Numerical Computing Methods
数值计算方法

李晓鹏
Li Xiao-Peng

电子与信息工程学院
School of Electronic and Information Engineering

Semester–I 25/26

数值积分与微分

数值积分与微分

由积分学基本定理知 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = F(b) - F(a)$

但应用中常碰到如下情况：

- $f(x)$的原函数无法用初等函数给出
- 虽然$f(x)$的原函数能用初等函数表示,但表达式过于复杂
- $f(x)$没有表达式，仅仅是一张函数表

这时积分与求导都必须使用数值的方法。

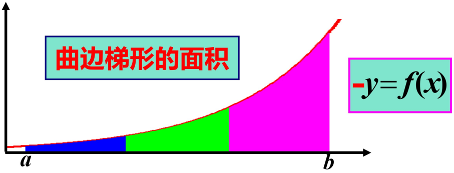


图 1: 求定积分的几何意义

引论

Newton-Cotes公式

插值型求积公式及Cotes系数

问题描述: 设 $f(x)$ 是区间 $[a,b]$ 上的连续函数, 求定积分

$$I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

的近似值。

思想：用被积函数 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的插值多项式近似代替计算。

Lagrange 插值多项式?

Newton-Cotes公式

将 $[a,b]$ 进行 n 等分, 令 $h=(b-a)/n$, 称之为步长。取分点

$$x_k = a + kh, \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$$

为节点, 则 $f(x)$ 可表示为其 Lagrange 插值多项式及其余项之和:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f\left(x_k\right) l_k(x) + R_n(x) = L(x) + R_n(x)$$

因此

$$\begin{aligned}
I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \sum_{k=0}^{n}\left(\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x\right) f\left(x_k\right) + \int_a^b R_n(x)\mathrm{d}x \\
&= \sum_{k=0}^{n} A_k f\left(x_k\right) + \int_a^b R_n(x)\mathrm{d}x \\
&= I_n + R\left(I_n\right)
\end{aligned}$$

Newton-Cotes公式

A_k 称为求积系数:

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \left(\prod_{j=0, j\neq k}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \right) \mathrm{d}x$$

$R\left(I_n\right)$ 称为余项

$$R\left(I_n\right) = \int_a^b R_n(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}\left(\xi_x\right) \prod_{k=0}^{n} \left(x - x_k\right) \mathrm{d}x$$

设 $x = a + t \cdot h$, 因 $x \in [a,b]$, 故 $t \in [0,n]$ 。因此

$$\begin{aligned} x - x_j &= (t-j)h && (j = 0,1,\cdots,n) \\ x_k - x_j &= (k-j)h && (j,k = 0,1,\cdots,n, j \neq k) \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} A_k &= h \prod_{j=0,j\neq k}^{n} \frac{1}{k-j} \int_0^n \prod_{j=0,j\neq k}^{n} (t-j)\mathrm{d}t \\ &= \frac{h(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{j=0,j\neq k}^{n} (t-j)\mathrm{d}t \\ &= (b-a)\frac{(-1)^{n-k}}{n*k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{j=0,j\neq k}^{n} (t-j)\mathrm{d}t \end{aligned}$$

令

$$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{n*k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{j=0,j\neq k}^{n} (t-j)dt, \quad (k = 0,1,\cdots,n)$$

因此 $\quad A_k = (b-a)C_k^{(n)}$

Newton-Cotes公式

两种特殊情况

当 $n = 1$ 时,

$$C_0^{(1)} = -\int_0^1 (t-1)\mathrm{d}t = \frac{1}{2}$$

$$C_1^{(1)} = \int_0^1 t\mathrm{d}t = \frac{1}{2}$$

当 $n = 2$ 时,

$$C_0^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^2 (t-1)(t-2)\mathrm{d}t = \frac{1}{6}$$

$$C_1^{(2)} = -\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)\mathrm{d}t = \frac{4}{6}$$

$$C_2^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)\mathrm{d}t = \frac{1}{6}$$

其他特殊取值见P129表1-1。

Newton-Cotes公式

n	$C_k^{(n)}$								
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$						
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$					
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$				
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$		
7	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

