第 30 卷第 1 期
2014 年 2 月

大　学　数　学
COLLEGE MATHEMATICS

Vol. 30，№. 1
Feb. 2014

基于泰勒级数展开的一点超前差分公式的推导

张雨浓[1]， 邓健豪[2]， 刘锦荣[1]， 仇　尧[1]， 金　龙[1]
(1. 中山大学 信息科学与技术学院，广东 广州 510006； 2. 中山大学 软件学院，广东 广州 510006)

[摘　要] 传统的数值微分公式有前向差分、后向差分和中心差分公式. 所谓一点超前差分公式，就是后向差分公式在形式上"前移"一点来计算一阶导数的公式. 该公式有效地弥补了传统差分公式的不足之处. 不同于以前研究中使用拉格朗日公式来推导一点超前公式的做法，给出了基于泰勒级数展开的对该组公式及其截断误差的推导，从另一个角度验证了一点超前公式，使其更为完善.

[关键词] 数值差分公式；泰勒级数；一阶导数；一点超前；截断误差

[中图分类号] O241.3　　[文献标识码] A　　[文章编号] 1672-1454(2014)01-0012-05

1 引　言

数值微分是数值分析中的基本问题，同时也是应用科学中非常有用的一个工具[1-3]. 通过使用邻近的离散数据点，有限差分法可有效地近似一个函数在目标点的导数值[4]. 根据目标点在采样区间中的位置，有限差分公式可以被划分为前向差分、后向差分和中心差分公式. 目标点是所用数据点的最左点即为前向差分，最右点为后向差分，中间点为中心差分.

使用多点中心差分公式时，要求目标点两侧有相同数量的离散数据点. 因此，当目标点靠近边界时，单边数据点不足，多点中心差分公式往往不能被应用. 当未知函数在目标点的导数值发生加速变化时，由于前(后)向差分公式只应用单边的数据点，可能无法适应该变化，使得近似导数值的误差较大.

为了解决以上问题，一点超前差分公式被提出[5]. 该公式综合了三种传统的差分公式，在后向差分公式的形式上"前移"一点，解决了因单边数据点不足造成的问题，同时适应了目标点的导数值可能发生的加速变化[5]. 该公式由拉格朗日插值多项式推导而来. 利用采集的等间距数据点，可以构造近似未知函数的拉格朗日插值多项式；对该式子求导，即可得到近似的未知函数的一阶数值差分公式[6]，由此可以得出求一阶导数的一点超前公式.

不同于文献[5]和[6]中利用拉格朗日插值多项式来推导一阶数值差分公式的方法，本文提出了基于泰勒级数展开[7]的对一点超前差分公式的推导. 由给出的未知函数在指定区间上的 $N+1$ 个等间距点的函数值，即可列出 N 个关于目标点的 1 到 N 阶导数的泰勒级数展开式. 将 N 个式子代入一点超前差分公式中，即可得出关于 $N+1$ 个系数的方程组. 求解该方程组即可得到 $N+1$ 个数据点的一点超前公式. 使用基于泰勒级数展开的推导方法所得到的二至十六个数据点的一点超前公式以及截断误差与文献[5]中给出的一致，这使得一点超前公式的理论基础更加完善.

另外，计算机数值实验表明，一点超前公式可以取得较好的一阶导数估计精度[5]. 附录中给出了利用一点超前差分公式来近似目标点的一阶导数的 Matlab 程序代码. 只要给出 $N+1$ 个等间距数据点的函数值及间距，即可求出第 N 个点的一阶导数近似值.

[收稿日期] 2012-10-22
[基金项目] 国家自然科学基金(61075121)；教育部高等学校博士学科点专项科研基金博导类课(20100171110045)；国家大学生创新训练项目(201210558042)

2　一点超前差分公式

若 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为采样区间 $[a,b]$ 上 $n+1$ 个互不相同的等间距数据点，即 $x_{i+1}-x_i=h, i=0,1,\cdots,n-1$，其中 h 为采样间隔常数，则未知目标函数 $f(x)$ 的一阶导数的一点超前差分公式为[5]

$$f'(x_{n-1}) \approx \frac{1}{h}\sum_{\substack{j=0\\ j\neq n-1}}^{n} \frac{(-1)^{n-j-1}C_n^j f(x_j)/n + f(x_{n-1})}{n-j-1},$$

其中 $C_n^i = n!/((n-i)!i!)$．该公式的截断误差为 $O(h^n)$．表 1 为 $n=1,2,\cdots,7$ 时，利用该公式计算出来的二至八个数据点的等间距一点超前数值差分公式．

