第六章　数值微分

- 导数近似值
- 数值差分公式

- 函数的导数

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

- 如何选择 $\boldsymbol{h}$?

- Ex1： $f(x)=e^x$,x=1;保留小数点后9位数字

h	$f(x+h)-f(x)$	$Dx=f(x+h)-f(x)/h$
0.100000000000000	0.285884195000000	2.858841950000000
0.010000000000000	0.027319187000000	2.731918700000000
0.001000000000000	0.002719641000000	2.719641000000000
0.000100000000000	0.000271842000000	2.718420000000000
0.000010000000000	0.000027183000000	2.718300000000000
0.000001000000000	0.000002718000000	2.718000000000000
0.000000100000000	0.000000272000000	2.720000000000000
0.000000010000000	0.000000027000000	2.700000000000000
0.000000001000000	0.000000003000000	3.000000000000000
0.000000000100000	0	0

由于舍入误差：h->0，f'(x)的误差增大

exm_6_1.m

- 中心差分公式
- 精度为 $O(h^2)$ 的中心差分公式：设 $f \in C^3[a,b]$ 且 $x-h, x, x+h \in [a,b]$，则

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

截断误差为

$$E_{trunc}(f,h) = -\frac{h^2 f^{(3)}(c)}{6} = O(h^2)$$

$c \in [a,b]$

- 由二阶泰勒展开可证！

- [使用极限的微分求解] $f'(x)$ 的近似值，生成序列：

$$f'(x) \approx D_k = \frac{f(x+10^{-k}h) - f(x-10^{-k}h)}{2(10^{-k}h)} \qquad k = 0, \cdots, n$$

停止条件：$|D_{n+1} - D_n| \geq |D_n - D_{n-1}|$或 $|D_n - D_{n-1}|$小于容差时（difflim.m程序采用相对误差）。

$$f'(x) \approx D_n$$

difflim_prog.m

精度为$O(h^4)$的中心差分公式：设 $f \in C^5[a,b]$ 且 $x-2h, x-h, x, x+h, x+2h \in [a,b]$则

$$f'(x) \approx \frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h}$$

截断误差为

$$E_{trunc}(f,h) = \frac{h^4 f^{(5)}(c)}{30} = O(h^4)$$

$c \in [a,b]$

由四阶泰勒展开可证！

- 误差分析：（舍入误差和截断误差）

令 $f(x_0-h)=y_{-1}+e_{-1}$， $f(x_0+h)=y_1+e_1$，其中 e_{-1}、e_1分别为舍入误差，用公式

$$f'(x_0)\approx\frac{y_1-y_{-1}}{2h}$$ 计算时

误差为

$$E(f,h)=E_{round}(f,h)+E_{trunc}(f,h)=\frac{e_1-e_{-1}}{2h}-\frac{h^2f^{(3)}(c)}{6}$$

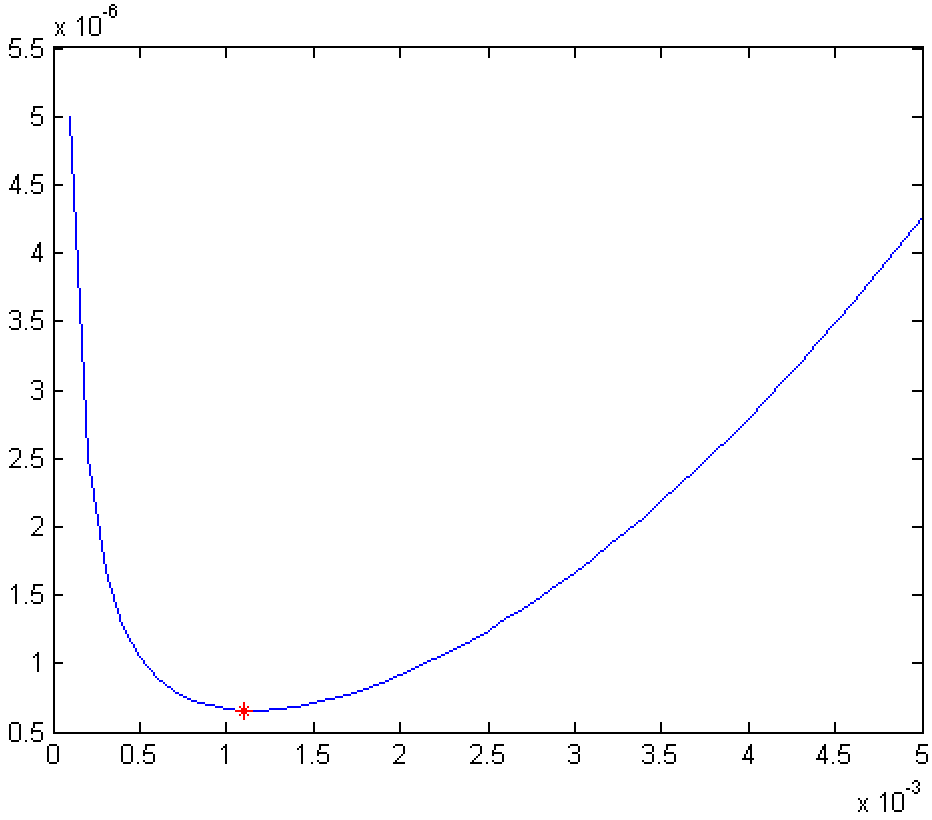
如果 $|e_{-1}|\le\varepsilon$、$|e_1|\le\varepsilon$，$M=\max\limits_{a\le x\le b}\left\{\left|f^{(3)}(x)\right|\right\}$，则

