回顾

第五章 曲线拟合

5.1 引言

5.2 最小二乘拟合曲线

5.3 其他曲线拟合方法

该表格非常重要，请大家默写填一下

回顾

曲线拟合方程	变换关系	变换后的线性拟合方程
$y = ax^b$		
$y = ax^\mu + c$		
$y = \dfrac{x}{ax+b}$		
$y = \dfrac{1}{ax+b}$		
$y = \dfrac{1}{ax^2+bx+c}$		
$y = \dfrac{x}{ax^2+bx+c}$		

第六章 数值微分

6.1 引言

6.2 导数的近似值

6.3 插值型求导公式

6.4 数值差分公式

6.1 引言

重要!

数值微分是用离散方法近似地计算函数在某点的导数值。

在微分学中，求函数f(x)的导数$f'(x)$通常比f(x)复杂的多。另外，求数值导数也是实际问题经常遇到的，特别当该函数本身未知，但又需要对其求导数时，数值微分方法显得更为重要。

此外，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。

求解数值导数的公式对开发求解常微分方程和偏微分方程边值问题的算法非常重要。

6.2 导数的近似值

6.2.1 差商的极限

$$f'(x_1)=\lim_{h\to 0}\frac{f(x_1+h)-f(x_1)}{h}$$
$$=\lim_{h\to 0}\frac{f(x_1)-f(x_1-h)}{h} \qquad (1)$$
$$=\lim_{h\to 0}\frac{f(x_1+h)-f(x_1-h)}{2h}$$

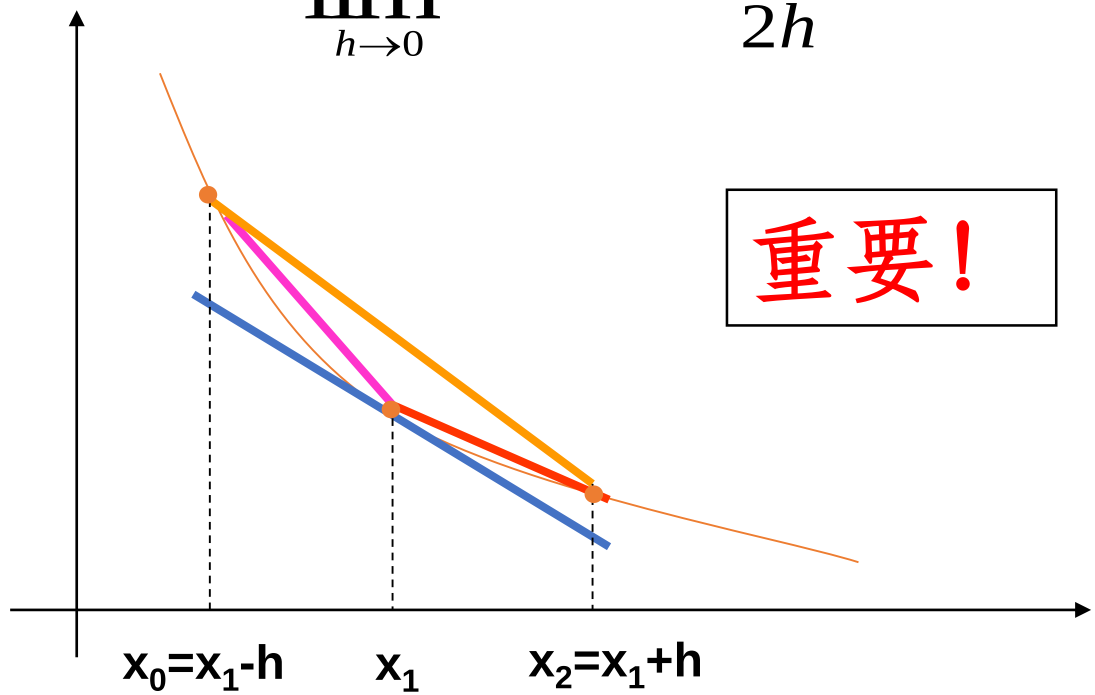
 # 微分的定义：

求 x_1 处的一阶导数。

 # 几何意义

$h = x_1-x_0= x_2-x_1$

称为步长。



重要！

图 6.1

6.2 导数的近似值

6.2.1 差商的极限

例如，设有函数 $f(x)=e^x$，并使用步长 $h=1,1/2$ 和 $1/4$ 分别构造位于 $(0,1)$ 和 $(h,f(h))$ 之间点的割线。当 h 足够小，割线接近于对应的切线，如图 6.2 所示。尽管图 6.2 显示了式(1)中的处理过程，但要用 $h=0.00001$ 才能得到可接受的答案，采用这个 h 值，图中的切线和割线将无法区分。