表 1　二至八个数据点的等间距一点超前数值差分公式

点数	等间距一点超前数值差分公式	误差项
二	$f'(x_0)\approx(f(x_1)-f(x_0))/h$	$O(h)$
三	$f'(x_1)\approx(f(x_2)+0f(x_1)-f(x_0))/(2h)$	$O(h^2)$
四	$f'(x_2)\approx(2f(x_3)+3f(x_2)-6f(x_1)+f(x_0))/(6h)$	$O(h^3)$
五	$f'(x_3)\approx(3f(x_4)+10f(x_3)-18f(x_2)+6f(x_1)-f(x_0))/(12h)$	$O(h^4)$
六	$f'(x_4)\approx(12f(x_5)+65f(x_4)-120f(x_3)+60f(x_2)-20f(x_1)+3f(x_0))/(60h)$	$O(h^5)$
七	$f'(x_5)\approx(10f(x_6)+77f(x_5)-150f(x_4)+100f(x_3)-50f(x_2)+15f(x_1)-2f(x_0))/(60h)$	$O(h^6)$
八	$f'(x_6)\approx(60f(x_7)+609f(x_6)-1260f(x_5)+1050f(x_4)-700f(x_3)+315f(x_2)-84f(x_1)+10f(x_0))/(420h)$	$O(h^7)$

3　基于泰勒级数展开的推导过程

定理 1　一阶导数的等间距一点超前差分公式的形式为

$$f'(x_{n-1}) \approx a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1) + \cdots + a_{n-1} f(x_{n-1}) + a_n f(x_n), \tag{1}$$

系数 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 可以由泰勒级数展开来推导并求解线性方程组得出．

证　$f(x)$ 在点 x_{n-1} 的泰勒展开式为

$$\begin{aligned} f(x) = {} & f(x_{n-1}) + (x-x_{n-1})f'(x_{n-1}) + \frac{(x-x_{n-1})^2}{2!}f''(x_{n-1}) + \cdots \\ & + \frac{(x-x_{n-1})^n}{n!}f^{(n)}(x_{n-1}) + \frac{(x-x_{n-1})^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(c), \end{aligned} \tag{2}$$

其中 c 介于 x_{n-1} 与 x 之间．

对于 $0 \leqslant k \leqslant n\ \ (k \neq n-1)$，将 $x_k = x_{n-1} + (k+1-n)h$ 代入(2)中，可以得出 n 个等式

$$\begin{aligned} f(x_0) = {} & f(x_{n-1}) + (1-n)hf'(x_{n-1}) + \frac{(1-n)^2h^2}{2!}f''(x_{n-1}) + \cdots \\ & + \frac{(1-n)^nh^n}{n!}f^{(n)}(x_{n-1}) + \frac{(1-n)^{n+1}h^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(c_0), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f(x_1) = {} & f(x_{n-1}) + (2-n)hf'(x_{n-1}) + \frac{(2-n)^2h^2}{2!}f''(x_{n-1}) + \cdots \\ & + \frac{(2-n)^nh^n}{n!}f^{(n)}(x_{n-1}) + \frac{(2-n)^{n+1}h^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(c_1), \end{aligned}$$

$$\cdots\cdots$$

$$\begin{aligned} f(x_k) = {} & f(x_{n-1}) + (k+1-n)hf'(x_{n-1}) + \frac{(k+1-n)^2h^2}{2!}f''(x_{n-1}) + \cdots \\ & + \frac{(k+1-n)^nh^n}{n!}f^{(n)}(x_{n-1}) + \frac{(k+1-n)^{n+1}h^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(c_k), \end{aligned}$$

$$\cdots\cdots$$

$$f(x_{n-2}) = f(x_{n-1}) - hf'(x_{n-1}) + \frac{h^2}{2!}f''(x_{n-1}) + \cdots$$
$$+ \frac{(-1)^n h^n}{n!}f^{(n)}(x_{n-1}) + \frac{(-1)^{n+1}h^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(c_{n-2}),$$
$$f(x_n) = f(x_{n-1}) + hf'(x_{n-1}) + \frac{h^2}{2!}f''(x_{n-1}) + \cdots$$
$$+ \frac{h^n}{n!}f^{(n)}(x_{n-1}) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(c_n),$$

其中 c_k 介于 x_{n-1} 与 x_k 之间.