Newton-Cotes公式

Newton-Cotes 插值型求积公式

$$I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f\left(x_k\right)$$

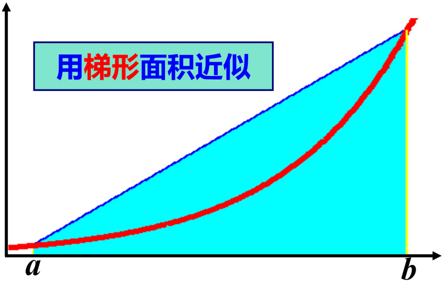
其中，$C_k^{(n)}$ 称为 Cotes 系数, 其中， n 表示对求积区间 $[a, b]$ 的等分数， k 为节点下标。

梯形公式

当 $n = 1$:

$$I_1 = \sum_{k=0}^{1} A_k f(x_k) = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

$$T = I_1 = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$$

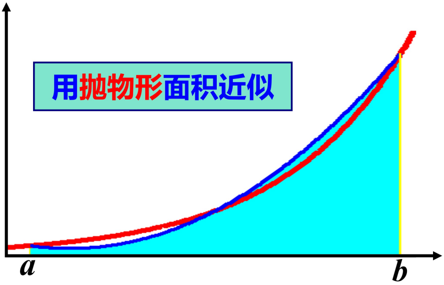


Simpson公式

当 $n=2$

$$I_2=\sum_{k=0}^{2}A_kf\left(x_k\right)=A_0f\left(x_0\right)+A_1f\left(x_1\right)+A_2f\left(x_2\right)$$

$$S=I_2=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$



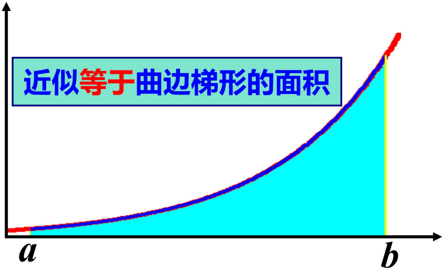
Cotes公式

Newton-Cotes求积公式

当 $n = 4$

$$I_4 = \sum_{k=0}^{4} A_k f(x_k) = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + A_3 f(x_3) + A_4 f(x_4)$$

$$C = I_4 = \frac{b-a}{90}\left[7f(a) + 32f(a+h) + 12f(a+2h) + 32f(a+3h) + 7f(b)\right]$$



Newton-Cotes公式

定理： 对于 Newton–Cotes 求积公式

$$I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k)$$

当 n 为奇数时至少具有 n 次代数精度；当 n 为偶数时至少具有 $n+1$ 次代数精度。

例题

例：分别用梯形公式、Simpson 公式和 Cotes 公式计算 $\int_0^1 \frac{1}{1+x}\mathrm{d}x$ 的近似值。

例题

例：分别用梯形公式、Simpson 公式和 Cotes 公式计算 $\int_0^1 \frac{1}{1+x}\mathrm{d}x$ 的近似值。

$$T(f) = \frac{1-0}{2}[f(0)+f(1)] = \frac{1}{2}[1+0.5] = 0.75$$

例题

例：分别用梯形公式、Simpson 公式和 Cotes 公式计算 $\int_0^1 \frac{1}{1+x}\mathrm{d}x$ 的近似值。

$$T(f) = \frac{1-0}{2}[f(0)+f(1)] = \frac{1}{2}[1+0.5] = 0.75$$
$$S(f) = \frac{1-0}{6}[f(0)+4f(\frac{1}{2})+f(1)] \approx 0.69444444$$
$$C(f) = \frac{1-0}{90}[7f(0)+32f(\frac{1}{4})+12f(\frac{1}{2})+32f(\frac{3}{4})+7f(1)] \approx 0.69317460$$

余项及稳定性

Newton-Cotes公式的余项　（推导略）P124-126

1. 梯形公式的余项:

$$R(T) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \quad \eta \in (a,b)$$

2. Simpson 公式的余项:

$$R(S) = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b)$$

3. Cotes 公式的余项

$$R(C) = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta), \quad \eta \in (a,b)$$

Newton-Cotes公式的稳定性

结论：

1. 若 $C_k^{(n)}$ 全为正时，Newton-Cotes 是稳定的；
2. 若 $C_k^{(n)}$ 有正有负时，Newton-Cotes 是不稳定的。

因此

1. 当 Newton–Cotes 公式中 $n \geq 8$ 时不能使用
2. 当 Newton–Cotes 公式中 $n \leq 7$ 时不能满足高精度要求。

根据稳定性理论分析，实际计算中一般不使用高阶 Newton-Cotes 公式。

问题： 如何提高精度？

引论

1. Newton-Cotes公式
2. **复合求积法**
3. 数值微分

复合求积法

当 $n \leq 7$ 时 Newton–Cotes 系数均为正, 但从 $n = 8$ 开始 Newton–Cotes 系数有正有负，这会使计算误差得不到控制、稳定性得不到保证。

