一、插值型求导公式

定义

*依据函数$f(x)$在某些点处的函数值$f(x_k)=y_k(k=0,1,\cdots,n)$(称之为**插值条件**)，求函数$f(x)$的导数近似值的问题称为**数值微分**.*

定义

设$P_n(x)$是满足插值条件的插值多项式，$P_n(x)$可用来逼近函数$f(x)$，用$P_n(x)$的导数来逼近函数$f(x)$的导数值，即

$$f^{(m)}(x)\approx P_n^{(m)}(x).$$

*称此式为**插值型求导公式**.*

Lagrange插值型求导公式的余项

因为Lagrange插值公式$L_n(x)$的余项为:

$$R(f) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x),$$

其中$\omega_{n+1}(x) = \prod_{k=0}^{n}(x - x_k)$,$\xi \in (a, b)$且依赖于$x$, 所以

$$R'(f) = \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\frac{df^{(n+1)}(\xi)}{dx} + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'_{n+1}(x).$$

在上式中，$\frac{df^{(n+1)}(\xi)}{dx}$难作出估计. 但是，若求在插值节点$x_k$处的导数，即$x = x_k \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$, 则上式可变为

$$\begin{aligned} R'(f) &= f'(x_k) - L'_n(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'_{n+1}(x_k) \\ &= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0, j\neq k}^{n}(x_k - x_j). \qquad (6.1) \end{aligned}$$

二、两点数值微分公式

在等距节点的情况下，求函数$f(x)$在插值节点x_k处导数的近似值.

当$n=1$时，即仅有两个插值节点x_0, x_1，函数值设为$f(x_0), f(x_1)$. 由线性插值公式

$$L_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1),$$

令$h=x_1-x_0$，则有

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

根据(6.1)式，得

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &= \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h} - \frac{h}{2}f''(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_1) \\
f'(x_1) &= \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h} + \frac{h}{2}f''(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_1).
\end{aligned}
$$

称上面的两个式子为带有余项的两点数值微分公式.

当$f''(x)$在区间$[x_0, x_1]$上有界时，略去余项可得

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

则其截断误差为$O(h)$.

三、三点数值微分公式

当$n=2$时，考虑等距节点$x_k=x_0+kh(k=0,1,2)$处的函数值$f(x_k)$，h为步长. 作二次Lagrange插值多项式

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) \\ &\quad +\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2). \end{aligned}$$

上式对x求导，整理得

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

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

$$\begin{aligned} L_2'(x_1) &= \frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)] \\ L_2'(x_2) &= \frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]. \end{aligned}$$

再由(6.1)式，可得带余项的三点数值微分公式：

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &= L_2'(x_0) + \frac{h^2}{3} f'''(\xi) \\
f'(x_1) &= L_2'(x_1) - \frac{h^2}{6} f'''(\xi) \\
f'(x_2) &= L_2'(x_2) + \frac{h^2}{3} f'''(\xi),
\end{aligned}
$$

其中$\xi \in (x_0, x_2)$. 若略去余项，有

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &\approx \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)] \\
f'(x_1) &\approx \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)] \\
f'(x_2) &\approx \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)],
\end{aligned}
$$

其截断误差为$O(h^2)$.

二阶三点数值微分公式

由公式$f^{(m)}(x) \approx P^{(m)}(x)$, 则可建立高阶的数值微分公式.

由二次Lagrange插值多项式, 所以

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

于是有

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

再由余项(6.1)式可得，带余项的二阶三点数值微分公式

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2}[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_2)$$

其截断误差为$O(h^2)$.

四、利用三次样条插值函数求数值微分

用三次样条插值函数$S(x)$逼近函数$f(x)$, 不仅对函数有较好的逼近效果，而且对导函数也有较好的逼近效果.

设函数$f(x)$在插值区间$[a,b]$的各个节点

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

处的函数值为$f(x_k) = y_k (k = 0, 1, \cdots, n)$. 在给定适当的边界条件，可建立三次样条插值函数$S(x)$(见$P_{278}$).

对x两边求导数，并用$S'(x)$近似替代$f'(x)$得

$$\begin{aligned} f'(x) &\approx S'(x) \quad (\text{见} P_{278}) \\ f''(x) &\approx S''(x) \quad (\text{见} P_{278}). \end{aligned}$$

此外，并有结论: $S'(x), S''(x)$分别一致收敛于$f'(x), f''(x)$.