将以上 n 个等式代入(1)中,可得

$$\begin{aligned} f'(x_{n-1}) \approx{} & (a_0 + a_1 + \cdots + a_{n-1} + a_n) f(x_{n-1}) \\ & + ((1-n)ha_0 + (2-n)ha_1 + \cdots + (-1)ha_{n-2} + ha_n) f'(x_{n-1}) \\ & + \left(\frac{(1-n)^2h^2}{2!}a_0 + \frac{(2-n)^2h^2}{2!}a_1 + \cdots + \frac{h^2}{2!}a_{n-2} + \frac{h^2}{2!}a_n\right) f''(x_{n-1}) \\ & + \cdots \\ & + \left(\frac{(1-n)^nh^n}{n!}a_0 + \frac{(2-n)^nh^n}{n!}a_1 + \cdots + \frac{(-1)^nh^n}{n!}a_{n-2} + \frac{h^n}{n!}a_n\right) f^{(n)}(x_{n-1}) \\ & + \frac{(1-n)^{n+1}h^{n+1}}{(n+1)!}a_0 f^{(n+1)}(c_0) + \frac{(2-n)^{n+1}h^{n+1}}{(n+1)!}a_1 f^{(n+1)}(c_1) + \cdots \\ & + \frac{(-1)^{n+1}h^{n+1}}{(n+1)!}a_{n-2} f^{(n+1)}(c_{n-2}) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}a_n f^{(n+1)}(c_n). \end{aligned} \tag{3}$$

令(3)右边的 $f'(x_{n-1})$ 的系数等于 1, $f(x_{n-1}), f''(x_{n-1}), \cdots, f^{(n)}(x_{n-1})$ 的系数于 0,可得出关于 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 的线性方程组

$$\begin{cases} a_0 + a_1 + \cdots + a_{n-1} + a_n = 0, \\ (1-n)a_0 + (2-n)a_1 + \cdots + (-1)a_{n-2} + 0a_{n-1} + a_n = \dfrac{1}{h}, \\ (1-n)^2a_0 + (2-n)^2a_1 + \cdots + (-1)^2a_{n-2} + 0a_{n-1} + a_n = 0, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ (1-n)^na_0 + (2-n)^na_1 + \cdots + (-1)^na_{n-2} + 0a_{n-1} + a_n = 0. \end{cases}$$

由此可以求出一阶导数的等间距一点超前差分公式中的系数. 通过观察可知,该公式的截断误差为

$$\begin{aligned} & \frac{(1-n)^{n+1}h^{n+1}}{(n+1)!}a_0 f^{(n+1)}(c_0) + \frac{(2-n)^{n+1}h^{n+1}}{(n+1)!}a_1 f^{(n+1)}(c_1) + \cdots \\ & + \frac{(-1)^{n+1}h^{n+1}}{(n+1)!}a_{n-2} f^{(n+1)}(c_{n-2}) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}a_n f^{(n+1)}(c_n). \end{aligned} \tag{4}$$

当 $n=1$ 时,一点超前差分公式的形式为 $f'(x_0) \approx a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1)$,此时关于 a_0, a_1 的方程组及其解为

$$\begin{cases} a_0 + a_1 = 0, \\ 0a_0 + a_1 = \dfrac{1}{h}, \end{cases} \quad \text{解得} \quad \begin{cases} a_0 = -\dfrac{1}{h}, \\ a_1 = \dfrac{1}{h}. \end{cases}$$

因此 $f'(x_0) \approx (f(x_1) - f(x_0))/h$. 由(4)可知截断误差为

$$\frac{h}{2}f^{(2)}(c_1) = O(h).$$

当 $n=2$ 时,一点超前差分公式的形式为 $f'(x_1) \approx a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1) + a_2 f(x_2)$,此时关于 a_0, a_1, a_2 的方程组及其解为

$$\begin{cases} a_0 + a_1 + a_2 = 0, \\ -a_0 + 0a_1 + a_2 = \dfrac{1}{h}, \\ a_0 + 0a_1 + a_2 = 0, \end{cases} \quad \text{解得} \quad \begin{cases} a_0 = -\dfrac{1}{2h}, \\ a_1 = 0, \\ a_2 = \dfrac{1}{2h}. \end{cases}$$

因此 $f'(x_1) \approx (f(x_2) + 0f(x_1) - f(x_0))/(2h)$，截断误差为

$$\frac{h^2}{12}f^{(3)}(c_0) + \frac{h^2}{12}f^{(3)}(c_2) = \mathrm{O}(h^2).$$

当 $n = 3$ 时，一点超前差分公式的形式为

$$f'(x_2) \approx a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1) + a_2 f(x_2) + a_3 f(x_3),$$

此时关于 a_0, a_1, a_2, a_3 的方程组及其解为

$$\begin{cases} a_0 + a_1 + a_2 + a_3 = 0, \\ -2a_0 - a_1 + 0a_2 + a_3 = \dfrac{1}{h}, \\ 4a_0 + a_1 + 0a_2 + a_3 = 0, \\ -8a_0 - a_1 + 0a_2 + a_3 = 0, \end{cases} \quad \text{解得} \quad \begin{cases} a_0 = \dfrac{1}{6h}, \\ a_1 = -\dfrac{1}{h}, \\ a_2 = \dfrac{1}{2h}, \\ a_3 = \dfrac{1}{3h}. \end{cases}$$

