式就是我们熟悉的 中点公式. 它少了一个点的值. 而第一个公式里用步长 $-h$ 替换 h , 就得到第三个公式, 所以这两个公式是等价的. 因此实际上我们只有两个 三点公式

$$\left\{ \begin{array}{l} f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] + \\ \quad \frac{f'''(\xi_0)}{3}h^2, \quad \xi_0 \in [x_0, x_0 + 2h]; \\ f'(x_0) = \frac{1}{2h}[f(x_0 + h) - f(x_0 - h)] - \frac{f'''(\xi_1)}{6}h^2; \\ \quad \xi_1 \in [x_0 - h, x_0 + h]. \end{array} \right. \quad *$$

【定理 3】 二阶三点公式 (2-order Three-point Formula)

依上文所设，我们已经有

$$\begin{aligned} & L_2'(x_0 + th) \\ &= \frac{1}{2h}[(2t - 3)f(x_0) - (4t - 4)f(x_1) + (2t - 1)f(x_2)] \end{aligned}$$

利用求导的链式法则，再次关于 t 求导得 (注意 $x_0 + th$ 关于 t 求导得 h)

$$\begin{aligned}
 & L_2''(x_0 + th) \\
 &= \frac{1}{2h^2} [2f(x_0) - 4f(x_1) + 2f(x_2)] \\
 &= \frac{1}{h^2} [f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)]
 \end{aligned}$$

从而取参数 $t = 1$, 对应 $x = x_1$. 于是我们有 二阶三点公式 即

$$L_2''(x_1) = \frac{1}{h^2} [f(x_1 - h) - 2f(x_1) + f(x_1 + h)]$$

或标记 $x_1 = a$, 将 二阶三点公式 等价地改写为

$$f''(a) \approx L_2''(a) = \frac{1}{h^2}[f(a-h) - 2f(a) + f(a+h)]$$

现在考虑其余项，我们依然用 Taylor 展开方法，取步长 $h > 0$ ，则有

$$f(a+h) = f(a) + f'(a)h + \frac{f''(a)}{2!}h^2 + \frac{f'''(a)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_+)}{4!}h^4$$

同理有

$$f(a-h) = f(a) - f'(a)h + \frac{f''(a)}{2}h^2 - \frac{f'''(a)}{6}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_-)}{4!}h^4$$

以上两个式子左右对应相加获得

$$f(a+h) + f(a-h) = 2f(a) + 2\frac{f''(a)}{2!}h^2 + \frac{f^{(4)}(\xi_+) + f^{(4)}(\xi_-)}{4!}h^4$$

于是移项整理获得挂有余项的 二阶三点公式 的表达

$$f''(a) = \frac{1}{h^2}[f(a-h) - 2f(a) + f(a+h)] - \frac{f^{(4)}(\xi_+) + f^{(4)}(\xi_-)}{24}h^2$$

取连续函数的中值点 $\xi \in \langle \xi_-, \xi_+ \rangle$ 使得

$$f^{(4)}(\xi) = \frac{f^{(4)}(\xi_+) + f^{(4)}(\xi_-)}{2}$$

于是挂有余项的 二阶三点公式 为

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

【例 1】 插值型数值微分公式

对于函数 $f(x) = xe^x$, 其在点 $a = 2$ 附近的精确函数值如下表所示:

| | | | | |
|----------|-----------|-----------|-----------|--|
| x_i | 1.8 | 1.9 | 2.0 | |
| $f(x_i)$ | 10.889365 | 12.703199 | 14.778112 | |

| | | | |
|----------|-----------|-----------|--|
| x_i | 2.1 | 2.2 | |
| $f(x_i)$ | 17.148957 | 19.855030 | |

I. 由于 $f'(x) = e^x(x+1)$, 在点 $a = 2$ 处的精确微分值是

$$f'(2) = e^2(2+1) = 3e^2 \approx 22.1671384752$$

取步长 $h = 0.1$. 试分别利用如下数值微分公式求点 $a = 2$ 处的数值微分 $f'(a) = f'(2)$. 并估计误差上界:

中点公式 (Mid-point Formula), 三点公式 (Three-point Formula), 五点公式 (Five-point Formula).

