数值微分和积分

数值微分

前向差分公式/后向差分公式

- 基本思想：最朴素的想法

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

如果用拉格朗日一阶插值多项式给出精确解释，得到

$$f(x)=\frac{x-x_0}{h}f(x_0+h)+\frac{x-x_0-h}{-h}f(x_0)+\frac{1}{2}(x-x_0)(x-x_0-h)f''(\xi)$$

因此

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

我们预期得到 $O(h)$ 的误差。

- 前向差分公式：

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

当 $h<0$ 时称为后向差分公式。

(n+1)-point formula

- 基本想法：自然会想到用更高阶的拉格朗日插值多项式来提高精度。当我们有 $x_0,x_1,...,x_n$ 时，可以类似地得到

$$f'(x_j)=\sum_{k=0}^{n}f(x_k)L_k'(x_j)+\frac{f^{(n+1)(\xi(x_j))}}{(n+1)!}\prod_{k=0;k\neq j}^{n}(x-x_k)$$

- 当插值多项式的结束提高时，精度一般会更好，但是由于舍入误差，一般常用的有三点和五点的公式。

- 三点公式：取 $x_0=x_0,\ x_1=x_0+h,\ x_2=x_0+2h$，则

$$f'(x_0)=\frac{1}{h}(-\frac{3}{2}f(x_0)+2f(x_1)-\frac{1}{2}f(x_2))+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)$$
$$f'(x_1)=\frac{1}{h}(-\frac{1}{2}f(x_0)+\frac{1}{2}f(x_2))-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)$$
$$f'(x_2)=\frac{1}{h}(\frac{3}{2}f(x_0)-2f(x_1)+\frac{1}{2}f(x_2))+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)$$

或者将自变量都换为 x_0 得到

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}(-3f(x_0)+4f(x_0+h)-f(x_0+2h))+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)$$
$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}(-f(x_0-h)+f(x_0+h))-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)$$

前者称为三点端点公式，后者称为三点中点公式。

二阶导数中点公式

- 基本思想：用泰勒多项式展开计算二阶导数。
- 基本过程：由泰勒展开公式：

$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+\frac{1}{2}f''(x_0)h^2+\frac{1}{6}f'''(x_0)h^3+\frac{1}{24}f''''(\xi_1)h^4$$
$$f(x_0-h)=f(x_0)-f'(x_0)h+\frac{1}{2}f''(x_0)h^2-\frac{1}{6}f'''(x_0)h^3+\frac{1}{24}f''''(\xi_{-1})h^4$$

两式相加得到

$$f''(x_0)=\frac{1}{h^2}(f(x_0-h)-2f(x_0)+f(x_0+h))-\frac{h^2}{24}(f^{(4)}(\xi_1)+f^{(4)}(\xi_{-1}))$$

外推法

- 只要误差项有形式

$$k_1h+k_2h^2+k_3h^3+\cdots$$

其中 k_i 与 h 无关，都可以考虑用外推法来提高精度。当用泰勒公式进行估计时，刚好得到与步长无关的系数。

数值积分

- 基本思想：用插值多项式近似表示原函数后，对插值多项式进行积分。如果用拉格朗日多项式，则积分式可以表达成：

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b\sum_{i=0}^n f(x_i)L_i(x)dx+\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}dx=$$
$$\sum_{i=0}^n a_if(x_i)+\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b\prod_{i=0}^n(x-x_i)f^{(n+1)}(\xi(x))dx$$

梯形公式

- 基本思想：取点 $x_0=a,\ x_1=b$，构造拉格朗日插值多项式：

$$P_1(x)=\frac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)}f(x_1)+\frac{1}{2}f''(\xi)(x-x_0)(x-x_1)$$

于是积分结果为

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{(x_1-x_0)}{2}[f(x_0)+f(x_1)]-\frac{h^3}{12}f''(\xi)$$

Simpson 公式

- 基本思想：取点 $x_0=a,\ x_1=a+h,\ x_2=b$ 其中 $h=(b-a)/2$，构造拉格朗日插值多项式，

$$P_2=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_0)}f(x_2)$$
$$+\frac{1}{6}f'''(\xi)(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$$

但这时我们只能得到 $O(h^4)$ 的误差界限，如果采用泰勒公式，可以得到 $O(h^5)$ 的误差限。事实上，在 x_1 处将函数 $f(x)$ 展开

$$f(x)=f(x_1)+f'(x_1)(x-x_1)+\frac{f''(x_1)}{2}(x-x_1)^2+\frac{f'''(x_1)}{6}(x-x_1)^3+\frac{f^{(4)}(\xi(x))}{24}(x-x_1)^4$$

此时积分得

$$\int_{x_0}^{x_2}f(x)dx=2hf(x_1)+\frac{h^3}{3}f''(x_1)+\frac{f^{(4)}(\xi_1)}{60}h^5$$

