第7章 数值微分
Numerical Differentiation

苏 芮

srhello@zju.edu.cn

开物苑4-202

问题来源-数值微分

工程应用：

(1)f(x)的结构复杂，求导或积分非常困难；

$$\sqrt{1+x^3},\frac{\sin x}{x},\sin x^2,\cos x^2,\frac{1}{\mathrm{Ln}x},e^{-x^2};$$

(2)f(x)的精确表达式不知道，只有一张由实验提供的函数表；

x	1	2	…	99	100
y	5.61	10.42		19.21	20.03

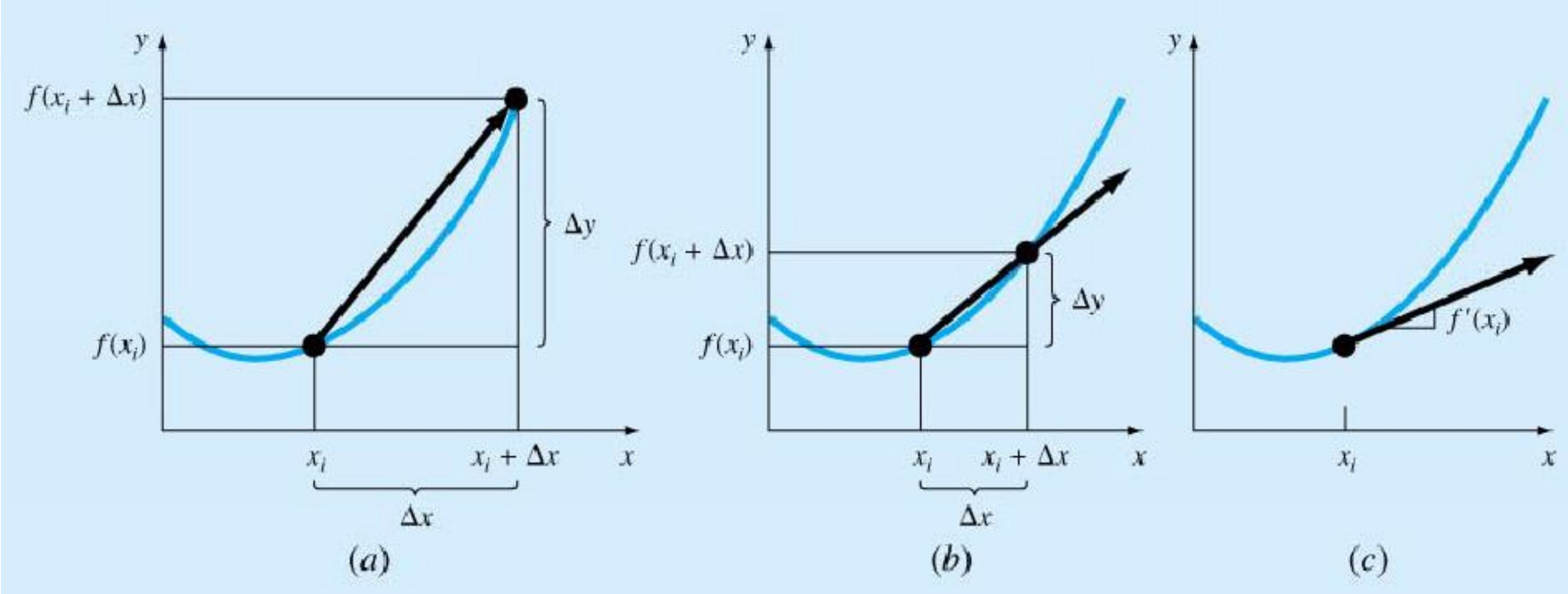
对于这些情况，计算微分或积分的精确值是十分困难的，因此要求引入近似的计算方法。

问题来源-数值微分

数值微分基本原理

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x_i+\Delta x)-f(x_i)}{\Delta x}$$

$$\frac{dy}{dx} = \lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x_i+\Delta x)-f(x_i)}{\Delta x}$$



数值微分-差商近似

微积分中，关于导数的定义如下：

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

$$=\lim_{h\to 0}\frac{f(x)-f(x-h)}{h}$$ 向后差商

$$=\lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$ 中心差商

取极限的近似值，即差商

数值微分-差商近似

向前差商 $f'(x_0) \approx \dfrac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$

由Taylor公式展开

$$f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!}f''(\xi), x_0 \le \xi \le x_0 + h$$

因此，有误差

$$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} = \boxed{-\frac{h}{2!}} f''(\xi) = O(h)$$

数值微分-差商近似

中心差商 $f'(x_0) \approx \dfrac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$

由Taylor公式展开

$$f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!}f''(x_0) + \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1), x_0 \le \xi_1 \le x_0 + h$$

$$f(x_0-h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!}f''(x_0) - \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_2), x_0 - h \le \xi_2 \le x_0$$

两式相减，因此有误差

$$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$$

$$= \frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)] = \boxed{\frac{h^2}{6}} f'''(\xi) = O(h^2)$$

h越小，误差越小??

