第七章 数值积分与数值微分

数值微分

***Def*：** 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。

一　Taylor展开法

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

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

(1)式整理得：

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

(2)式整理得：

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

(1)式-(2)式、(1)式+(2)式，整理得：

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

$$f''(x_0)=\frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(x_0)+O(h^5) \qquad (4)$$

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：

$$f'(x_0)\approx\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

$$f'(x_0)\approx\frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}$$

$$f'(x_0)\approx\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$$

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

它们分别称为$f(x)$的一阶导数的向前插商公式、向后插商公式、中心插商公式和二阶导数的中心插商公式。前两个精度为$O(h)$，后两个精度为$O(h^2)$.

注：从截断误差来看，步长h越小，计算精度越高；从数值计算的稳定性角度来看，h 越小，$f(x_0+h)$与 $f(x_0-h)$的值越接近，两近似数相减有效数字损失严重。另一方面，数值微分恰恰对舍入误差比较敏感。

如一阶导数的中心插商公式：设 $f(x_0+h)$与$f(x_0-h)$ 分别有舍入误差 ε_1和ε_2 ，并令 $\varepsilon=\max\{|\varepsilon_1|,|\varepsilon_2|\}$ ，则计算 $f'(x_0)$ 产生的误差为：

$$\delta(f'(x_0))=|f'(x_0)-\tilde{f}'(x_0)|\le\frac{|\varepsilon_1|+|\varepsilon_2|}{2h}\le\frac{\varepsilon}{h}$$

明显地，误差随h趋于零而变得越来越大。故在实际计算时，步长h 不宜取得太小，也不宜取得太大，应综合考虑截断误差和数值稳定性两个方面。

一阶导数的中心插商公式的舍入误差和截断误差之和的上界为：

$$E(h)=\frac{\varepsilon}{h}+\frac{h^2}{6}M$$

其中：$M=\max_x |f'''(x)|$ ，选择使$E(h)$达到最小的最优步长：

$$h_{\text{opt}}=\sqrt[3]{3\varepsilon/M}$$

例1：设 f_i 给出4 位小数，即 $\varepsilon=0.5\times10^{-4}$ ，在区间[1 , 2]上，用中心插分公式计算 $f(x)=e^x$ 的一阶导数时，求 h_{opt}

解： $M=e^2$ ， $h_{\text{opt}}=\sqrt[3]{3\varepsilon/M}=0.0273$

二　插值型求导公式

给定插值数据： $x_0\,,\quad x_1\,,\cdots,\quad x_n$

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

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： $f'(x) \approx L_n'(x)\,,\quad f''(x) \approx L_n''(x)$

注：当$L_n(x)$ 收敛于 $f(x)$时，$L_n'(x)$ 不一定收敛于 $f'(x)$。当h减小时其截断误差减小，但舍入误差却会增加，并且数值微分对舍入误差非常敏感。所以步长 h 应取适当值，不宜太小，同时要注意误差分析。

$$f'(x)=L_n'(x)+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x)+\frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\cdot\frac{d}{dx}(f^{(n+1)}(\xi))$$

在此公式中，右端第二项很难估计。但由于在各个节点上有 $\omega_{n+1}(x_k)=0$ ，故仅讨论节点 x_k 上的导数值：

$$f'(x_k)=L_n'(x_k)+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k)$$

称 $f'(x)\approx L_n'(x)$ 和 $f^{(m)}(x)\approx L_n^{(m)}(x)\ (m=2,3,\cdots)$

导公式。求导公式在节点 x_k 处的余项为：

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

1 两点公式

当 $n=1$ 时，即取两个插值节点，此时可得：

$$f'(x_0)=f'(x_1)\approx L_1'(x_0)=L_1'(x_1)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}$$

2 三点公式

当n =2时，即取三个插值节点，此时：

$$L_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

两端关于 x 求导，得三点公式：

$$L_2'(x)=\frac{2x-x_1-x_2}{2h^2}f(x_0)-\frac{2x-x_0-x_2}{h^2}f(x_1)+\frac{2x-x_0-x_1}{2h^2}f(x_2)$$

从而可得节点上的三点公式：

$$f'(x_0)\approx L_2'(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)] \qquad (5)$$

$$f'(x_1)\approx L_2'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)] \qquad (6)$$

$$f'(x_2)\approx L_2'(x_2)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)] \qquad (7)$$

三点公式的余项为：

$$f'(x_0)-L_2'(x_0)=\frac{h^2}{3}f'''(\xi_0)$$

$$f'(x_1)-L_2'(x_1)=-\frac{h^2}{6}f'''(\xi_1)$$

$$f'(x_2)-L_2'(x_2)=\frac{h^2}{3}f'''(\xi_2)$$

三点公式的截断误差均为：$O(h^2)$

又： $$L_2''(x)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]$$

于是得到二阶导数的中心差分公式：

$$f''(x_1)\approx L_2''(x_1)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]$$

其余项为：

$$f''(x_1)-L_2''(x_1)=-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)$$

同理，当$n = 4$时，即取5个插值节点：

$$x_{-2}\,,\quad x_{-1}\,,\quad x_0\,,\quad x_1\,,\quad x_2$$
$$f(x_{-2}),\, f(x_{-1}),\, f(x_0),\, f(x_1),\, f(x_2)$$

可导出常用的五点公式：

$$f'(x_0) \approx L_4'(x_0) = \frac{1}{12h}[f(x_{-2}) - 8f(x_{-1}) + 8f(x_1) - f(x_2)] \qquad (8)$$

其余项为：
$$f'(x_0) - L_4'(x_0) = \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi)$$

注：用插值法建立的数值求导公式，通常导数值的精确度比用插值公式求得的函数值的精确度要差，高阶导数值的精确度比低阶导数值差，所以，不宜用这种方法建立高阶数值求导公式。

例2：设 $f(x)=e^x$，对$h=0.01$，使用公式(5)~(8)，计算 $f'(1.8)$ 的近似值。

解：由(5)式 $f'(1.8)\approx\frac{1}{2h}[-3f(1.8)+4f(1.81)-f(1.82)]=6.0494$

由(6)式 $f'(1.8)\approx\frac{1}{2h}[f(1.81)-f(1.79)]=6.0497$

由(7)式 $f'(1.8)\approx\frac{1}{2h}[f(1.78)-4f(1.79)+3f(1.8)]=6.0494$

由(8)式

$$f'(1.8)\approx\frac{1}{12h}[f(1.78)-8f(1.79)+8f(1.81)-f(1.82)]=6.0496$$