第六章

数据拟合和函数逼近(1－2)

第一节　引言

第二节　数值微分

第2节　数值微分

➢ 2.1　数值微分的概念

定义1. 如果函数$f(x)$是以表格形式给出，近似地求函数在某点的导数值，或者说某点上函数的导数用该点附近节点上的函数值近似表示，称为**数值微分**。

比如图像的梯度，拉普拉斯算子，点云的法向量等。

➢ 2.1 数值微分的基本方法

一、 差商型求导公式

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)+\frac{h^3}{6}f'''(x_0)$$
$$+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0)+\frac{h^5}{120}f^{(5)}(x_0)+O(h^6) \qquad (1)$$

$$f(x_0-h)=f(x_0)-hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)-\frac{h^3}{6}f'''(x_0)$$
$$+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0)-\frac{h^5}{120}f^{(5)}(x_0)+O(h^6) \qquad (2)$$

(1)式−(2)式、(1)式+(2)式，整理得：

$$f'(x_0)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}-\frac{h^2}{3}f'''(x_0)+O(h^4) \qquad (3)$$

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

略去以上公式右端中的导数项或称为截断误差项，则得$f(x)$在x_0点的一阶和二阶导数的数值计算公式：

$$f'(x_0)\approx\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$ 一阶导数的向前差商公式

$$f'(x_0)\approx\frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}$$ 一阶导数的向后差商公式

$$f'(x_0)\approx\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$$ 一阶导数的中心差商公式

$$\boxed{f''(x_0)\approx\frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}}$$ 二阶导数的中心差商公式

二、 插值型求导公式

给定插值数据：

x_0	x_1	$\cdots$	x_n
$f(x_0)$	$f(x_1)$	$\cdots$	$f(x_n)$

可建立Lagrange插值公式 $L_n(x)$，使得：

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

所以有$f'(x) \approx L_n'(x)$，$f''(x) \approx L_n''(x)$ 等等。

误差公式

因为$R_n(x)=f(x)-L_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$，$\xi$介于$x_0,\cdots,x_n,x$之间

$$R'(x)=f'(x)-L_n'(x)=\frac{1}{(n+1)!}\left[\frac{\mathrm{d}f^{(n+1)}(\xi)\omega_{n+1}(x)}{\mathrm{d}x}\right]$$

注：$\xi=\xi_x$

$$\frac{\mathrm{d}f^{(n+1)}(\xi)\omega_{n+1}(x)}{\mathrm{d}x}=\omega_{n+1}(x)\frac{df^{(n+1)}(\xi_x)}{dx}+f^{(n+1)}(\xi)\frac{d\omega_{n+1}(x)}{dx}$$

又因为$\omega_{n+1}(x_k)=0$，故节点处的导数计算公式为：

$$f'(x_k)=L_n'(x_k)$$

称之为插值型求导公式

误差公式：$R'(x_k)=f'(x_k)-L_n'(x_k)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k)$

常用的插值型求导公式

1. 两点公式

已知两点$\left(x_0, f(x_0)\right), \left(x_1, f(x_1)\right)$，记$x_1 = x_0 + h$，则

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

故$f'(x) = L'(x) = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}$，从而

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

误差：$|R'(x_k)| = |f'(x_k) - L_n'(x_k)| = \frac{|f^{(2)}(\xi_k)|}{2}h$

2. 三点公式

已知两点$(x_i, f(x_i))$，$x_i = x_0 + ih$，$i = 0, 1, 2$，则

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

由$f'(x_k) = L'(x_k)$，$f''(x_k) = L''(x_k), k = 0, 1, 2$，可得

$$f'(x_0) = \frac{-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)}{2h}, \qquad f'(x_1) = \frac{-f(x_0)+f(x_2)}{2h},$$

$$f'(x_2) = \frac{f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)}{2h}, \qquad f''(x_i) \equiv \frac{f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)}{h^2},$$

误差：$|R'(x_k)| = |f'(x_k) - L_n'(x_k)| = o(h^2)$

例2：设$f(x)=e^x$，取$h=0.01$，使用三点公式计算$f'(1.8)$ 的近似值。

解：由$f'(x_0)$)式，令$x_0=1.8, x_1=1.81, x_2=1.82$

$$f'(1.8)=\frac{1}{2h}[-3f(1.8)+4f(1.81)-f(1.82)]=6.0494$$

由$f'(x_1)$式，令$x_0=1.79, x_1=1.8, x_2=1.81$

$$f'(1.8)=\frac{1}{2h}[f(1.8)-f(1.79)]=6.0497$$

由$f'(x_2)$式，令$x_0=1.78, x_1=1.79, x_2=1.8$

$$f'(1.8)=\frac{1}{2h}[f(1.78)-4f(1.79)+3f(1.8)]=6.0494$$

3. 五点公式

已知两点$\left(x_i, f(x_i)\right)$，$x_i = x_0 + ih$，$i = 0, 1, \cdots, 4$，则

$$L(x) = \sum_{j=0}^{4}\left\{f\left(x_j\right) \cdot \prod_{i=0, i\neq j}^{4} \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)}\right\}$$

由$f'(x_k) = L'(x_k)$, $f''(x_k) = L''(x_k), k = 0, 1, 2,$

可得一阶、二阶求导公式，见教材