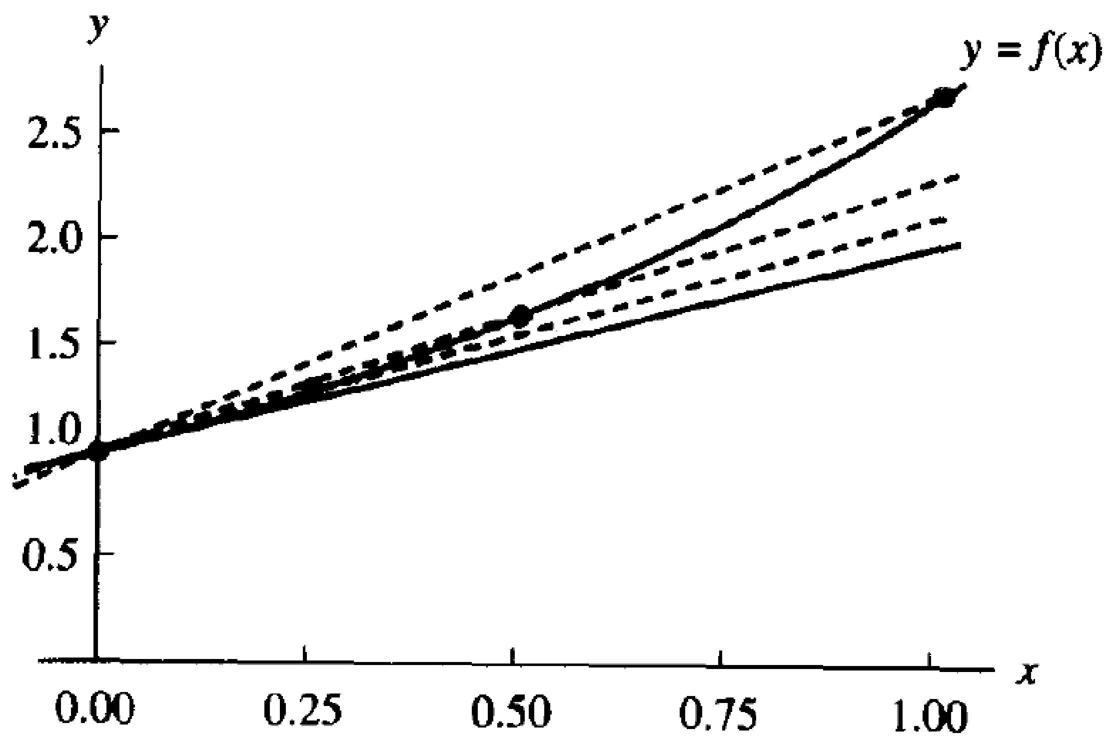


图 6.2　$y=e^x$ 的多个割线

6.3 数值差分公式

非常非常重要

最简单的数值微分是用向前差分近似代替导数（如果f(x)在点x的右边的值可计算），即

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

同样，也可用向后差分近似代替导数（如果f(x)在点x的左边的值可计算），即

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

或中心差分的方法（如果f(x)在点x的左右两边的值都可计算），即

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

可以看出中心差分是向前差分和向后差分的算术平均值。上述三种方法的截断误差分别为O(h)、O(h)和O(h^2)。

证明中心差分的截断误差为$O(h^2)$。

证明：设关于 x 的二阶泰勒展开表达式为$f(x)=P_2(x)+E_2(x)$，则 $f(x+h)$和 $f(x-h)$的泰勒展开式为

$$f(x+h)=f(x)+f'(x)h+\frac{f^{(2)}(x)h^2}{2!}+\frac{f^{(3)}(c_1)h^3}{3!} \tag{5}$$

和

$$f(x-h)=f(x)-f'(x)h+\frac{f^{(2)}(x)h^2}{2!}-\frac{f^{(3)}(c_2)h^3}{3!} \tag{6}$$