数值微分-差商近似

例 6.1 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。精度为小数点后 9 位。

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。

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

```
>> exp(1)

ans =

    2.7183
```

*h*越小，误差越小，但同时舍入误差增大（数值微分）

数值微分-差商近似

事后估计法确定最佳步长

设$D(h)$，$D(h/2)$分别为步长为h，$h/2$的差商公式

$$f'(x)-D(h)=O(h)$$
$$f'(x)-D(h/2)=O(h/2)$$

$$\Rightarrow \frac{f'(x)-D(h)}{f'(x)-D(h/2)}=\frac{O(h)}{O(h/2)}\approx 2$$

$$\Downarrow$$

$$f'(x)-D(h)\approx 2f'(x)-2D(h/2)$$

$$\Downarrow$$

$$f'(x)-D(h/2)\approx D(h)-D(h/2)$$

$$\left|D(h)-D(\frac{h}{2})\right|<\varepsilon \Rightarrow \left|f'(x)-D(h/2)\right|<\varepsilon$$

这时的步长$h/2$就是合适的步长

数值微分-差商近似

由Taylor公式展开

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(x_0)+\frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1),x_0\le\xi_1\le x_0+h$$

定理 6.2(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:

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

而且存在数 $c=c(x)\in[a,b]$,满足:

$$f'(x)=\frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h}+E_{\text{trunc}}(f,h)$$

其中:

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

对函数在x-2h，x-h，x+h，h+2h位置进行泰勒展开，通过线性叠加对误差进行消减！！

数值微分-差商近似

例 6.2 设 $f(x)=\cos(x)$。

(a) 利用式(3)和式(10)，步长分别为 $h=0.1, 0.01, 0.001, 0.0001$，计算 $f'(0.8)$ 的似值。精度为小数点后 9 位。

(b) 与真实值 $f'(0.8)=-\sin(0.8)$ 进行比较。

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

(a) 设 h=0.01，根据式(3)，可得：

$$f'(0.8)\approx\frac{f(0.81)-f(0.79)}{0.02}\approx\frac{0.689498433-0.703845316}{0.02}\approx-0.717344150$$

设 h=0.01，根据式(10)，可得：

$$f'(0.8)\approx\frac{-f(0.82)+8f(0.81)-8f(0.79)+f(0.78)}{0.12}$$

$$\approx\frac{-0.682221207+8(0.689498433)-8(0.703845316)+0.710913538}{0.12}$$

$$\approx-0.717356108$$

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

数值微分-差商近似

Richardson 外推法

这一节将重点研究式(3)与式(10)之间的关系。设 $f_k = f(x_k) = f(x_0 + kh)$，且用 $D_0(h)$ 和 $D_0(2h)$ 分别表示以 h 和 $2h$ 为步长，根据式(3)得到的 $f'(x_0)$ 的近似值，表示为：

$$f'(x_0) \approx D_0(h) + Ch^2 \tag{27}$$

和：

$$f'(x_0) \approx D_0(2h) + 4Ch^2 \tag{28}$$

定理 6.3(Richardson 外推) 设 $f'(x_0)$ 的两个精度为 $O(h^{2k})$ 的近似值分别为 $D_{k-1}(h)$ 和 $D_{k-1}(2h)$，而且它们满足：

$$f'(x_0) = D_{k-1}(h) + c_1 h^{2k} + c_2 h^{2k+2} + \cdots \tag{34}$$

和：

$$f'(x_0) = D_{k-1}(2h) + 4^k c_1 h^{2k} + 4^{k+1} c_2 h^{2k+2} + \cdots \tag{35}$$

这样可得到改进的近似值表达式：

$$f'(x_0) = D_k(h) + O(h^{2k+2}) = \frac{4^k D_{k-1}(h) - D_{k-1}(2h)}{4^k - 1} + O(h^{2k+2}) \tag{36}$$