因此 $f'(x_2) \approx (2f(x_3) + 3f(x_2) - 6f(x_1) + f(x_0))/(6h)$，截断误差项为

$$\frac{h^3}{9}f^{(4)}(c_0) - \frac{h^3}{24}f^{(4)}(c_1) + \frac{h^3}{72}f^{(4)}(c_3) = \mathrm{O}(h^3).$$

可以看出，基于泰勒级数展开推导出来的一点超前差分公式及其截断误差，与表 1 给出的完全一致. 对于 $n > 3$ 的情况，可使用附录中给出的 Matlab 程序来验证. 另外，八至十六个数据点的等间距一点超前差分公式可参考文献[5].

这样，我们就从另一个方面证明了一点超前公式的正确性.

4 结　论

传统的有限差分公式包括前向差分、后向差分和中间差分公式. 使用这些公式可以有效地近似未知函数在目标点的近似值. 但是，对于靠近边界的目标点，单边数据点不足，无法应用多点的中间差分公式. 另外，前(后)向差分公式无法适应未知函数在目标点的导数的加速变化. 一点超前数值差分公式可以有效地解决上述问题，其准确性也已经得到了验证.

本文给出了基于泰勒级数展开的对一点超前差分公式的推导过程. 通过对采样点应用泰勒级数展开式，我们得出了关于一点超前公式中的系数的线性方程组. 最后，我们还给出了自动列出并求解该方程组的 Matlab 程序. 总而言之，本文从另一个角度，进一步证实了一点超前差分公式的有效性和正确性.

5 附　录

以下给出求一点超前公式系数及目标点的一阶导数近似值的 Matlab 程序.

```
%输入：
%  F：包含 n+1 个采样函数值的向量，即[f(0),f(1),...,f(n)]'
%  h：采样间隔常数
%输出：
%  d：第 n-1 个点的一阶导数近似值，即 f'(n-1)
%  A：包含 n+1 个系数的向量，即[a0,a1,...,an]'
function [d,A]=oneNodeAhead(F,h)
    n=size(F,1)-1;
    Y=zeros(n+1,1);
    Y(2,1)=1/h;
```

```
    B=ones(n+1,n+1);
    for j=1:(n+1)
        b=1;
        for i=2:(n+1)
            if j==n
                B(i,j)=0;
            else
                b=b*(j-n);
                B(i,j)=b;
            end
        end
    end
    A=B\Y;
    d=A'*F;
end
```

[参　考　文　献]

[1] Li Jian-ping. General explicit difference formulas for numerical differentiation[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2005, 183(1): 29-52.

[2] John H M, Kurtis D F. 数值方法(MATLAB 版)[M]. 4 版. 周璐, 陈渝, 钱方, 等译. 北京: 电子工业出版社, 2009.

[3] 李建良, 蒋勇, 汪光先. 计算机数值方法[M]. 南京: 东南大学出版社, 2000.

[4] Ishtiaq R K, Ryoji O. Taylor series based finite difference approximations of higher-degree derivatives[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2003, 154(1): 115-124.

[5] 张雨浓, 陈宇曦, 陈锦浩, 殷勇华. 一点超前数值差分公式的提出、研究与实践[J]. 中山大学学报(自然科学版), 2012, 51(2): 1-5.

[6] 张雨浓, 郭东生, 徐思洪, 李海林. 未知目标函数之一阶数值微分公式验证与实践[J]. 甘肃科学学报, 2009, 21(1): 13-18.

[7] 白晓东. Taylor 公式逼近精度的研究[J]. 大学数学, 2004, 20(4): 108-110.

Derivation of One-Node-Ahead Difference Formulas Based on Taylor Series Expansion

ZHANG Yu-nong[1], *DENG Jian-hao*[2], *LIU Jin-rong*[1], *CHOU Yao*[1], *JIN Long*[1]

(1. School of Information Science and Technology, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510006, China;

2. School of Software, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510006, China)

Abstract: Traditional numerical differentiation formulas include forward, backward and central difference formulas. One-node-ahead difference formulas are formed by moving the backward difference formulas one node ahead to calculate the first derivatives. One-node-ahead formulas can effectively remedy the deficiency of traditional formulas. Different from previous work which derives one-node-ahead formulas based on Lagrange polynomial, we propose an alternative derivation of the formulas and truncation error based on Taylor series expansion. We prove the one-node-ahead formulas from another perspective, which makes them more complete.

Key words: numerical difference formulas; Taylor series; first derivative; one node ahead; truncation error