II. 由于 $f''(x) = e^x(x+2)$, 在点 $a = 2$ 处的精确二阶微分值是

$$f''(2) = e^2(2+2) = 4e^2 \approx 29.5561846336$$

取步长 $h = 0.1$. 试利用如下 二阶数值微分三点公式 (2-order Three-point Formula) 求点 $a = 2$ 处的数值微分

$f''(a) = f''(2)$. 并估计误差上界.

$$f''(a) = G(h) + O(h^4) = \frac{1}{h^2} [f(a-h) - 2f(a) + f(a+h)] - \frac{f^{(4)}(\xi)}{12} h^2$$

【解】

对于函数 $f(x) = xe^x$, 取步长 $h = 0.1$. 在点 $a = 2$ 处的数值微分分别为

(1) 中点公式 (Mid-point Formula)

$$\begin{aligned} f'(a) &\approx G(h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} \\ &= \frac{f(2.1) - f(1.9)}{0.2} = 22.228790. \text{ 误差上界约为 } 6.16 \times 10^{-2}. \end{aligned}$$

(2) 三点公式 (Three-point Formula)

$$\begin{aligned} f'(a) &\approx G(h) = \frac{1}{2h}[-3f(a) + 4f(a+h) - f(a+2h)] \\ &= \frac{1}{0.2}[-3f(2) + 4f(2.1) - f(2.2)] = 22.032310 \end{aligned}$$

误差上界约为 1.35×10^{-1} .

(3) 五点公式 (Five-point Formula):

$$\begin{aligned} f'(a) &\approx \frac{1}{12h} [f(a-2h) - 8f(a-h) + 8f(a+h) - f(a+2h)] \\ &= \frac{1}{1.2} [f(1.8) - 8f(1.9) + 8f(2.1) - f(2.2)] = 22.166996. \end{aligned}$$

误差上界约为 1.69×10^{-4} .

II. 取步长 $h = 0.1$. 利用 二阶数值微分三点公式 (2-order Three-point Formula) 求点 $a = 2$ 处的数值微分 $f''(a) = f''(2)$ 为

$$\begin{aligned} f''(a) &\approx \frac{1}{h^2} [f(a-h) - 2f(a) + f(a+h)] \\ &= \frac{1}{0.1^2} [f(1.9) - 2f(2) + f(2.1)] = 29.593200. \end{aligned}$$

误差上界约为 3.70×10^{-2} .

- 3. 数值微分的外推法 (Exrtapolation of Numerical Differentiation)

经典的 理查森外推加速方法(Richardson's Exrtapolation Acceleration) 可以加快数值微分 (积分) 公式的收敛性, 获得更高精度的导数 (积分) 值. 这是同时适用于数值微分和数值积分的古老方法. 虽然其得名缘自 L.F.Richardson 和 J.A.Gaunt 于 1927 年写的论文, 但其源流却可追溯至古中国和希腊.

【定理 1】 理查森外推加速方法 (Richardson's Extrapolation Acceleration)

设 F 是待逼近的某种量值 (导数或者积分), $F_1(h)$ 是依赖于步长 h 的近似函数, 对应余项为 h^{p_1} 阶, 即 $O(h^{p_1})$, 可写为

$$R(h) = F - F_1(h) = a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + \cdots + a_k h^{p_k} + \cdots$$

这里阶数 $0 < p_1 < p_2 < \cdots < p_k < \cdots$ 和系数 a_k 都是与步长 h 无关的常数. 现在的问题是能否由此构造出新的序列, 它逼近 F 的阶比 h^{p_1} 更高, 达到 h^{p_2} .

我们用中学已然熟知的等比数列求和的方法来解决.

设 F 是待逼近的量值, $F_1(h)$ 是依赖于步长 h 的近似函数, 对应余项为 h^{p_1} 阶, 即 $O(h^{p_1})$, 可写为

$$R(h) = F - F_1(h) = a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + \cdots + a_k h^{p_k} + \cdots$$

这里阶数 $0 < p_1 < p_2 < \cdots < p_k < \cdots$ 和系数 a_k 都是与步长 h 无关的常数.

将原逼近式中的步长 h 用 qh 代替, (其中 q 为小正数, 通常 $0 < q < 1$. 在二分法的情形, 即是 $q = \frac{1}{2}$) 则获得

$$R(qh) = F - F_1(qh) = a_1(qh)^{p_1} + a_2(qh)^{p_2} + \cdots + a_k(qh)^{p_k} + \cdots$$

再将原逼近式用 q^{p_1} 相乘, 则获得

$$\begin{aligned} q^{p_1} R(h) &= q^{p_1} F - q^{p_1} F_1(h) \\ &= a_1 q^{p_1} h^{p_1} + a_2 q^{p_1} h^{p_2} + \cdots + a_k q^{p_1} h^{p_k} + \cdots \end{aligned}$$

上述两式相减得

$$\begin{aligned} R(qh) - q^{p_1} R(h) &= (1 - q^{p_1})F - (F_1(qh) - q^{p_1} F_1(h)) \\ &= a_2(q^{p_2} - q^{p_1})h^{p_2} + \cdots + a_k(q^{p_k} - q^{p_1})h^{p_k} + \cdots \end{aligned}$$