误差估计，参考龙贝格数值积分公式的构建思路

数值微分-差商近似

更多的中心差分公式

对函数在不同位置进行泰勒展开，通过线性叠加对误差进行消减

表 6.3 精度为 $O(h^2)$ 的中心差分公式

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

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

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

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

表 6.4 精度为 $O(h^4)$ 的中心差分公式

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

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

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

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

数值微分-差商近似

例 6.4 设 $f(x)=\cos(x)$

(a) $h=0.1,0.01,0.001$，利用式(6)求解 $f''(0.8)$ 的近似值。精度为小数点后 9 位。

(b) 比较计算结果和真实值 $f''(0.8)=-\cos(0.8)$。

(a) 当 $h=0.01$ 时，计算过程如下：

$$f''(0.8)\approx\frac{f(0.81)-2f(0.80)+f(0.79)}{0.0001}$$

$$\approx\frac{0.689498433-2(0.696706709)+0.703845316}{0.0001}$$

$$\approx-0.696690000$$

(b) 近似值结果的误差为 -0.000016709。其他的计算如表 6.5 所示。在误差分析中，将解释在此例中为何 $h=0.01$ 是最佳的。

表 6.5 求解例 6.4 中 $f''(x)$ 的数值近似值

步长	式(6) 得出的近似值	式(6) 产生的误差
$h=0.1$	-0.696126300	-0.000580409
$h=0.01$	-0.696690000	-0.000016709
$h=0.001$	-0.696000000	-0.000706709

数值微分-差商近似

误差分析

设 $f_k = y_k + e_k$，其中 e_k 是计算 $f(x_k)$ 产生的误差，包括测量中的噪音和舍入误差，则式(6)可表示为：

$$f''(x_0) = \frac{y_1 - 2y_0 + y_{-1}}{h^2} + E(f,h) \tag{7}$$

式(7)中数值导数的误差项 $E(h,f)$ 包含舍入误差和截断误差：

$$E(f,h) = \frac{e_1 - 2e_0 + e_{-1}}{h^2} - \frac{h^2 f^{(4)}(c)}{12} \tag{8}$$

如果设每个误差 e_k 的量级为 ϵ，同时误差是累积的，而且 $|f^{(4)}(x)| \leqslant M$，则可得到如下的误差界：

$$|E(f,h)| \leqslant \frac{4\epsilon}{h^2} + \frac{Mh^2}{12} \tag{9}$$

如果 h 较小，则舍入误差带来的 $4\epsilon/h^2$ 就会较大。当 h 较大，这 $Mh^2/12$ 会较大。可通过求下式的最小值得到最佳步长：

$$g(h) = \frac{4\epsilon}{h^2} + \frac{Mh^2}{12} \tag{10}$$

设 $g'(h) = 0$，可得出 $-8\epsilon/h^3 + Mh/6 = 0$，即 $h^4 = 48\epsilon/M$，这样可得到优化值：

$$h = \left(\frac{48\epsilon}{M}\right)^{1/4} \tag{11}$$

数值微分-差商近似

由于舍入误差部分与 h 的平方成反比，所以当 h 变小时，这一项会变大。这有时称为步长的两难问题。对此问题的一个部分解决方法是用一个高阶公式，这样可以用较大的 h 值可得到需要精度的近似值。表 6.4 中求精度为 $O(h^4)$的 $f''(x_0)$的公式为：

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

式(12)中的误差项有如下表达式：

$$E(f,h)=\frac{16\varepsilon}{3h^2}+\frac{h^4f^{(6)}(c)}{90} \tag{13}$$

这里 c 位于区间$[x-2h,x+2h]$。$|E(f,h)|$的界为：

$$|E(f,h)|\leqslant\frac{16\varepsilon}{3h^2}+\frac{h^4M}{90} \tag{14}$$

其中$|f^{(6)}(x)|\leqslant M$。h 的优化值为：

$$h=\left(\frac{240\varepsilon}{M}\right)^{1/6} \tag{15}$$

数值微分-差商近似

例 6.5 设 $f(x)=\cos(x)$

(a) $h=1.0,0.1,0.01$，利用式(12)求 $f''(0.8)$ 的近似值。精度为小数点后 9 位。

(b) 比较计算结果和真实值 $f''(0.8)=-\cos(0.8)$。

(c) 求优化步长。

(a) 当 $h=0.1$ 时，

$$f''(0.8)\approx\frac{-f(1.0)+16f(0.9)-30f(0.8)+16f(0.7)-f(0.6)}{0.12}$$

$$\approx\frac{-0.540302306+9.945759488-20.90120127+12.23747499-0.825335615}{0.12}$$

$$\approx-0.696705958$$

(b) 计算结果的误差为 -0.000000751。其他的计算结果和误差如表 6.6 所示。

(c) 当采用式(15)时，可使用边界 $|f^{(6)}(x)|\leqslant|\cos(x)|\leqslant1=M$ 和值 $\varepsilon=0.5\times10^{-9}$。根据这些值可得到优化步长 $h=(120\times10^{-9}/1)^{1/6}=0.070231219$。

表 6.6　例 6.5 中求解 $f''(x)$ 的数值近似值

步　长	式(12)的近似值	式(12)的误差
$h=1.0$	-0.689625413	-0.007081296
$h=0.1$	-0.696705958	-0.000000751
$h=0.01$	-0.696690000	-0.000016709