如果带入二阶导数中点公式

$$f''(x)=\frac{1}{h^2}(f(x-h)-2f(x)+f(x+h))$$

则有

$$\int_{x_0}^{x_2}f(x)dx=\frac{h}{3}(f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2))-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)$$

准确度

- 定义：积分表达式能精确求积的多项式的最大阶数。精确度为 n 意味着该积分表达式对于 0 到 n 阶的多项式都可以精确求积，但是对 n+1 阶的多项式会产生误差。

- 例如梯形公式的精确度是 1 ，Simpson 公式的精确度是 3 。

Closed Newton-Cotes Formula

- 定义：将区间端点作为插值点的公式。例如梯形公式和 Simpson 公式都属于这一类。

- 误差分析：对于 n+1 个插值点 $x_0=a,\ x_n=b,\ h=(b-a)/n$ 如果 n 是偶数，则

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=0}^n a_i f(x_i)+\frac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)dt$$

  如果 n 是奇数，则

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=0}^n a_i f(x_i)+\frac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_0^n t^(t-1)\cdots(t-n)dt$$

  因此如果 n 是偶数，则准确度是 n+1 ，如果 n 是奇数，那么准确度是 n。

- 例子：
  - n=1：（梯形公式）

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx=\frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_1)]-\frac{h^3}{12}f''(\xi)$$

  - n=2：（Simpson 公式）

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx=\frac{h}{3}(f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2))-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)$$

Open Newton-Cotes Formula

- 定义：不将区间端点作为插值点的公式。

- 误差分析：对于 n+1 个插值点 $x_{-1}=a,\ x_{n+1}=b,\ h=(b-a)/n+2$ 如果 n 是偶数，则

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=0}^n a_i f(x_i)+\frac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)dt$$

  如果 n 是奇数，则

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=0}^n a_i f(x_i)+\frac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_0^n t^(t-1)\cdots(t-n)dt$$

  因此如果 n 是偶数，则准确度是 n+1 ，如果 n 是奇数，那么准确度是 n。

- 例子：
  - n=0：

$$\int_{x_{-1}}^{x_1} f(x)dx=2hf(x_0)+\frac{h^2}{3}f''(\xi)$$

  - n=1：

$$\int_{x_{-1}}^{x_2} f(x)dx=\frac{3h}{2}(f(x_0)+f(x_1))+\frac{3h^3}{4}f''(\xi)$$

  - n=2：

$$\int_{x_{-1}}^{x_3} f(x)dx=\frac{4h}{3}(2f(x_0)-f(x_1)+2f(x_2))+\frac{14h^5}{45}f^{(4)}(\xi)$$

组合 Simpson 公式

- 基本思想：考虑将整个区间分为几个小区间，在每个区间上分别求得积分后再求和。这样可以将原来不变的步长 $h=(b-a)/2$ 缩小为 $h=(b-a)/n$ ，其中 n 是分成的小区间数，为偶数（为了满足在每两个相邻的区间上运用 Simpson 公式的要求）。步长的减小能使误差显著减小。

- 基本过程：令 $h=(b-a)/n,\ \ x_j=a+jh,\ j=0,1,\ldots,n$ 则

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= \sum_{j=1}^{n/2}\int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} f(x)dx \\
&= \sum_{j=1}^{n/2}(\frac{h}{3}(f(x_{2j-2})+4f(x_{2j-1})+f(x_{2j})-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi_j))) \\
&= \frac{h}{3}(f(x_0)+2\sum_{j=1}^{(n/2)-1}f(x_{2j})+4\sum_{j=1}^{n/2}f(x_{2j-1})+f(x_n))-\frac{h^5}{90}\frac{n}{2}f^{(4)}(\mu) \\
&= \frac{h}{3}(f(a)+2\sum_{j=1}^{(n/2)-1}f(x_{2j})+4\sum_{j=1}^{n/2}f(x_{2j-1})+f(b))-\frac{(b-a)}{180}h^4f^{(4)}(\mu)
\end{aligned}
$$

组合梯形公式

- 设 $n=(b-a)/n,\ \ x_j=a+jh,\ j=0,1,\ldots,n$ ，则有

$$
\int_a^b f(x)dx=\frac{h}{2}(f(a)+2\sum_{j=1}^{n-1}f(x_j)+f(b))-\frac{b-a}{12}h^2f''(\mu)
$$