式(5)减去式(6)，可得

$$f(x+h)-f(x-h)=2f'(x)h+\frac{((f^{(3)}(c_1)+f^{(3)}(c_2))h^3}{3!} \tag{7}$$

由于 $f^{(3)}(x)$是连续的，所以根据中值定理可找到一个值 c，满足

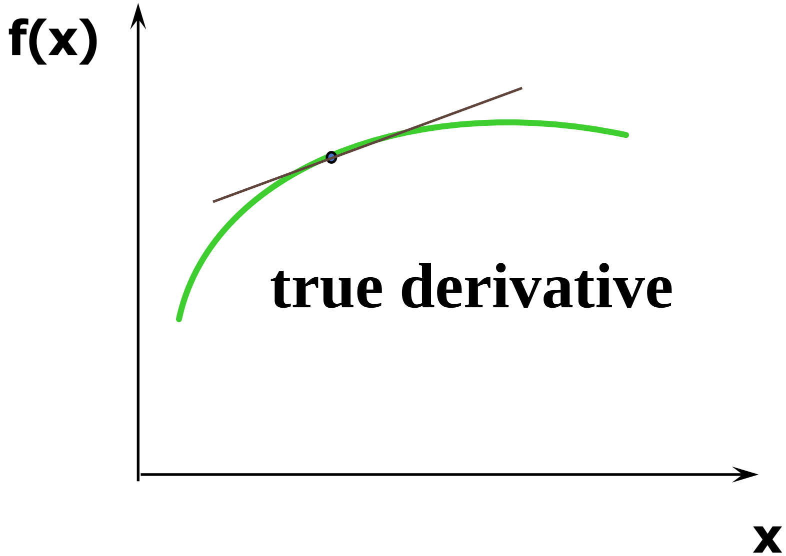
$$\frac{f^{(3)}(c_1)+f^{(3)}(c_2)}{2}=f^{(3)}(c) \tag{8}$$

将它代入式(7)并重新调整项，可得

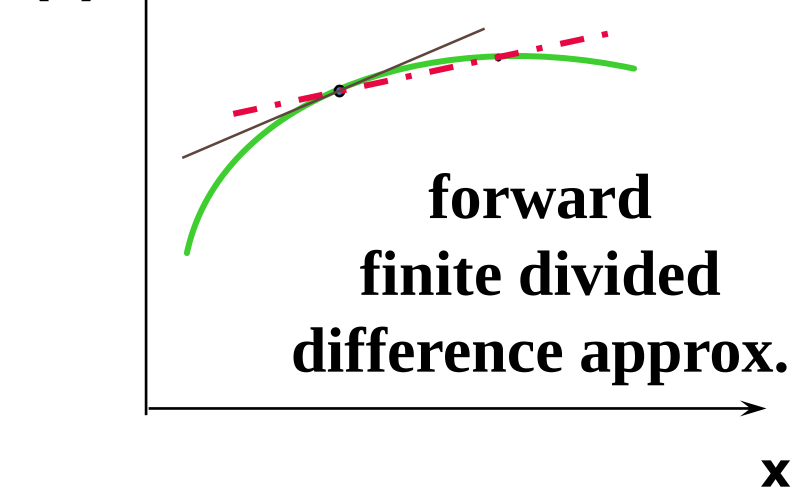
$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}-\frac{f^{(3)}(c)h^2}{3!} \tag{9}$$