因此实际计算时一般不采用 n 较大的 Newton–Cotes 公式。

而是将区间 $[a, b]$ 等分为 n 个小区间其长度为 $h = (b - a)/n$ 在每个小区间上应用低阶的公式，然后对所有小区间上的计算结果求和，

这样得出的求积公式称为复化求积公式

复合梯形公式

将积分区间 $[a,b]$ 等份成 n 个子区间: $[x_k,x_{k+1}],(k=0,1,\cdots;n-1)$ 各区间长度为 $h=(b-a)/n$。
在每个子区间 $[x_k,x_{k+1}],(k=0,1,\cdots,n-1)$ 上利用梯形公式, 得

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{2}\left(f\left(x_k\right)+f\left(x_{k+1}\right)\right)$$

因此

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x \\
&\approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}\left[f\left(x_k\right)+f\left(x_{k+1}\right)\right] \\
&= \frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1} f\left(x_k\right)+f(b)\right] \\
&= \frac{b-a}{2n}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1} f\left(x_k\right)+f(b)\right]
\end{aligned}$$

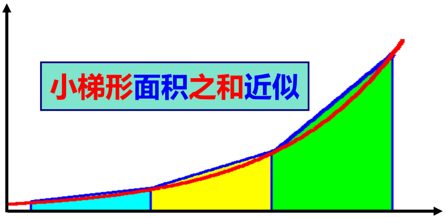
复合梯形公式

将

$$T_n = \frac{b-a}{2n}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f\left(x_k\right) + f(b)\right]$$

称为复合梯形公式。

其几何意义：



复合Simpson公式

在每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$, $(k = 0, 1, \cdots, n-1)$ 上利用 Simpson 公式得

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{6}\left[f(x_k) + 4f\left(x_k + \frac{h}{2}\right) + f(x_{k+1})\right]$$

因此

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x \\
&\approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}\left[f(x_k) + 4f\left(x_k + \frac{h}{2}\right) + f(x_{k+1})\right] \\
&= \frac{h}{6}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \\
&= \frac{b-a}{6n}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right]
\end{aligned}$$

复合Simpson公式

在每个子区间 $[x_k, x_{k+1}], (k = 0, 1, \cdots, n-1)$ 上利用 Simpson 公式得

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{6}\left[f(x_k) + 4f\left(\frac{x_{k+1}+x_k}{2}\right) + f(x_{k+1})\right]$$

因此

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x \\
&\approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}\left[f(x_k) + 4f\left(\frac{x_{k+1}+x_k}{2}\right) + f(x_{k+1})\right] \\
&= \frac{h}{6}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(\frac{x_{k+1}+x_k}{2}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \\
&= \frac{b-a}{6n}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(\frac{x_{k+1}+x_k}{2}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right]
\end{aligned}$$

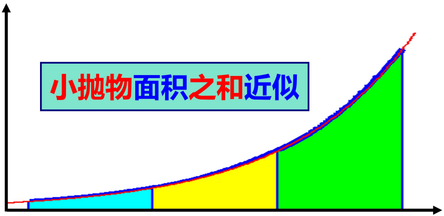
复合Simpson公式

将

$$S_n = \frac{b-a}{6n}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right]$$

其中，$f(x_{k+1/2}) = f(x_k + \frac{h}{2})$，称为复合 Simpson 公式。

其几何意义：



复合Cotes公式

在每个子区间 $[x_k, x_{k+1}], (k = 0, 1, \cdots, n-1)$ 上利用 Cotes 公式, 同理可得称为复合 Cotes 公式。

$$C_n = \frac{b-a}{90n}\left[7f(a) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/4}) + 12\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2})\right.$$
$$\left. +32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+3/4}) + 14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 7f(b)\right]$$

例题

例：依次用 $n = 8$ 的复合梯形公式、 $n = 4$ 的复合 Simpson 公式及 $n = 2$ 的 Cotes 公式计算定积分

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \mathrm{d}x$$

例题

例：依次用 $n=8$ 的复合梯形公式、 $n=4$ 的复合 Simpson 公式及 $n=2$ 的 Cotes 公式计算定积分

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \mathrm{d}x$$

解：当 $n=8$ 时, $h=1/8=0.125$, 所需各节点的数值见下表:

k	x_k	$f(x_k)$	k	x_k	$f(x_k)$
0	0	1.0000000	5	0.625	0.9361556
1	0.125	0.9973978	6	0.75	0.9088516
2	0.25	0.9896158	7	0.875	0.8771925
3	0.375	0.9767267	8	1	0.8414709
4	0.5	0.9588510			