组合中点公式

- 设 $h=(b-a)/(n+2),\ \ x_j=a+(j+1)h,\ j=-1,0,\ldots,n+1$ ，则有

$$
\int_a^b f(x)dx=2h\sum_{j=0}^{n/2}f(x_{2j})+\frac{b-a}{6}h^2f''(\mu)
$$

Romberg 积分公式

- 基本思想：对于组合梯形公式，可以证明其误差项具有形式

$$
k_1h^2+k_2h^4+\cdots
$$

  因此可以考虑使用外推法来提高精度。

- 基本过程：组合梯形公式

$$
\int_a^b f(x)dx=\frac{h}{2}(f(a)+2\sum_{j=1}^{n-1}f(x_j)+f(b))
$$

  首先计算不用外推法时在 n 取不同值时的结果，记为 $R_{k,1}$ 。在这步中可以利用公式形式上的重复性减少函数值的计算，具体表示为

$$
R_{k,1}=\frac{1}{2}(Rk-1,1+h_{k-1}\sum_{i=1}^{2^{k-2}}f(a+(2i-1)h_k))
$$

  然后利用标准的外推法：

$$
R_{k,2}=R_{k,1}+\frac{1}{3}(R_{k,1}-R_{k-1,1}),\ k=2,3,\ldots
$$

$$
R_{k,3}=R_{k,2}+\frac{1}{15}(R_{k,2}-R_{k-1,2}),\ k=3,4,\ldots
$$

$$
R_{k,j}=R_{k,j-1}+\frac{1}{4^{j-1}-1}(R_{k,j-1}-R_{k-1,j-1}),\ k=j,j+1,\ldots
$$

  当对角线上最后两个值的差值在允许范围内时即可结束。

Adaptive quadrature method

- 基本思想：在组合积分公式中，积分精度容易受到等区间长度取点的影响。考虑在不同区间上使用不同的步长来消除这种弊端。

- 基本过程：以组合 Simpson 公式为例，设积分区间为 $[a, b]$ 。如果采用 $n = 2$ 情形下的 Simpson 公式，则结果为

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}(f(a) + 4f(a+h) + f(b)) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)$$

其中 $h = (b-a)/2$ 。将该公式简记为

$$\int_a^b f(x)dx = S(a,b) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)$$

再采用 $n = 4$ 情况下的 Simpson 公式，h 仍然定义为 $h = (b-a)/2$:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx = &\frac{h}{6}(f(a) + 4f(a+h/2) + f(a+h)) \\ &+\frac{h}{6}(f(a+h) + 4f(a+3h/2) + f(b)) \\ &-(\frac{h}{2})^4\frac{(b-a)}{180}f^{(4)}(\tilde{\xi})\end{aligned}$$

该公式简记成：

$$\int_a^b f(x)dx = S(a,(a+b)/2) + S((a+b)/2,b) - \frac{1}{16}(\frac{h^5}{90})f^{(4)}(\tilde{\xi})$$

如果忽略 ξ 和 $\tilde{\xi}$ 之间的差别，那么

$$S(a,b) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi) \approx S(a,(a+b)/2) + S((a+b)/2,b) - \frac{1}{16}(\frac{h^5}{90})f^{(4)}(\xi)$$

从中解出 $f^{(4)}(\xi)$ 后重新带入 $n = 4$ 时的公式得

$$\begin{aligned}|\int_a^b f(x)dx - S(a,\frac{a+b}{2}) - S(\frac{a+b}{2},b)| &\approx \frac{1}{16}(\frac{h^5}{90})f^{(4)}(\xi) \\ &\approx \frac{1}{15}|S(a,b) - S(a,\frac{a+b}{2}) - S(\frac{a+b}{2},b)|\end{aligned}$$

因此如果有右端小于 15ϵ 则有左端小于 ϵ 。由此来估计误差。如果在误差允许范围内，则估计成功。否则分别在左右两半继续细分求误差，看是否能小于 $\epsilon/2$ ，由此不断递归，直到精度达到要求。

Gaussian Quadrature

- 基本思想：在 Closed Newton-Cotes formula 中，我们利用 n 阶拉格朗日插值多项式得到的积分表达式的误差项含有 $n+1$ 阶导数，因此准确度最多是 n 。试图调整选点的策略，让积分表达式达到最优的准确度。
事实上，如果考虑构建 n 阶的拉格朗日插值多项式，我们得到的表达式为

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n c_i f(x_i)$$

其中一共有 $2n$ 个变元。于是我们预期这个表达式最多能达到 $2n-1$ 的准确度。

- 解线性方程组法：如果想让表达式对所有的小于 $2n-1$ 阶的多项式都能准确求值，只需要令 $f(x) = 1$, $f(x) = x$, $f(x) = x^2, \ldots, f(x) = x^{2n-1}$ 分别带入等式，得到 2n 个方程，求出 2n 个变元即可。

- Legendre 多项式法：当 x_i, $i = 1, 2, \cdots, n$ 取 n 阶legendre多项式的根，系数取

$$c_i = \int_{-1}^1 \prod_{j=1,\ j\neq i}^n \frac{x-x_j}{x_i-x_j}dx$$

时，积分表达式

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \sum_{i=1}^n c_i f(x_i)$$

在 $[-1,1]$ 上具有 $2n-1$ 阶的准确度。当积分区间不是 $[-1,1]$ 时，只需要作线性平移即可。