设 $1 - q^{p_1} \neq 0$, 以之去除上式两端得

$$\begin{aligned} F - \frac{F_1(qh) - q^{p_1} F_1(h)}{1 - q^{p_1}} \\ = \frac{a_2(q^{p_2} - q^{p_1})h^{p_2} + \cdots + a_k(q^{p_k} - q^{p_1})h^{p_k} + \cdots}{1 - q^{p_1}} \end{aligned}$$

于是若令新的近似函数

$$F_2(h) = \frac{F_1(qh) - q^{p_1} F_1(h)}{1 - q^{p_1}}$$

则余项

$$F - F_2(h) = \frac{a_2(q^{p_2} - q^{p_1})}{1 - q^{p_1}} h^{p_2} + \dots = O(h^{p_2})$$

逼近阶为 h^{p_2} , 有所提高.

一般地，经过 m 次加速，设 $1 - q^{p_m-1} \neq 0$ ，则有

$$F_m(h) = \frac{F_{m-1}(qh) - q^{p_m-1} F_{m-1}(h)}{1 - q^{p_m-1}}$$

余项误差阶为 $O(h^{p_m})$. 这就是一般的 理查森外推加速方法.

特别地，当公比 $q = \frac{1}{2}$ 时，将原逼近式中的步长 h 用 qh 代替，对于二分步长的情形， $q = \frac{1}{2}$ ，则获得新的近似函数

$$F_2(h) = \frac{F_1(qh) - q^{p_1} F_1(h)}{1 - q^{p_1}} = \frac{F_1(\frac{1}{2}h) - (\frac{1}{2})^{p_1} F_1(h)}{1 - (\frac{1}{2})^{p_1}}$$

经过 m 次加速, 则有

$$\begin{aligned} F_m(h) &= \frac{F_{m-1}(\frac{1}{2}h) - (\frac{1}{2})^{2m} F_{m-1}(h)}{1 - (\frac{1}{2})^{2m}} \\ &= \frac{4^m F_{m-1}(\frac{h}{2}) - F_{m-1}(h)}{4^m - 1} \end{aligned}$$

余项误差阶为 $O(h^{2(m+1)})$.

数值微分 中点公式 为

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

其余项为 $O(h^2)$, 故具有二阶精度.

将理查森外推加速方法应用于中点公式, 即有中点公式 (Mid-point Formula) 的外推加速算法.

【定理 2】 中点公式的外推加速 (Exrtapolation of Mid-point Formula)

在中点公式的情形，步长 h 用 $\frac{1}{2}h$ 代替，则有

$$G_m(h) = \frac{4^m G_{m-1}(\frac{h}{2}) - G_{m-1}(h)}{4^m - 1}$$

记 $G_0^{(k)}$ 为步长二分 k 次求得的中点公式值， $G_m^{(k)}$ 为 m 次加速值，则

$$G_m^{(k)}(h) = \frac{4^m G_{m-1}^{(k)}(\frac{h}{2}) - G_{m-1}^{(k)}(h)}{4^m - 1} = \frac{4^m G_{m-1}^{(k+1)}(h) - G_{m-1}^{(k)}(h)}{4^m - 1}$$

误差阶为 $O(h^{2m+2})$.

上述结果可归纳为下面的简表.

中点公式的外推加速算法表

| j | h | $G_0^{(k)}$ | $G_1^{(k)}$ | $G_2^{(k)}$ | $G_3^{(k)}$ | $G_4^{(k)}$ | \dots |
|-----|----------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|---------|
| 0 | h | $G_0^{(0)}$ | | | | | |
| 1 | $\frac{h}{2}$ | $G_0^{(1)}$ | $G_1^{(0)}$ | | | | |
| 2 | $\frac{h}{4}$ | $G_0^{(2)}$ | $G_1^{(1)}$ | $G_2^{(0)}$ | | | |
| 3 | $\frac{h}{8}$ | $G_0^{(3)}$ | $G_1^{(2)}$ | $G_2^{(1)}$ | $G_3^{(0)}$ | | |
| 4 | $\frac{h}{16}$ | $G_0^{(4)}$ | $G_1^{(3)}$ | $G_2^{(2)}$ | $G_3^{(1)}$ | $G_4^{(0)}$ | \dots |
| 误差阶 | \vdots | $O(h^2)$ | $O(h^4)$ | $O(h^6)$ | $O(h^8)$ | $O(h^{10})$ | \dots |

【例 1】中点公式 (Mid-point Formula) 的外推加速

对于函数 $f(x) = xe^x$, 其在点 $a = 2$ 附近的精确函数值如下表所示:

| | | | | |
|----------|-----------|-----------|-----------|--|
| x_i | 1.8 | 1.9 | 2.0 | |
| $f(x_i)$ | 10.889365 | 12.703199 | 14.778112 | |

| | | | |
|----------|-----------|-----------|--|
| x_i | 2.1 | 2.2 | |
| $f(x_i)$ | 17.148957 | 19.855030 | |

由于 $f'(x) = e^x(x+1)$, 在点 $a = 2$ 处的精确微分值是

$$f'(2) = e^2(2+1) = 3e^2 \approx 22.1671384752$$

取步长 $h = 0.2$. 试利用如下数值微分中点公式求点 $a = 2$ 处的数值微分 $f'(a) = f'(2)$. 并用理查森外推方法加速.

