第六节 数值微分

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。常用的数值微分方法有:

一. 运用差商求数值微分

二. 运用插值函数求数值微分

三. 运用数值积分求数值微分

四. 运用样条插值函数求数值微分

一. 运用差商求数值微分

最简单直接的数值微分方法就是用差商代替微商.

根据导数定义,在点x_i处

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

$$=\lim_{h\to 0}\frac{f(x_i)-f(x_i-h)}{h}$$

$$=\lim_{h\to 0}\frac{f(x_i+\frac{h}{2})-f(x_i-\frac{h}{2})}{h}$$

当h充分小时,可用差商来逼近导数

一阶向前差商公式：

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i+h)-f(x_i)}{h} \overset{\nabla}{=} \frac{\Delta f_i}{h}$$

$\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$称为$f$在$x_i$点的一阶向前差分.

一阶向后差商公式：

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i)-f(x_i-h)}{h} \overset{\nabla}{=} \frac{\nabla f_i}{h}$$

$\nabla f_i = f_i - f_{i-1}$称为$f$在$x_i$点的一阶向后差分.

一阶中心差商公式：

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i+\frac{h}{2})-f(x_i-\frac{h}{2})}{h} \overset{\nabla}{=} \frac{\delta f_i}{h}$$

$\delta f_i = f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}$称为$f$在$x_i$的一阶中心差分.

利用Taylor展开可导出数值微分公式并估计误差.

一阶向前差商公式 $f'(x_i)=\dfrac{\Delta f_i}{h}+O(h)=\dfrac{f_{i+1}-f_i}{h}+O(h)$

一阶向后差商公式 $f'(x_i)=\dfrac{\nabla f_i}{h}+O(h)=\dfrac{f_i-f_{i-1}}{h}+O(h)$

一阶中心差商公式 $f'(x_i)=\dfrac{\delta f_i}{h}+O(h^2)=\dfrac{f_{i+\frac{1}{2}}-f_{i-\frac{1}{2}}}{h}+O(h^2)$

证明: 对$f(x)$在点x_i以h为增量作$Taylor$展开有

$$f(x_i+h)=f(x_i)+f'(x_i)h+\frac{h^2}{2}f''(\xi)$$

得一阶向前差商公式

$$f'(x_i)=\frac{f(x_i+h)-f(x_i)}{h}-\frac{h}{2}f''(\xi)$$

一阶导数的三点公式:

$$f_i' = \frac{1}{2h}(-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}) + O(h^2)$$

证明:将$f(x)$在点x_i处分别以增量h和$2h$作$Taylor$展开，有

$$f_{i+1} = f_i + hf_i' + \frac{h^2}{2} f_i'' + O(h^3) \qquad (1)$$

$$f_{i+2} = f_i + 2hf_i' + \frac{4h^2}{2} f_i'' + O(h^3) \qquad (2)$$

由$4\times$(1)$-$(2）可消去f_i''可得到三点公式，证毕。

同样的方法可以得到其它的三点公式是:

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

$$f_{i+2}' = \frac{1}{2h}(f_i - 4f_{i+1} + 3f_{i+2}) + O(h^2)$$

二阶中心差商公式

$$f''(x_i)=\frac{\delta^2 f_i}{h^2}+O(h^2)=\frac{f_{i+1}-2f_i+f_{i-1}}{h^2}+O(h^2)$$

证明：(1)验证：

$$\delta^2 f_i=\delta\ (\delta f_i)=\delta(f_{i+\frac{1}{2}}-f_{i-\frac{1}{2}})$$

$$=(f_{i+1}-f_i)-(f_i-f_{i-1})=f_{i+1}-2f_i+f_{i-1}$$

(2)对$f(x)$在点x_i以h为增量作$Taylor$展开有

$$f(x_i+h)=f(x_i)+f'(x_i)h+\frac{1}{2}f''(x_i)h^2+\frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)h^3+O(h^4)$$

$$f(x_i-h)=f(x_i)-f'(x_i)h+\frac{1}{2}f''(x_i)h^2-\frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)h^3+O(h^4)$$

两式相加除以h^2得：$f''(x_i)=\dfrac{f_{i+1}-2f_i+f_{i-1}}{h^2}+O(h^2)$

二、运用插值函数求数值微分

设$L_n(x)$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Lagrange插值余项,有对任意给定的$x \in [a, b]$，总存在如下关系式:

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

若取数值微分公式 $f'(x) \approx L_n'(x)$

误差为:

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

$\because \quad \omega_{n+1}(x)\dfrac{d}{dx}\dfrac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}$ 中ξ_x是未知的,其误差不能估计,

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

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

因此插值型求导公式常用于求节点处的导数值

$$f'(x_i)\approx L_n'(x_i)=\sum_{k=0}^{n}f(x_k)l'_k(x_i) \quad i=0,1,\dots,n$$

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

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

$$R_1'(x_i)=f'(x_i)-L_1'(x_i)=\frac{f^{(2)}(\xi_i)}{2!}\omega_2'(x_i)\quad i=0,1$$

$$f'(x_i)\approx L_1'(x_i)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}\qquad i=0,1$$

令$h=x_1-x_0>0$

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

$$f'(x_1)=\frac{f(x_1)-f(x_1-h)}{h}+\frac{h}{2}f''(\xi_2)\qquad(2)$$

(1) 称为x_0点的向前差商公式,

(2) 称为x_1点的向后差商公式。

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 $$\frac{|hf''(\xi)|}{2}=\frac{h}{2\xi^2},$$