$$\left|E(f,h)\right|\le\frac{\varepsilon}{h}+\frac{h^2M}{6}$$

最小化时的 $h=\left(\frac{3\varepsilon}{M}\right)^{1/3}$

- $f(x)=\cos(x)$，$\left|f^{(3)}(x)\right| \le \left|\sin(x)\right| \le 1 = M$，$\varepsilon=0.5\times10^{-9}$， h的优化值为h=0.001144714;

$$h=\left(\frac{3\varepsilon}{M}\right)^{1/3}$$



exm_6_3.m

- 若取 $f'(x_0) \approx \dfrac{-y_2 + 8y_1 - 8y_{-1} + y_{-2}}{12h}$

- 则总误差为

$$E(f,h) = E_{round}(f,h) + E_{trunc}(f,h) = \frac{-e_2 + 8e_1 - 8e_{-1} + e_{-2}}{12h} + \frac{h^4 f^{(5)}(c)}{30}$$

- 如果 $|e_k| \le \varepsilon$ $M = \max\limits_{a \le x \le b}\left\{\left|f^{(5)}(x)\right|\right\}$
- 则

$$|E(f,h)| \le \frac{3\varepsilon}{2h} + \frac{h^4 M}{30}$$

- 误差最小化时 $h = \left(\dfrac{45\varepsilon}{4M}\right)^{1/5}$

- 理查森外推法
- 设 $f_k = f(x_k) = f(x_0 + kh)$， 记 $D_0(h) = \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$，
- $D_0(2h) = \dfrac{f(x+2h) - f(x-2h)}{4h}$， 则有

$$f'(x_0) \approx D_0(h) + Ch^2 \qquad f'(x_0) \approx D_0(2h) + 4Ch^2$$

- 消去C，可得到

$$3f'(x_0) \approx 4D_0(h) - D_0(2h)$$

- 从而有中心差分公式：

$$f'(x_0) \approx \frac{4D_0(h) - D_0(2h)}{3} = \frac{-f_2 + 8f_1 - 8f_{-1} + f_{-2}}{12h}$$

- 外推法：从低阶公式推导出求高级导数的方法。
- 类似的，用$D_1(h)$、$D_1(2h)$表示，则可记为

$$f'(x_0)=\frac{-f_2+8f_1-8f_{-1}+f_{-2}}{12h}+\frac{h^4f^{(5)}(c_1)}{30}\approx D_1(h)+Ch^4$$

$$f'(x_0)=\frac{-f_4+8f_2-8f_{-2}+f_{-4}}{24h}+\frac{16h^4f^{(5)}(c_2)}{30}\approx D_1(2h)+16Ch^4$$

- 消去 h^4 （设 $f^{(5)}(c_1)\approx f^{(5)}(c_2)$ ）
- 得

$$f'(x_0)\approx\frac{16D_1(h)-D_1(2h)}{15}$$

- 一般形式：
- [理查森外推]设$f'(x_0)$的两个精度为$O(h^{2k})$的近似值分别为$D_{k-1}(h)$ 、$D_{k-1}(2h)$， 且满足

$$f'(x_0) = D_{k-1}(h) + c_1 h^{2k} + c_2 h^{2k+2} + \cdots$$

$$f'(x_0) = D_{k-1}(2h) + 4^k c_1 h^{2k} + 4^{k+1} c_2 h^{2k+2} + \cdots$$

- 可得到改进的近似值表达式：

$$f'(x_0) = D_k(h) + O(h^{2k+2}) = \frac{4^k D_{k-1}(h) - D_{k-1}(2h)}{4^k - 1} + O(h^{2k+2})$$

