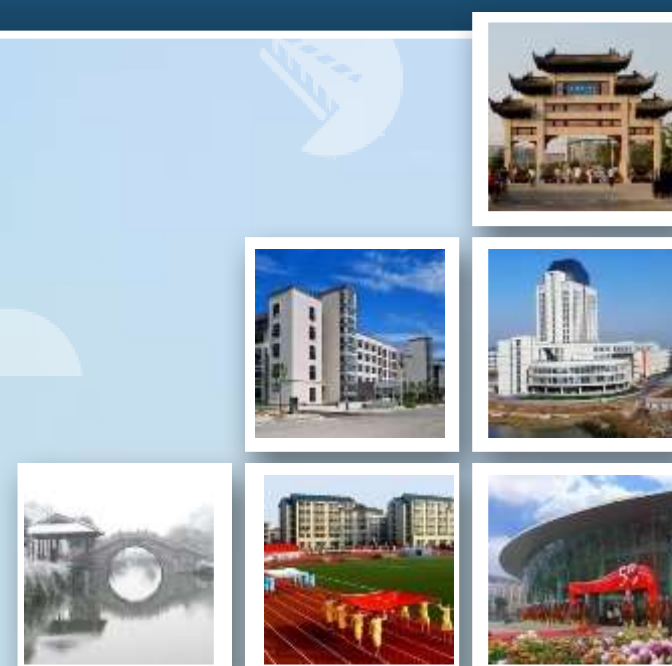
第七章 数值积分与数值微分

第五节 数值微分



7.5.1 插值型求导公式

给定如下函数表

函数表

x	x_0	x_1	…	x_i	…	x_n
y	y_0	y_1	…	y_i	…	y_n

可以建立满足条件的插值多项式 $P_n(x_k)=y_k \quad (k=0,1,2,\cdots,n)$

利用 $P_n(x)$ 的导数值作为 $f(x)$ 导数值的近似值，就得到数值导数公式

$$f'(x)\approx P_n'(x) \tag{7.5.1}$$

$$f''(x)\approx P_n''(x) \tag{7.5.2}$$

此称为**插值型求导公式**。

插值型求导公式误差

由拉格朗日插值多项式的误差公式

$$R_n(x)=f(x)-P_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}(x) \qquad (7.5.3)$$

其中 $w_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$，$\xi$ 与 x 有关。

在（7.5.3）式两边对 x 求导，得（7.5.1）的截断误差

$$R_n'(x)=\frac{d}{dx}\left(\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\right)w_{n+1}(x)+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}'(x) \qquad (7.5.4)$$

注：差商定义可证明 $\frac{d}{dx}\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}=\frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}$

特别地，当 $x=x_k$ 时，$R_n'(x_k)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}'(x_k)$

江南大学

两点公式

以下考虑在节点等距的情形，即 $x_k = x_0 + kh$ （$k = 0,1,2,\cdots,n$）

当 $n=1$ 给出两个节点 (x_0, y_0)，(x_1, y_1)，作线性插值公式

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

$$\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'_{n+1}(x_k)$$

则 $P_1'(x) = \frac{1}{h}(y_1 - y_0)$ $R_1'(x_0) = \frac{f''(\xi)}{2}(-h)$ $R_1'(x_1) = \frac{f''(\xi)}{2}h$

$$\begin{cases} f'(x_0) = \frac{1}{h}(y_1 - y_0) - \frac{h}{2}f''(\xi) \\ f'(x_1) = \frac{1}{h}(y_1 - y_0) + \frac{h}{2}f''(\xi) \end{cases} \quad (7.5.7)$$

三点公式——一阶导数公式

当 $n=2$ 给出三个节点 (x_0,y_0)，(x_1,y_1)，(x_2,y_2)，作二次插值

$$P_2(x)=y_0\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+y_1\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}+y_2\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

令 $x=x_0+th$，上式可表示为

$$p_2(x_0+th)=\frac{1}{2}y_0(t-1)(t-2)-y_1t(t-2)+\frac{1}{2}y_2t(t-1)$$

两端对 t 求导，再分别取 $t=0,1,2$

$$\begin{cases} p_2'(x_0)=\dfrac{1}{2h}(-3y_0+4y_1-y_2) \\ p_2'(x_1)=\dfrac{1}{2h}(-y_0+y_2) \\ p_2'(x_2)=\dfrac{1}{2h}(y_0-4y_1+3y_2) \end{cases}$$

$$R_2'(x_0)=\frac{f'''(\xi)}{3!}(2h^2),\quad R_2'(x_1)=\frac{f'''(\xi)}{3!}(-h^2),\quad R_2'(x_2)=\frac{f'''(\xi)}{3!}(2h^2)$$