式(9)中右边第一项是中心差分公式(3)，第二项是截断误差。定理得证。 ●

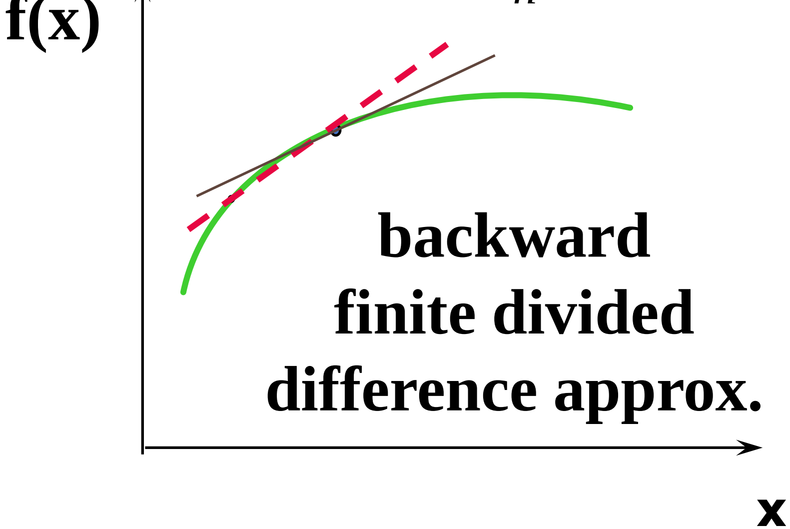
非常重要



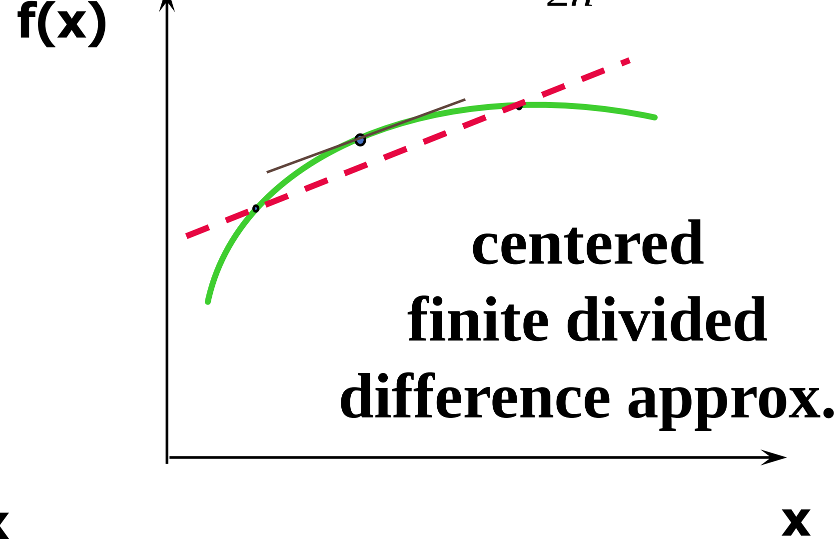
$$f\left(x_i\right)=\frac{f\left(x_{i+1}\right)-f\left(x_i\right)}{h}$$