- [利用外推法的微分求解] $f'(x)$ 的数值解，构造包含 $D(j,k), k \le j$的表，并以$f'(x) \approx D(n,n)$作为最终答案，递推关系：

$$D(j,0)=\frac{f(x+2^{-j}h)-f(x-2^{-j}h)}{2^{-j+1}h}$$

$$D(j,k)=D(j,k-1)+\frac{D(j,k-1)-D(j-1,k-1)}{4^k-1}$$

$$1 \le k \le j$$

ext_prog.m

- 数值差分公式
- 利用泰勒级数构造求高阶导数
- 记 $f_k = f(x_k) = f(x_0 + kh) \quad k = -3,-2,-1,0,1,2,3$
- 精度为$O(h^2)$的中心差分公式：

$$f'(x_0) \approx \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}$$

$$f''(x_0) \approx \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2}$$

$$f^{(3)}(x_0) \approx \frac{f_2 - 2f_1 + 2f_{-1} - f_{-2}}{2h^3}$$

$$f^{(4)}(x_0) \approx \frac{f_2 - 4f_1 + 6f_0 - 4f_{-1} + f_{-2}}{h^4}$$

- 精度为$O(h^4)$的中心差分公式：

$$f'(x_0) \approx \frac{-f_2 + 8f_1 - 8f_{-1} + f_{-2}}{12h}$$

$$f''(x_0) \approx \frac{-f_2 + 16f_1 - 30f_0 + 16f_{-1} - f_{-2}}{12h^2}$$

$$f^{(3)}(x_0) \approx \frac{-f_3 + 8f_2 - 13f_1 + 13f_{-1} - 8f_{-2} + f_{-3}}{8h^3}$$

$$f^{(4)}(x_0) \approx \frac{-f_3 + 12f_2 - 39f_1 + 56f_0 - 39f_{-1} + 12f_{-2} - f_{-3}}{6h^4}$$

证明：利用泰勒级数展开

$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+\frac{f''(x_0)}{2}h^2+\frac{f'''(x_0)}{6}h^3+\frac{f^{(4)}(x_0)}{24}h^4+\cdots$$

可得到

$$f(x_0+h)-f(x_0-h)=2f'(x_0)h+\frac{f'''(x_0)}{3}h^3+\frac{f^{(5)}(x_0)}{60}h^5+\cdots \qquad (1)$$

$$f(x_0+h)+f(x_0-h)=2f(x_0)+f''(x_0)h^2+\frac{1}{12}f^{(4)}(x_0)h^4+\cdots \qquad (2)$$

$$f(x_0+2h)-f(x_0-2h)=2f'(x_0)2h+\frac{f'''(x_0)}{3}(2h)^3+\frac{f^{(5)}(x_0)}{60}(2h)^5+\cdots \qquad (3)$$

$$f(x_0+2h)+f(x_0-2h)=2f(x_0)+f''(x_0)(2h)^2+\frac{1}{12}f^{(4)}(x_0)(2h)^4+\cdots \qquad (4)$$

$$f(x_0+3h)-f(x_0-3h)=2f'(x_0)3h+\frac{f'''(x_0)}{3}(3h)^3+\frac{f^{(5)}(x_0)}{60}(3h)^5\cdots \qquad (5)$$

$$f(x_0+3h)+f(x_0-3h)=2f(x_0)+f''(x_0)(3h)^2+\frac{1}{12}f^{(4)}(x_0)(3h)^4+\cdots \qquad (6)$$

- 为证明精度为$O(h^4)$的中心差分公式

$$f^{(3)}(x_0) \approx \frac{-f_3+8f_2-13f_1+13f_{-1}-8f_{-2}+f_{-3}}{8h^3}$$

- 由（1）、（3）消去h^5项

$$32f_1-32f_{-1}-f_2+f_{-2}=60f'h+8f'''h^3$$

- 由（1）、（5）消去h^5项

$$243f_1-243f_{-1}-f_3+f_{-3}=480f'h+72f'''h^3$$

- 消去f'项，可得结果。

- 误差分析
- 精度为 $O(h^2)$ 的二阶导数计算式，可写为

$$f''(x_0) \approx \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} - \frac{h^2 f^{(4)}(c)}{12}$$

设 $f_k = y_k + e_k$ ，其中 e_k 为测量及舍入误差，则误差项为 $E(f,h) = \frac{e_1 - 2e_0 + e_{-1}}{h^2} - \frac{h^2 f^{(4)}(c)}{12}$

设误差数量级为 ε ，并设 $\left|f^{(4)}(x)\right| \le M$

则得到误差界为 $\left|E(f,h)\right| \le \frac{4\varepsilon}{h^2} + \frac{h^2 M}{12}$

最优步长值为 $h = \left(\frac{48\varepsilon}{M}\right)^{1/4}$

- 可取高阶形式处理步长的两难问题

- 拉格朗日多项式微分
- 如果函数只在一边可计算，则不能用中心差分公式，位于 x_0 右（左）边的等距横坐标的公式称为前（后）向差分公式。
- $N+1$ 个点组成 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \cdots$

$$P_N(x) = \sum_{k=0}^{N} y_k L_{N,k}(x)$$

$$L_{N,k}(x) = \frac{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{N} (x - x_j)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{N} (x_k - x_j)}$$