复合求积法

由复合求积公式, 得

$$T_8 = \frac{1}{16}\left[f(0) + 2\sum_{k=1}^{7} f(x_k) + f(1)\right] = 0.9556909$$

$$\begin{aligned} S_4 &= \frac{1}{24}[f(0) + 4[f(0.125) + f(0.375) + f(0.625) + f(0.875)] \\ &\quad + 2[f(0.25) + f(0.5) + f(0.75)] + f(1)] \\ &= 0.9460833 \\ C_2 &= \frac{1}{180}[7[f(0) + f(1)] + 14f(0.5) + 32[f(0.125) + f(0.375) \\ &\quad + f(0.625) + f(0.875)] + 12[f(025) + f(0.75)]] \\ &= 0.9460832 \end{aligned}$$

精确值为 $I = 0.9460831$
可见, 复合梯形公式精度较低, 复合Simpson公式精度和复杂度都令人满意, 使用更普遍。

例题

例：依次用 $n = 8$ 的复合梯形公式计算定积分

$$\int_0^1 \mathrm{e}^x \mathrm{d}x$$

例题

例：依次用 $n=8$ 的复合梯形公式计算定积分

$$\int_0^1 \mathrm{e}^x \mathrm{d}x$$

解：当 $n=8$ 时，$h=1/8=0.125$，所需各节点的数值见下表:

k	x_k	$f(x_k)$	k	x_k	$f(x_k)$
0	0	1.0000000	5	0.625	1.8682
1	0.125	1.1331	6	0.75	2.1170
2	0.25	1.2840	7	0.875	2.39895
3	0.375	1.4550	8	1	2.7183
4	0.5	1.6487			

$$T_8=\frac{1}{16}\left[f(0)+2\sum_{k=1}^{7} f(x_k)+f(1)\right]=1.7205$$

步长的自动选取

复化求积公式是提高精度的一种有效方法，但在使用复化求积公式之前必须根据复化求积公式的余项进行先验估计，以确定节点数目，从而确定合适的等分步长。

因为余项表达式中包含了被积函数的导数而估计各阶导数的最大值往往是很困难的，且估计的误差上界往往偏大。

所以实际中常常使用 事后估计误差 的方法，通过区间的逐次分半在步长逐次分半的过程中，反复利用复化求积公式进行计算，查看相继两次计算结果的差值是否达到要求，直到所求得的积分值满足精度要求。

基本思想：将积分区间逐次分半

复合梯形公式

1、首先将区间 $[a, b]$ n 等分： $h=\frac{b-a}{n}$

$$T_n=\frac{h}{2}\left[f(a)+2 \sum_{k=1}^{n-1} f\left(x_k\right)+f(b)\right]$$

2、再将区间 $[a, b]$ $2n$ 等分： $h_2=\frac{b-a}{2n}$

$$\begin{aligned}
T_{2n} & =\frac{h_2}{2}\left[f(a)+2 \sum_{k=1}^{n-1} f\left(x_k\right)+2 \sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+1/2}\right)+f(b)\right] \\
& =\frac{1}{2} T_n+\frac{b-a}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+1/2}\right)
\end{aligned}$$

3、终止条件：由复化梯形公式的余项知

$$I-T_n=-\frac{1}{12}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 f''(\eta_1), \quad \eta_1 \in(a, b)$$

$$I-T_{2n}=-\frac{1}{12}\left(\frac{b-a}{2n}\right)^2 f''(\eta_2), \quad \eta_2 \in(a, b)$$