数值微分-插值多项式

一、插值型求导公式/* Derivation Formula of Interpolation Type*/

已知表格函数 $y = f(x)$

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
y	y_0	y_1	y_2	$\cdots$	y_n

以 $\{(x_i, y_i)\}_{i=0}^{n}$ 构造n次Lagrange插值多项式: $P_n(x)$

插值型求导公式: $\boxed{f'(x) \approx P_n'(x)}$

误差估计

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

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

$$= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}'(x) + \boxed{\left[f^{(n+1)}(\xi) \right]' \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}}$$

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

$$i = 0, 1, 2, \cdots, n$$

为了计算方便和估计误差，节点通常取等距节点。

➢ 两点公式

已知表格函数 $y = f(x)$

x	x_0	x_1
y	y_0	y_1

作线性插值

$$P_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1$$

$$\boxed{h = x_1 - x_0}$$

$$P_1'(x_0) = \frac{y_0}{x_0 - x_1} + \frac{y_1}{x_1 - x_0} = \frac{1}{h}(y_1 - y_0) = P_1'(x_1)$$

误差

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}(y_1 - y_0) - \frac{h}{2} f''(\xi_1)$$

$$f'(x_1) = \frac{1}{h}(y_1 - y_0) + \frac{h}{2} f''(\xi_2)$$

➢ 三点公式

已知表格函数 $y = f(x)$

x	x_0	x_1	x_2
y	y_0	y_1	y_2

其中 $x_k = x_0 + kh$

$k = 1, 2$

作二次插值

$$P_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} y_1$$

$$+ \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} y_2$$

$$\boxed{f'(x) \approx P_2'(x)}$$

为了求导数方便，令 $x = x_0 + th$

$$P_2(x_0+th)=\frac{1}{2}(t-1)(t-2)y_0 - t(t-2)y_1 + \frac{1}{2}t(t-1)y_2$$

$$P_2'(x_0+th)=\frac{1}{2h}\left[(2t-3)y_0-(4t-4)y_1+(2t-1)y_2\right]$$

当 $t=0,1,2$ 时得到三点公式：

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}\left[-3y_0+4y_1-y_2\right]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi_1)$$

$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}\left[-y_0+y_2\right]-\frac{h^2}{6}f'''(\xi_2)$$

中点公式

$$f'(x_2)=\frac{1}{2h}\left[y_0-4y_1+3y_2\right]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi_3)$$

例3：已知函数 $f(x)$ 在 $x=1.0,\ 1.1,\ 1.2$ 处的函数值，应用三点公式计算这些点处的导数值.

x_i	1.0	1.1	1.2
$f(x_i)$	0.250000	0.226757	0.206612

解： 应用三点公式

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

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

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

计算结果如下:

x_i	1.0	1.1	1.2
$f'(x_i)$	−0.24792	−0.21694	−0.18596

类似地可以建立高阶导数的微分公式：

$$P_2''(x_0+th)=\frac{1}{h^2}\left[y_0-2y_1+y_2\right]$$

$$f''(x_1)=\frac{1}{h^2}\left[y_0-2y_1+y_2\right]-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)$$

二、利用3次样条插值函数求数值微分的思想

设函数 $f(x)\in C^4[a,b]$，Δ是区间 $[a,b]$ 的一个分割，$S(x)$ 是关于$f(x)$ 的带有 I 型(斜率边界)或II型(二阶导数边界)边界条件的插值函数，则有误差估计

$$\max_{a\le x\le b}\left|(f(x)-S(x))^{(r)}\right|\le C_r M_4 h^{(4-r)}\qquad r=0,1,2,3$$

在区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上

$$S(x)=\frac{(x_{i+1}-x)^2[2(x-x_i)+h_{i+1}]}{h_{i+1}^3}y_i$$

$$+\frac{(x-x_i)^2[2(x_{i+1}-x)+h_{i+1}]}{h_{i+1}^3}y_{i+1}$$

$$+\frac{(x_{i+1}-x)^2(x-x_i)}{h_{i+1}^2}m_i-\frac{(x-x_i)^2(x_{i+1}-x)}{h_{i+1}^2}m_{i+1}$$

$$\boxed{f'(x)\approx S'(x)\quad \forall x\in[a,b]}$$

$$S'(x)=\frac{(x_{i+1}-x)(2x_i+x_{i+1}-3x)}{h_{i+1}^2}m_i$$

$$-\frac{(x-x_{i+1})(2x_{i+1}+x_i-3x)}{h_{i+1}^2}m_{i+1}$$

$$+6\frac{(y_{i+1}-y_i)}{h_{i+1}^3}(x_{i+1}-x)(x-x_i)$$

如果只求节点上的导数

类似地求高阶导数

$$\boxed{f'(x_i)\approx m_i,\ f''(x_i)\approx M_i \quad i=0,1,\cdots,n}$$

感谢聆听,欢迎讨论！