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

$$\begin{cases} f'(x_0)=\dfrac{1}{2h}(-3y_0+4y_1-y_2)+\dfrac{h^2}{3}f'''(\xi) \\ f'(x_1)=\dfrac{1}{2h}(-y_0+y_2)-\dfrac{h^2}{6}f'''(\xi) \\ f'(x_2)=\dfrac{1}{2h}(y_0-4y_1+3y_2)+\dfrac{h^2}{3}f'''(\xi) \end{cases} \qquad (7.5.8)$$

特别是（7.5.8）中间的公式少用了一个函数值 y_1，称为**中点公式**

三点公式——二阶导数公式

对 $p_2(x_0+th)$ 对 t 求导两次，得 $p_2''(x_0+th)=\frac{1}{h^2}(y_0-2y_1+y_2)$

$$R''_n(x)=\frac{f^{(n+4)}(\xi_1)}{(n+3)!}w_{n+1}(x)+\frac{2f^{(n+2)}(\xi_2)}{(n+2)!}w'_{n+1}(x)+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w''_{n+1}(x)$$

特别地，当 $x=x_k$ 时，$R_n''(x_k)=\frac{2f^{(n+2)}(\xi_2)}{(n+2)!}w'_{n+1}(x_k)+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w''_{n+1}(x_k)$

二阶数值导数公式

$$\begin{cases} f''(x_0)=\frac{1}{h^2}(y_0-2y_1+y_2)-hf'''(\xi_1)+\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_2) \\ f''(x_1)=\frac{1}{h^2}(y_0-2y_1+y_2)-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi) \\ f''(x_2)=\frac{1}{h^2}(y_0-2y_1+y_2)+hf'''(\xi_1)-\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_2) \end{cases} \quad (7.5.9)$$

例 7.5.1： 已知函数 $y=e^x$ 的下列数值

x	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9
y	12.1825	13.4637	14.8797	16.4446	18.1741

试用（7.5.7）-（5.9）式分别计算 $x=2.7$ 处函数的一、二阶导数值。

解： $h=0.2$ 时

$$f'(2.7)\approx\frac{1}{0.2}(14.8797-12.1825)=13.486$$ （$x_0=2.5$，$x_1=2.7$）

$$f'(2.7)\approx\frac{1}{2\times0.2}(18.1741-12.1825)=14.979$$ （$x_0=2.5$，$x_1=2.7$，$x_2=2.9$）

$$f''(2.7)\approx\frac{1}{(0.2)^2}(12.1825-2\times14.8797+18.1741)=14.930$$

（$x_0=2.5$，$x_1=2.7$，$x_2=2.9$）

江南大学

当 $h=0.1$ 时

$$f'(2.7)\approx\frac{1}{0.1}(14.8797-13.4637)=14.160$$ （$x_0=2.6$， $x_1=2.7$）

$$f'(2.7)\approx\frac{1}{2\times0.1}(16.4446-13.4637)=14.9045$$（$x_0=2.6$，$x_1=2.7$，$x_2=2.8$）

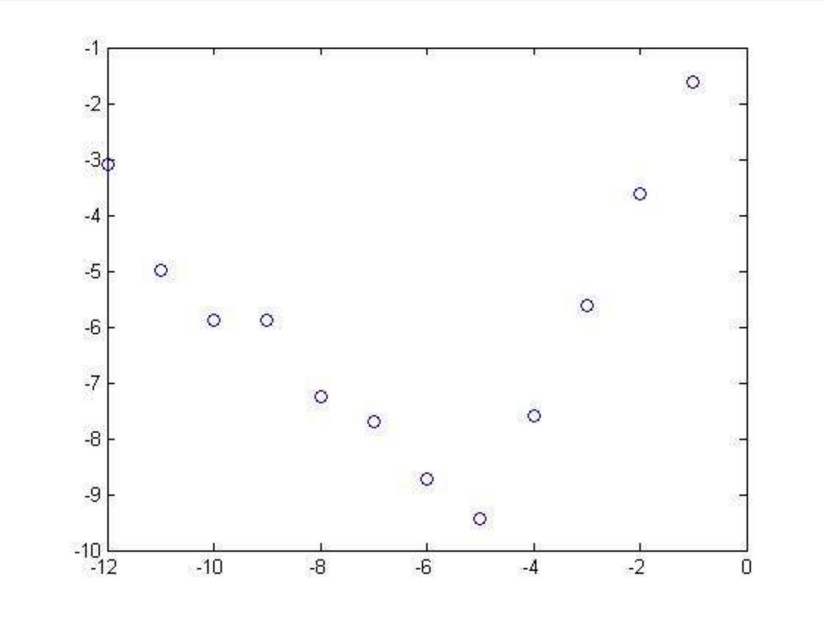
$$f''(2.7)\approx\frac{1}{(0.1)^2}(13.4637-2\times14.8797+16.4446)=14.890$$