复合梯形公式

由此得到近似关系式

$$I - T_{2n} \approx \frac{1}{4-1}\left(T_{2n} - T_n\right)$$

若把 T_{2n} 作为积分值 I 的近似值，其截断误差为

$$\left|\frac{1}{4-1}\left(T_{2n} - T_n\right)\right|$$

所以，误差控制条件

$$\left|\frac{1}{4-1}\left(T_{2n} - T_n\right)\right| \leq \epsilon$$

上述条件满足，程序终止；否则，继续分半计算。

复合求积法

对于复合 Simpson 公式可以类似得到

$$I - S_{2n} \approx \frac{1}{4^2 - 1} (S_{2n} - S_n)$$

误差控制条件

$$\left| \frac{1}{4^2 - 1} (S_{2n} - S_n) \right| \leq \epsilon$$

对于复合 Cotes 公式可以类似得到

$$I - C_{2n} \approx \frac{1}{4^3 - 1} (C_{2n} - C_n)$$

误差控制条件

$$\left| \frac{1}{4^3 - 1} (C_{2n} - C_n) \right| \leq \epsilon$$

例题

例: 用变步长的复合 Simpson 公式计算定积分

$$\int_0^1 e^x \mathrm{d}x$$

给定误差限 $\varepsilon = 0.5 \times 10^{-4}$。

例题

例: 用变步长的复合 Simpson 公式计算定积分

$$\int_0^1 e^x \mathrm{d}x$$

给定误差限 $\varepsilon = 0.5 \times 10^{-4}$。

解: 取 $h = b - a = 1$, 则

$$S_1 = \frac{1}{6}(f(0) + 4f(0.5) + f(1)) = 1.7188$$

将步长折半, $h = 0.5$, 则

$$\begin{aligned} S_2 &= \frac{1}{12}(f(0) + 4f(0.25) + 4f(0.75) + 2f(0.5) + f(1)) \\ &= 1.7183 \end{aligned}$$

由于 $\Delta = \left|S_2 - S_1\right|/15 = 3.333 \times 10^{-5} < \varepsilon$, 故 $I \approx S_2 = 0.9460833$

例题

例: 用变步长的复合 Simpson 公式计算定积分

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \mathrm{d}x$$

给定误差限 $\varepsilon = 0.5 \times 10^{-6}$。

例题

例: 用变步长的复合 Simpson 公式计算定积分

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \mathrm{d}x$$

给定误差限 $\varepsilon = 0.5 \times 10^{-6}$。

解: 取 $h = b - a = 1$, 则

$$S_1 = \frac{1}{6}(f(0) + 4f(0.5) + f(1)) = 0.9461459$$

将步长折半, $h = 0.5$, 则

$$\begin{aligned} S_2 &= \frac{1}{12}(f(0) + 4f(0.25) + 4f(0.75) + 2f(0.5) + f(1)) \\ &= 0.94608688 \end{aligned}$$

由于 $\Delta = |S_2 - S_1|/15 = 0.39 \times 10^{-4} > \varepsilon$, 故步长折半, $h = 0.25$,

$$S_4 = 0.9460833$$

由于 $\Delta = |S_4 - S_2|/15 = 2.4 \times 10^{-7} < \varepsilon$, 故 $I \approx S_4 = 0.9460833$

引论

1. Newton-Cotes公式
2. 复合求积法
3. **数值微分**

Taylor展开法

以离散数据 $(x_k, f(x_k))\,(k = 0, 1, 2, \ldots..n)$ 近似表达在节点 $(x, y = f(x))$ 处的微分，通常称这类问题为数值微分。

根据 Taylor 展开式可得

$$f(x_k + h) = f(x_k) + f'(x_k)\,h + \frac{h^2}{2!} f''(\xi_1) \quad \xi_1 \in (x_k, x_k + h)$$
$$f(x_k - h) = f(x_k) - f'(x_k)\,h + \frac{h^2}{2!} f''(\xi_2) \quad \xi_2 \in (x_k - h, x_k)$$

则有

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k + h) - f(x_k)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi_1) \quad \xi_1 \in (x_k, x_k + h)$$
$$f'(x_k) = \frac{f(x_k) - f(x_k - h)}{h} + \frac{h}{2} f''(\xi_2) \quad \xi_2 \in (x_k - h, x_k)$$

Taylor展开法

类似地，由

$$f(x_k + h) = f(x_k) + f'(x_k)h + \frac{h^2}{2!}f''(x_k) + \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1) \quad \xi_1 \in (x_k, x_k + h)$$

$$f(x_k - h) = f(x_k) - f'(x_k)h + \frac{h^2}{2!}f''(x_k) - \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_2) \quad \xi_2 \in (x_k - h, x_k)$$

可得下面的中点公式：

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k + h) - f(x_k - h)}{2h} - \frac{h^2}{6}f'''(\xi_3) \quad \xi_3 \in (x_k - h, x_k + h)$$

展开到三阶可得：

$$f''(x_k) = \frac{f(x_k + h) - 2f(x_k) + f(x_k - h)}{h^2} - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_4)$$

$$\xi_4 \in (x_k - h, x_k + h)$$

插值型求导公式

问题: 不管 $f(x)$ 的表达式是否给定, 已知 $f(x)$ 在 $n+1$ 个互异的节点

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

上的函数值 $\{f_k\}_{k=0}^{n}$, 若 $f(x)$ 导数存在, 那么如何采用数值方法去求 $f\left(x_k\right)$ 导数?