$$f\left(x_i\right)=\frac{f\left(x_i\right)-f\left(x_{i-1}\right)}{h}$$



$$f\left(x_i\right)=\frac{f\left(x_{i+1}\right)-f\left(x_{i-1}\right)}{2h}$$



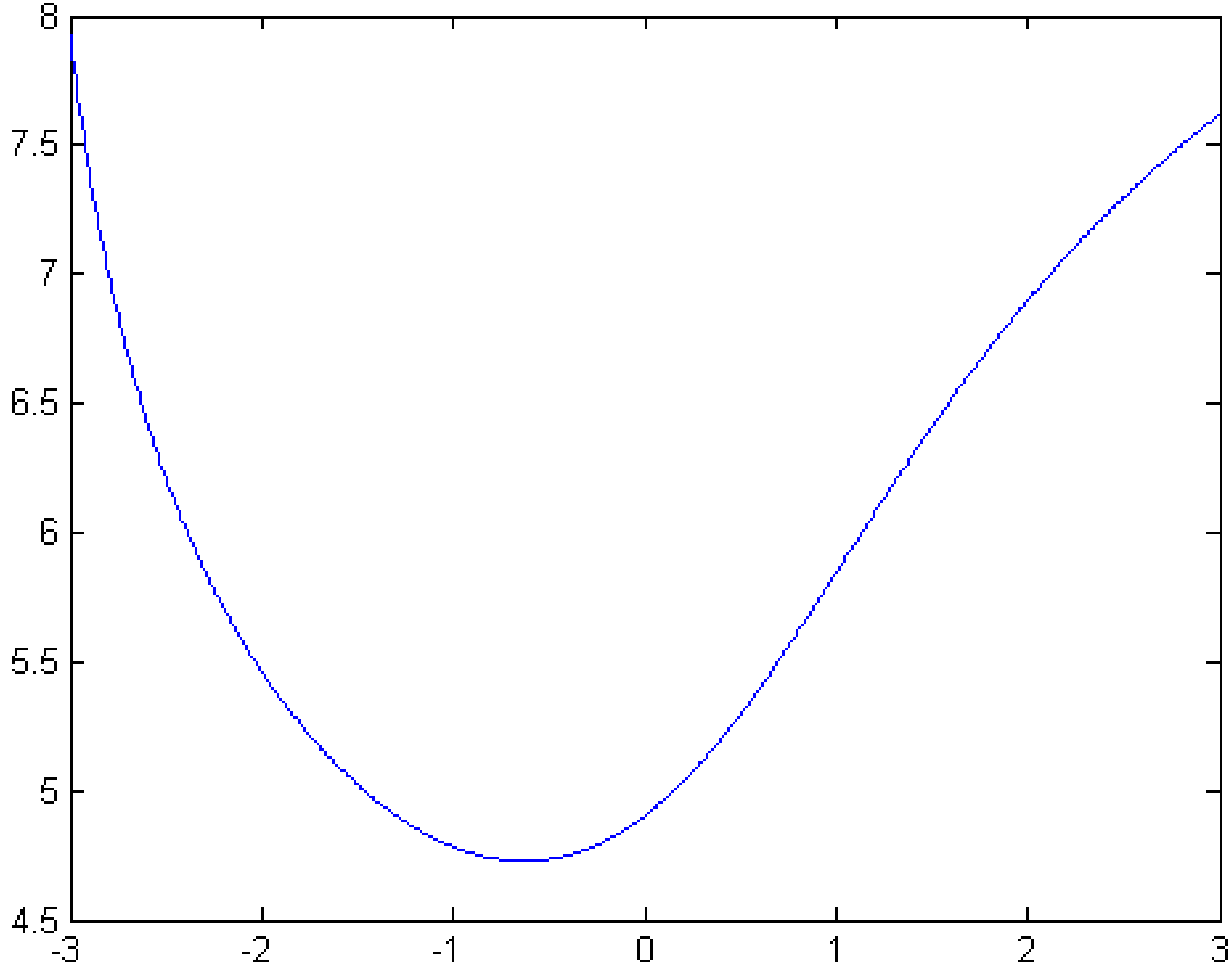
数值微分的MATLAB命令

非常重要

diff(x)　　向量x的向前差分；　% diff(x)/h 即为计 算数值导数
diff(x, n)　向量x的n阶向前差分；

例6.1：$f(x)=\sqrt{x^3+2x^2-x+12}+\sqrt[6]{x+5}+5x+2$，**求函数的数值导数，并画出** $f'(x)$ **的图像。**

解：
```
f=inline('sqrt(x.^3+2*x.^2-x+12)+(x+5).^(1/6)+5*x+2');
x=-3:0.01:3;
df=diff(f([x,3.01]))/0.01;
plot(x,df)
```


8
7.5
7
6.5
6
5.5
5
4.5
-3
-2
-1
0
1
2
3

6.3 插值型求导公式

函数f(x)的定积分可以用插值多项式P(x)的定积分来近似计算，同样，函数f(x)的导数也可以用插值多项式P(x)的导数来近似代替，即

$$f'(x) \approx P'(x) \tag{11}$$

这样建立的数值微分公式，统称为插值型求导公式。

应当指出的是即使P(x)与f(x)处处相差不多，但P'(x)与f'(x)在某些点仍然可能出入很大，因而在使用插值求导公式时，要注意误差的分析。

6.3 插值型求导公式

设$L_n(x)$是$f(x)$的过点$\{x_0, x_1, x_2, \cdots x_n\}\subset[a, b]$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

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

$\boxed{\text{因此插值型求导公式常用于求节点处的导数值}}$

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

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

称为n+1点求导公式。

6.3 插值型求导公式

由插值余项公式

$$R(x)=f(x)-P(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)$$

得求导公式(11)的余项为

$$f'(x)-P'(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'(x)+\frac{\omega(x)}{(n+1)!}\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi)$$

其中 $\omega(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)$

在这一余项公式中，由于ξ和x是未知函数，因此无法对它的第二项作出估计，但在插值节点x_k处，由于上式右端的第二项因式$\omega(x_k)$等于零，因而在插值节点处的导数余项为

$$f'(x)-P'(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'(x)$$

6.3 插值型求导公式

非常重要

下面给出实用的两点公式和三点公式。

(1) 两点公式

设已给出两个节点上x_0,x_1上的函数值$f(x_0)$,$f(x_1)$，作线性插值

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

对上式两端求导，记$h=x_1-x_0$，则有

$$P'(x)=\frac{1}{h}\left[-f(x_0)+f(x_1)\right]$$

注意到$f'(x)\approx P'(x)$，于是有下列求导的两点公式

$$f'(x_0)\approx\frac{1}{h}\left[f(x_1)-f(x_0)\right]\qquad f'(x_1)\approx\frac{1}{h}\left[f(x_1)-f(x_0)\right]$$

而利用余项公式知，带余项的两点公式是

$$f'(x_0)=\frac{1}{h}\left[f(x_1)-f(x_0)\right]-\frac{h}{2}f''(\xi)\qquad f'(x_1)=\frac{1}{h}\left[f(x_1)-f(x_0)\right]+\frac{h}{2}f''(\xi)$$

非常重要

(2) 三点公式

设已给出两个节点上x_0，$x_1=x_0+h$，$x_2=x_0+2h$上的函数值$f(x_0)$, $f(x_1)$, $f(x_2)$，作二次插值

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

令$x=x_0+th$，上式可表示为

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

两端对t求导，有

$$P'(x_0+th)=\frac{1}{2h}\left[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)\right]$$

6.3 插值型求导公式

非常重要

$$P'(x_0+th)=\frac{1}{2h}\left[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)\right]$$

上式分别取 t=0,1,2，得到三种三点公式

$$f'(x_0)\approx\frac{1}{2h}\left[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)\right]$$

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

$$f'(x_2)\approx\frac{1}{2h}\left[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)\right]$$