（$x_0=2.6$， $x_1=2.7$， $x_2=2.8$）

验证实际误差符合理论误差估计，以 $h=0.1$ 为例

	理论误差	实际误差
一阶向后	$h/2*ax\lvert f''(\xi)\rvert\approx0.744$	0.720
一阶中心	$h^2/6*max\lvert f'''(\xi)\rvert\approx0.0274$	0.0248
二阶中心	$h^2/12*max\lvert f^{(4)}(\xi)\rvert\approx0.0137$	0.0103

以$h=10^{-1},10^{-2},\cdots 10^{-12}$，一阶中心差分计算$e^x$在$x=2.7$的误差的loglog图像



注：$f'(x)-\frac{\hat{f}(x+h)-\hat{f}(x-h)}{2h}$，其中$\hat{f}(x\pm h)=f(x\pm h)+\varepsilon$，$\varepsilon$计算机精度$10^{-16}$

7.5.2 外推法

以（7.5.8）的第二式为例，来说明外推法在数值导数中的应用

记 x_1 为 x，则 $x_0 = x - h$，$x_2 = x + h$，由 Taylor 公式

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \cdots$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \cdots$$

两式相减，除以 $2h$，移项得

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{f^{(2i+1)}(x)}{(2i+1)!} h^{2i} \qquad (7.5.10)$$

令 $T(h)=\dfrac{1}{2h}\left[f(x+h)-f(x-h)\right]$ （7.5.11）

则（7.5.10）类似于（7.3.1），因此可用（7.3.2）-（7.3.7）推算 $f'(x)$。

例 7.5.2： 已知函数 $y=e^x$ 的下列数值，试用外推法计算 $y'(1)$

x	0.2	0.6	0.8	1.2	1.4	1.8
y	1.221403	1.822118	2.225541	3.320117	4.055200	6.049648

i	T_0^i	T_1^{i-1}	T_2^{i-2}
$0(h=0.8)$	3.017653		
$1(h=0.4)$	2.791353	2.715920	
$2(h=0.2)$	2.736440	2.718136	2.718284

$y'(1)\approx T_2^0\approx 2.718284$

注：$T_1(h)=\dfrac{4T(\frac{h}{2})-(h)}{3}=\dfrac{f(x-h)+8f(x+\frac{h}{2})-8f(x-\frac{h}{2})-(x+h)}{6h}=f'(x)+O(h^4)$

$T_2(h)=\dfrac{16T_1(\frac{h}{2})-T_1(h)}{15}=f'(x)+O(h^6)$

本章小结

本章介绍了积分的数值计算方法，其基本原理主要是逼近论，即设法构造某个简单函数P(x)近似表示f(x)，然后对P(x)求积或求导得到f(x)的积分。基于插值原理，推导了数值积分的基本公式。

插值型求积公式介绍了牛顿—柯特斯公式,取等距节点，算法简单而容易编制程序。但是，由于在 $n\geq8$ 时出现了负系数，从而影响稳定性和收敛性。因此实用的只是低阶公式。解决长区间与低阶公式的矛盾是使用复化求积公式，因此，常用的数值积分法都是复化求积公式。

龙贝格算法是在区间逐次分半过程中，对用梯形法所获得的近似值进行多级“加工”，从而获得高精度的积分近似值的一种方法。它具有自动选取步长且精度高，计算量小的特点，便于在计算机上使用。是数值积分中较好的方法，必须熟练地掌握。

建立在代数精度概念上的待定系数法也是数值积分中的一般方法，按待定系数法确定的数值积分公式没有误差估计式，只能从代数精度出发，估计其精确程度。