【解】 数值微分 中点公式 为

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

对于函数 $f(x) = xe^x$, 利用其在点 $a = 2$ 附近的精确函数值代入中点公式计算, 我们有

$$\begin{aligned} G(h) &= \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} \\ &= \frac{1}{2h} [e^{a+h} - e^{a-h}] = \frac{1}{0.4} [e^{2.2} - e^{1.8}] \\ &= \frac{1}{0.4} [19.855030 - 10.889365] = 22.414160 \end{aligned}$$

步长 $h = 0.2$ 用 $\frac{1}{2}h = 0.1$ 代替, 则有

$$\begin{aligned} G\left(\frac{h}{2}\right) &= \frac{f\left(a + \frac{h}{2}\right) - f\left(a - \frac{h}{2}\right)}{h} \\ &= \frac{1}{h} \left[e^{a + \frac{h}{2}} - e^{a - \frac{h}{2}} \right] = \frac{1}{0.2} [e^{2.1} - e^{1.9}] \\ &= \frac{1}{0.2} [17.148957 - 12.703199] = 22.228786 \end{aligned}$$

将理查森外推加速方法应用于中点公式，即有第一次加速值

$$\begin{aligned} G_1^{(0)}(h) &= \frac{4G(\frac{h}{2}) - G(h)}{3} \\ &= \frac{4 \times 22.228786 - 22.414160}{3} = 22.166995 \end{aligned}$$

同理，给出步长二分 2 次求得的中点公式值. 步长 $h = 0.2$ 用 $\frac{1}{2^2}h = \frac{1}{4}h = 0.05$ 代替，则有

$$\begin{aligned} G_0^{(2)}(h) &= G\left(\frac{h}{4}\right) = \frac{f\left(a + \frac{h}{4}\right) - f\left(a - \frac{h}{4}\right)}{\frac{1}{2}h} \\ &= \frac{2}{h} \left[e^{a+\frac{h}{4}} - e^{a-\frac{h}{4}} \right] = \frac{1}{0.1} [e^{2.05} - e^{1.95}] = 22.182564 \end{aligned}$$

将理查森外推加速方法应用于中点公式，即有第一次加速值
(首次加速值位于表中首列，组合系数为 $\frac{4}{3}, -\frac{1}{3}$)

$$\begin{aligned} G_1^{(1)}(h) &= \frac{4G(\frac{h}{4}) - G(\frac{h}{2})}{3} \\ &= \frac{4 \times 22.182564 - 22.228786}{3} = 22.167157 \end{aligned}$$

于是对角线元素第二次加速值为（第二次加速值位于表中第二列，组合系数为 $\frac{16}{15}, -\frac{1}{15}$ ）

$$\begin{aligned} G_2^{(0)}(h) &= \frac{16G_1^{(1)}(h) - G_1^{(0)}(h)}{15} \\ &= \frac{16 \times 22.167157 - 22.166995}{15} = 22.167168 \end{aligned}$$

一般地，记 $G_0^{(k)}$ 为步长二分 k 次求得的中点公式值， $G_m^{(k)}$ 为 m 次加速值，则

$$G_m^{(k)}(h) = \frac{4^m G_{m-1}^{(k)}\left(\frac{h}{2}\right) - G_{m-1}^{(k)}(h)}{4^m - 1} = \frac{4^m G_{m-1}^{(k+1)}(h) - G_{m-1}^{(k)}(h)}{4^m - 1}$$

误差阶为 $O(h^{2m+2})$.

上述结果可归纳为下面的简表.

中点公式的外推加速算法表

| k | h | $G_0^{(k)}$ | $G_1^{(k)}$ | $G_2^{(k)}$ |
|-----|---------------|-------------|-------------|-------------|
| 0 | h | 22.414160 | | |
| 1 | $\frac{h}{2}$ | 22.228786 | 22.166995 | |
| 2 | $\frac{h}{4}$ | 22.182564 | 22.167157 | 22.167168 |
| 误差阶 | \vdots | $O(h^2)$ | $O(h^4)$ | $O(h^6)$ |