$$f'(x_0) \approx \frac{-3f_0 + 4f_1 - f_2}{2h}$$ （前向微分）

$$f'(x_0) \approx \frac{3f_0 - 4f_{-1} + f_{-2}}{2h}$$ （后向微分）

$$f''(x_0) \approx \frac{2f_0 - 5f_1 + 4f_2 - f_3}{h^2}$$ （前向微分）

$$f''(x_0) \approx \frac{2f_0 - 5f_{-1} + 4f_{-2} - f_{-3}}{h^2}$$ （后向微分）

$$f'''(x_0) \approx \frac{-5f_0 + 18f_1 - 24f_2 + 14f_3 - 3f_4}{2h^3}$$

$$f'''(x_0) \approx \frac{5f_0 - 18f_{-1} + 24f_{-2} - 14f_{-3} + 3f_{-4}}{2h^3}$$

$$\vdots$$

- 牛顿多项式微分
- 讨论一阶导数的3个差分公式的关系
- 由点 t_0, t_1, t_2， 构造二次牛顿多项式

$$P(t) = a_0 + a_1(t - t_0) + a_2(t - t_0)(t - t_1)$$

$$a_0 = f(t_0) \quad a_1 = (f(t_1) - f(t_0))/(t_1 - t_0)$$

$$a_2 = \frac{\dfrac{f(t_2) - f(t_1)}{t_2 - t_1} - \dfrac{f(t_1) - f(t_0)}{t_1 - t_0}}{t_2 - t_0}$$

- 一阶导数为

$$P'(t) = a_1 + a_2((t - t_0) + (t - t_1))$$

$$P'(t_0) = a_1 + a_2(t_0 - t_1) \approx f'(t_0)$$

- 情况1：$t_0 = x, t_1 = x + h, t_2 = x + 2h$，代入前面的 a_0, a_1, a_2，可得到二阶前向差分公式

$$P'(x) = \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h} \approx f'(x)$$

- 情况2：$t_0 = x, t_1 = x+h, t_2 = x-h$
- 可得到二阶中心差分公式

$$P'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \approx f'(x)$$

- 情况3：$t_0 = x, t_1 = x-h, t_2 = x-2h$
- 可得到二阶后向差分公式

$$P'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h} \approx f'(x)$$

讨论：

如果已知的数据点步长不均匀，如何处理微分问题。

二阶导数的差分公式如何做理查森外推。

利用Taylor级数展开：

$$f(x_{i\pm1}) = f(x_i) + (x_{i\pm1} - x_i) f'(x_i) + \frac{1}{2!}(x_{i\pm1} - x_i)^2 f''(x_i) + O(h^3)$$

以及 f_i, f_{i-1}, f_{i+1} 的组合消去二阶导数项，

可得：

$$f_i' = \frac{h_{i-1}^2 f_{i+1} + \left(h_i^2 - h_{i-1}^2\right) f_i - h_i^2 f_{i-1}}{h_i h_{i-1}(h_i + h_{i-1})} + O(h^2)$$

其中 $h_i = x_{i+1} - x_i$

同理，二阶导数可以表示为，

$$f_i'' = \frac{2[h_{i-1} f_{i+1} - (h_i + h_{i-1}) f_i + h_i f_{i-1}]}{h_i h_{i+1}(h_i + h_{i-1})} + O(h).$$

（精度降低）

习题

试导出以下数值微分公式,并估计截断误差.

(1) $f_i' \approx \dfrac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}$

(2) $f_i'' \approx \dfrac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$

习题

P233#5 6.1.5

P243 #1   6.2.5

- 讨论：利用牛顿迭代法和三点公式求解方程组的零根。

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0},$$

其中 $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \ldots, f_n)$, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$.

例子：

$$f_1(x, y) = e^{x^2} \ln y - x^2 = 0$$

$$f_2(x, y) = e^{y} \ln x - y^2 = 0$$

泰勒级数展开：

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_r) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \Delta\mathbf{x} \cdot \nabla\mathbf{f}(\mathbf{x}) + O(\Delta\mathbf{x}^2) \simeq \mathbf{0},$$

其中，$\Delta\mathbf{x} = \mathbf{x}_r - \mathbf{x}.$

构造线性方程组： $\mathbf{A}\Delta\mathbf{x} = \mathbf{b},$ （1）

矩阵元 $A_{ij} = \frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial x_j}$ ， $b_i = -f_i.$

构造迭代过程，$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \Delta\mathbf{x}_k$ ，$\Delta\mathbf{x}_k$是（1）式的解。

如何利用三点公式计算偏导： $A_{ij} = \frac{f_i(\mathbf{x} + h_j \hat{\mathbf{x}}_j) - f_i(\mathbf{x})}{h_j}$