6.3 插值型求导公式

非常重要

而带余项的三点公式如下：

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$$

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

$$f'(x_2) \approx \frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$$

式中$\xi\in[x_0,x_1]$，截断误差是$O(h^2)$。

用插值多项式P(x)作为f(x)的近似函数，还可以建立高阶数值求导公式

$$f^{(n)}(x) \approx P^{(n)}(x) \qquad k=0,1\cdots,n$$

例6.2 已知函数y=f(x)的下列数值：

x	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9
y	12.185	13.4637	14.8797	16.4446	18.1741

用2点，3点数值微分公式计算x=2.7处的一阶导数。

解 h=0.1时，由2点公式

$$f'(x_0) \approx [f(x_1)-f(x_0)]/h$$

取x0=2.6,x1=2.7，得

$$f'(2.7)=[14.8797-13.4637]/0.1=14.160$$

由3点公式 $f'(x_1) \approx [-f(x_0)+f(x_2)]/2h$

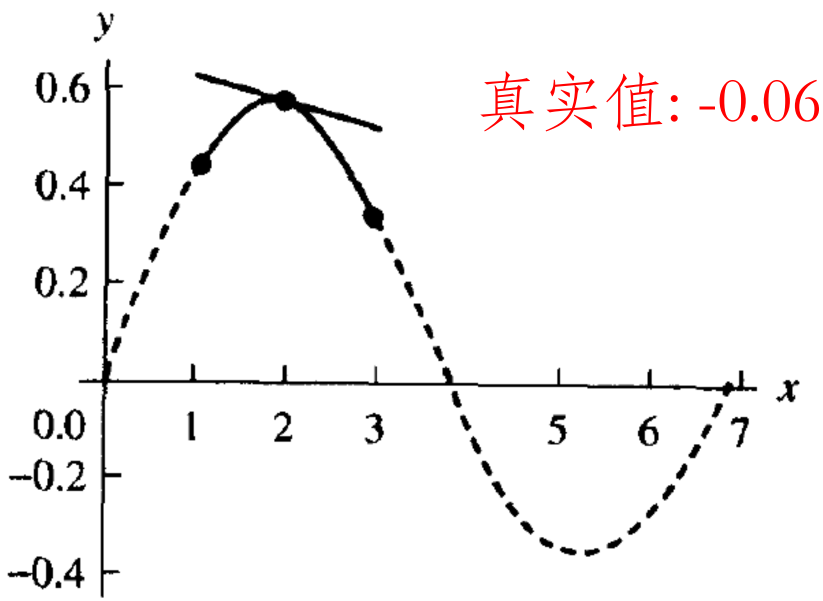
取x0=2.6,x1=2.7,x2=2.8，得

$$f'(2.7)=[16.4446-13.4637]/0.2=14.9045$$

非常重要

例6.3 在区间[0,7]内，考察8个等距点：
(0,0.0000), (1,0.4400), (2,0.5767), (3,0.3391), (4,-0.0660), (5,-0.3276), (6,-0.2767), (7,-0.004)

真实值: -0.0645

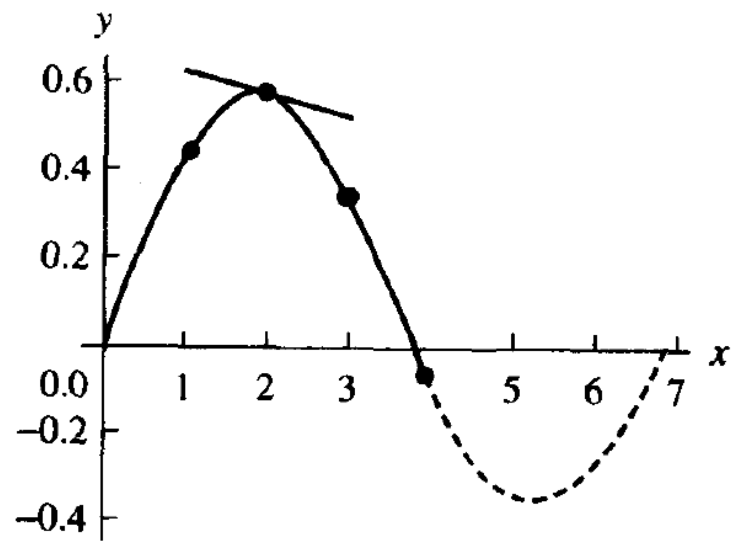


(a)

经过点(1,0.4400), (2,0.5767), (3,0.3391)的插值多项式

$$p_2(x) = -0.0710 + 0.6982x - 0.1872x^2$$

求导可得 $p_2'(2) = -0.0505$



(b)