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

$$f'(1.8)\doteq 0.5555556$$

当n=2时,有

$$f'(x_i)=\sum_{k=0}^{2}f(x_k)l'_k(x_i)+\frac{1}{6}f^{(3)}(\xi_i)\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{2}(x_i-x_k)$$

$$=f(x_0)\frac{2x_i-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+f(x_1)\frac{2x_i-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

$$+f(x_2)\frac{2x_i-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}+\frac{1}{6}f^{(3)}(\xi_i)\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{2}(x_i-x_k)\quad i=0,1,2$$

当节点等距时，即有 $x_1=x_0+h$, $x_2= x_0+2h$, $h>0$,
上述公式可简化为

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

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

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

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

$$f'(x_0)=\frac{-3f(x_0)+4f(x_0+h)-f(x_0+2h)}{2h}+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)\qquad(3)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

较精确

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

h	公式（3）	公式（4）	公式（5）
0.1	22.032310	22.228790	22.054525
0.2		22.414163	
误差	1.35×10^{-1}	$\begin{cases}-6.16\times10^{-2}\\-2.47\times10^{-1}\end{cases}$	1.13×10^{-1}

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

用5点公式计算$f'(2)$：

当n=4时,可得到5点公式:

中点求导公式:

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

$$+\frac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi)\quad (6),\quad x_0-2h<\xi<x_0+2h,\quad h>0$$

由上式，$f'(2)\approx 22.166996$，误差为：1.69×10^{-4}

端点求导公式：

$$f'(x_0)=\frac{1}{12h}[-25f(x_0)+48f(x_0+h)-36f(x_0+2h)$$

$$+16f(x_0+3h)-3f(x_0+4h)+\frac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi_2)\quad(7)$$

计算左端点：$x_0<\xi<x_0+4h,\quad h>0,$

计算右端点：$x_0+4h<\xi<x_0,\quad h<0$

5点公式计算$f(x_0)$的误差是$O(h^4)$,且中点公式（6）的误差小于端点公式（7）。

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：

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

设

$$f(x_0+h)=\tilde{f}(x_0+h)+e(x_0+h)$$

$$f(x_0-h)=\tilde{f}(x_0-h)+e(x_0-h)$$

则(4)式为

$$f'(x_0)=\frac{\tilde{f}(x_0+h)-\tilde{f}(x_0-h)}{2h}+\frac{e(x_0+h)-e(x_0-h)}{2h}$$

$$-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)$$

计算$f'(x_0)$的总误差是：

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

误差界为：$e(h)=e/h+(h^2/6)M$, 这里 $e=\max|e(x_0\pm h)|$,
$M=\max|f^{(3)}(x)|$

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

三. 运用数值积分求数值微分

设函数$y = f(x)$的导函数是$F(x)$，即$F(x) = f'(x)$，则可将函数$f(x)$用定积分的形式表示出来，对$\forall \bar{x} \in R$

$$f(x) = f(\bar{x}) + \int_{\bar{x}}^{x} F(t)dt$$

取 $\bar{x} = x_{k-1}, x = x_{k+1}$，得到

$$f(x_{k+1}) - f(x_{k-1}) = \int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} F(t)dt \qquad (k = 1, 2, \cdots, n-1)$$

取 $\bar{x}=x_{k-1}, x=x_{k+1}$，得到

$$f(x_{k+1})-f(x_{k-1})=\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} F(t)dt \qquad (k=1,2,\cdots,n-1)$$

若对积分 $\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} F(t)dt$ 用中矩形公式计算，即

$$\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} F(t)dt = 2hF(x_k)+O(h^3)$$

得到

$$f(x_{k+1})-f(x_{k-1})=2hF(x_k)+O(h^3)$$

$$F(x_k)=f'(x_k)=\frac{f(x_{k+1})-f(x_{k-1})}{2h}+O(h^2)$$

这就是在 $[x_{k-1}, x_{k+1}]$ 上用中心差商构造的数值微分公式。

例 设已知等距节点$x_k = x_0 + kh(k = 0,1,\cdots,n)$上的数值积分公式为

$$\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} F(t)dt \approx \frac{h}{3}(F_{k-1} + 4F_k + F_{k+1}) \quad (k = 1,2,\cdots n-1)$$

试用$f(x) = f(\bar{x}) + \int_{\bar{x}}^{x} F(t)dt$构造在节点$x_k(k = 0,1,\cdots,n)$上,求函数$y = f(x)$的导数$f'(x_k)(k = 0,1,\cdots,n)$的数值微分公式$(F(x) = f'(x))$

$$\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} F(t)dt \approx \frac{h}{3}(F_{k-1}+4F_k+F_{k+1})$$

解： 将数值积分公式代入

$$f(x)=f(\bar{x})+\int_{\bar{x}}^{x} F(t)dt$$

$$f_{k+1}-f_{k-1}=\frac{h}{3}(f'_{k-1}+4f'_k+f'_{k+1}) \quad (k=1,2,\cdots,n-1)$$

这是一个关于$f'_0, f'_1 \cdots f'_n$的线性代数方程组

$$f'_{k-1}+4f'_k+f'_{k+1}=\frac{3}{h}(f_{k+1}-f_{k-1}) \quad (k=1,2,\cdots,n-1)$$

再补充两端一阶导数值f_0'和f_n'，则上式就是一个封闭的线形方程组，其系数矩阵是

$$A=\begin{bmatrix} 4 & 1 & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 4 & 1 \\ & & & 1 & 4 \end{bmatrix}$$

由于系数矩阵是严格对角占优矩阵。于是方程组存在**唯一解**，可解出$f_0', f_1', f_2', \cdots, f_{n-1}', f_n'$。

四. 运用样条插值函数求数值微分

用三转角方程和三弯矩方程可以分别求出在节点处函数*f*(*x*)的一阶导数和二阶导数的近似值。

$$f_i' \approx m_i \qquad (i=0,1,\cdots,n)$$

$$f_i'' \approx M_i \qquad (i=0,1,\cdots,n)$$