经过点(0,0.0000), (1,0.4400), (2,0.5767), (3,0.3391), (4,-0.0660)的插值多项式

$$p_4(x) = 0.4986x + 0.011x^2 - 0.0813x^3 + 0.0116x^4$$

求导可得 $p_4'(2) = -0.0618$

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

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

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

例6.4 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}

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

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}

```
function [A,df]=ChazhiChafen(X,Y)

%Input     - X is the 1xn abscissa vector
%          - Y is the 1xn ordinate vector
%Output  - A is the 1xn vector containing the
coefficients of the Nth
%           degree Newton polynomial
%          - df is the approximate derivative
% x=0:0.1:1.5;  y=x.^2+sin(x);
% [A,df]=ChazhiChafen(x,y)
A=Y;
N=length(X);

for j=2:N
   for k=N:-1:j
      A(k)=(A(k)-A(k-1))/(X(k)-X(k-j+1));
   end
end
x0=X(1);
df=A(2);
prod=1;
n1=length(A)-1;
for k=2:n1
   prod=prod*(x0-X(k));
   df=df+prod*A(k+1);
end
```

Matlab 实现:

ChazhiChafen.m

作业6.1

3. 设 $f(x)=\ln(x)$ 的数据值如下表所示，精度为小数点后 4 位。

x	$f(x)=\ln(x)$
4.90	1.5892
4.95	1.5994
5.00	1.6094
5.05	1.6194
5.10	1.6292

(a) $h=0.05$，利用公式(6)计算 $f''(5)$ 的近似值。

(b) $h=0.01$，利用公式(6)计算 $f''(5)$ 的近似值。

(c) $h=0.05$，利用公式(12)计算 $f''(5)$ 的近似值。

(d) 上述答案中，哪个最精确？

算法与程序：

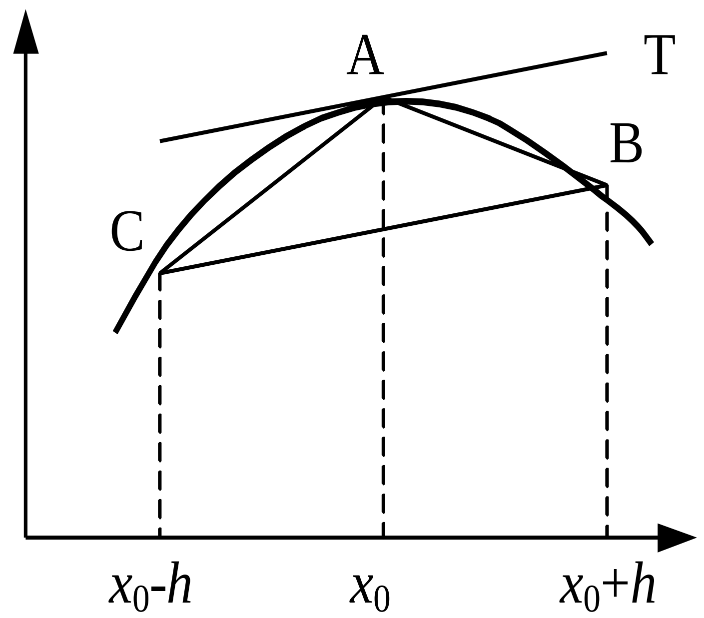
修改程序：ChazhiChafen.m，使得可用它计算

$$P'(x_m),\ m=1,2,\cdots,N+1.$$

6.4 数值差分公式

如右图所示，

前述3种导数的近似值分别表示弦线AB，AC和BC的斜率，将这3条通过A点的弦的斜率与切线AT的斜率进行比较后，可见弦BC的斜率更接近于切线AT的斜率f’(x_0)。



因此从精度方面看，用中心差分近似代替导数值更可取，则称

$$G(h) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h} \qquad (10)$$

为求f’(x_0) 的中点方法。

利用中点公式计算导数$f'(x_0)$，首先必须选取合适的步长，并进行误差分析。分别将$f(a\pm h)$在$x=a$处泰勒展开，有

$$f(a\pm h)=f(a)\pm hf'(a)+\frac{h^2}{2!}f''(a)\pm\frac{h^3}{3!}f'''(a)+\frac{h^4}{4!}f^{(4)}(a)\pm\frac{h^5}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots$$

代入(10)得

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

由此可知，从截断误差的角度来看，步长越小，计算结果越准确。但从舍入误差角度，h越小，$f(a+h)$与$f(a-h)$越接近，直接相减会造成有效数字的严重损失。就舍入误差而言，步长是不宜太小的。怎样选择最佳步长，使截断误差与舍入误差之和最小呢?

例 6.4 设 $f(x)=e^x$ 且 $x=1$。使用步长 $h_k=10^{-k}, k=1,2,\cdots,10$ 计算差商 D_k。

解：计算 D_k 所需的值 $f(1+h_k)$ 和 $(f(1+h_k)-f(1))/h_k$ 如表 6.1 所示。精度为小数点后9位

表 6.1 求解 $D_k=(e^{1+h_k}-e)/h_k$ 的差商

h_k	$f_k=f(1+h_k)$	f_k-e	$D_k=(f_k-e)/h_k$
$h_1=0.1$	3.004166024	0.285884196	2.858841960
$h_2=0.01$	2.745601015	0.027319187	2.731918700
$h_3=0.001$	2.721001470	0.002719642	2.719642000
$h_4=0.0001$	2.718553670	0.000271842	2.718420000
$h_5=0.00001$	2.718309011	0.000027183	2.718300000
$h_6=10^{-6}$	2.718284547	0.000002719	2.719000000
$h_7=10^{-7}$	2.718282100	0.000000272	2.720000000
$h_8=10^{-8}$	2.718281856	0.000000028	2.800000000
$h_9=10^{-9}$	2.718281831	0.000000003	3.000000000
$h_{10}=10^{-10}$	2.718281828	0.000000000	0.000000000

最大的值 $h_1=0.1$ 不能得到好的近似值 $D_1\approx f'(1)$，因为步长 h_1 太大，使得两点分割太远，差商是经过这两点的割线的斜率，不能很好地近似切线。当以小数点后 9 位的精度计算公式(2)时，根据 h_9 可得 $D_9=3$，而根据 h_{10} 可得 $D_{10}=0$。如果 h_k 太小，则 $f(x+h_k)$ 和 $f(x)$ 的值将非常接近。根据差值 $f(x+h_k)-f(x)$ 可看出由于两者太接近，使得精度损失。值 $h_{10}=10^{-10}$ 太小，使得 $f(x+h_{10})$ 和 $f(x)$ 的值相同，因此计算差商为零。

6.3 数值差分公式

Matlab实现：　ShuzhiChafen.m

```
function  [L,n]=ShuzhiChafen(f,x,toler)

%Input     - f is the function
%          - x is the differentiation point
%          - toler is the desired tolerance
%Output - L=[H' D' E']: H is the vector of step sizes
%            D is the vector of approximate derivatives
%            E is the vector of error bounds
%          - n is the coordinate of the "best
approimation"

%f=@(x) 20.*x.^3+sin(x)-6.*x-3;
% t=1; toler=0.001;
% [L,n]=ShuzhiChafen(f,t,toler)

max1=15;
h=1;
H(1)=h;
D(1)=(f(x+h)-f(x-h))/(2*h);
E(1)=0;
R(1)=0;

for n=1:2
  h=h/10;
  H(n+1)=h;
D(n+1)=(f(x+h)-f(x-h))/(2*h);
  E(n+1)=abs(D(n+1)-D(n));
R(n+1)=2*E(n+1)*(abs(D(n+1))+abs(D(n))+eps);
end

n=2;

while((E(n)>E(n+1))&(R(n)>toler))&n<max1
  h=h/10;
  H(n+2)=h;
  D(n+2)=(f(x+h)-f(x-h))/(2*h);
  E(n+2)=abs(D(n+2)-D(n+1));

R(n+2)=2*E(n+2)*(abs(D(n+2))+abs(D(n+1))+eps);
  n=n+1;
end

n=length(D)-1;
L=[H' D' E'];
```

作业6.2

4. 设 $f(x)=e^x$。

(a) 步长分别为 $h=0.1$ 和 $h=0.01$，利用公式(10)计算 $f'(2.3)$ 的近似值，并与 $f'(2.3)=e^{2.3}$ 进行比较。

(b) 利用式(29)中的外推公式计算(a)中 $f'(2.3)$ 的近似值。

(c) 计算截断误差(11)的边界。对所有情况使用

$$|f^{(5)}(c)|\leqslant e^{2.5}\approx 12.18249396$$

12. 设 $f(x)$ 如下表所示。固有的舍入误差的边界为 $|e_k|\leqslant 5\times 10^{-6}$。在计算中使用舍入值。

x	$f(x)=\cos(x)$
1.100	0.45360
1.190	0.37166
1.199	0.36329
1.200	0.36236
1.201	0.36143
1.210	0.35302
1.300	0.26750

(a) $h=0.1$ 和 $h=0.01$ 和 $h=0.001$，用公式(17)求解 $f'(1.2)$ 的近似值。

(b) 比较计算结果和 $f'(1.2)=-\sin(1.2)\approx-0.93204$。

(c) 针对(a)中的 3 种情况求解式(19)中的总误差界。

本章教学要求及重点难点

- 理解数值微分的基本概念
- 掌握导数的近似值、数值差分公式、插值型求导公式的基本方法及其误差分析
- 重点：插值型求导公式的基本方法及其误差分析