插值型求导公式

问题: 不管 $f(x)$ 的表达式是否给定, 已知 $f(x)$ 在 $n+1$ 个互异的节点

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

上的函数值 $\{f_k\}_{k=0}^{n}$, 若 $f(x)$ 导数存在, 那么如何采用数值方法去求 $f\left(x_k\right)$ 导数?

假设 $f^{(n+1)}(x)$ 存在, 则

$$f(x) = L_n(x) + \frac{f^{(n+1)}\left(\xi_x\right)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n}\left(x - x_j\right), \quad \xi_x \in [a, b]$$

$$f'(x) = L_n'(x) + \frac{f^{(n+1)}\left(\xi_x\right)}{(n+1)!}\left(\prod_{j=0}^{n}\left(x - x_j\right)\right)' + \frac{\left(f^{(n+1)}\left(\xi_x\right)\right)'}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n}\left(x - x_j\right)$$

数值微分

当 $x = x_k, (k = 0, 1, \cdots, n)$ 时, 有

$$f'(x_k) = L_n'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\left(\prod_{j=0, j\neq k}^{n}(x_k - x_j)\right), (k = 0, 1, \cdots, n)$$

因此, 利用 $L_n'(x_k)$ 近似代替 $f'(x_k)$:

$$f'(x_k) \approx L_n'(x_k)$$

所产生的误差为

$$E_n(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\left(\prod_{j=0, j\neq k}^{n}(x_k - x_j)\right), (k = 0, 1, \cdots, n)$$

数值微分

实际应用时多采用 $n=1,2,4$ 的二点、三点和五点插值求导公式

1. 两点公式: 当 $n=1$ 时,

$$\begin{aligned} L_1(x) &= \frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1 \\ L_1'(x) &= \frac{1}{x_0-x_1}y_0+\frac{1}{x_1-x_0}y_1 \end{aligned}$$

令 $h=x_1-x_0$, 得如下两点公式:

$$\begin{cases} f'\left(x_0\right)=\dfrac{1}{h}\left(y_1-y_0\right)-\dfrac{h}{2}f^{(2)}(\xi) \\ f'\left(x_1\right)=\dfrac{1}{h}\left(y_1-y_0\right)+\dfrac{h}{2}f^{(2)}(\xi) \end{cases}$$

称之为带余项的两点数值微分公式。

为了计算方便和估计误差，节点通常取等距节点。

数值微分

实际应用时多采用 $n=1,2,4$ 的二点、三点和五点插值求导公式

1. 两点公式: 当 $n=1$ 时,

$$\begin{cases} f'(x_0) \approx \dfrac{1}{h}(y_1 - y_0) \\ f'(x_1) \approx \dfrac{1}{h}(y_1 - y_0) \end{cases}$$

数值微分

2. 三点公式: 当 $n=2$ 时,

$$L_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}y_1+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}y_2$$

为了方便求导，令 $x=x_0+th$

$$L_2(x_0+th)=\frac{1}{2}(t-1)(t-2)y_0-t(t-2)y_1+\frac{1}{2}t(t-1)y_2$$

$$L_2'(x_0+th)=\frac{1}{2h}[(2t-3)y_0-(4t-4)y_1+(2t-1)y_2] \quad (\textbf{重点})$$

所以

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

称之为带余项的三点数值微分公式。

数值微分

2. 三点公式:

$$\begin{cases} f'(x_0) \approx \dfrac{1}{2h}(-3y_0 + 4y_1 - y_2) \\ f'(x_1) \approx \dfrac{1}{2h}(-y_0 + y_2) \quad (\text{中点公式}) \\ f'(x_2) \approx \dfrac{1}{2h}(y_0 - 4y_1 + 3y_2) \end{cases}$$

数值微分

3. 五点公式: 当 $n=4$ 时,

$$
\begin{cases}
f'(x_0) = \dfrac{1}{12h}(-25y_0 + 48y_1 - 36y_2 + 16y_3 - 3y_4) + \dfrac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi) \\
f'(x_1) = \dfrac{1}{12h}(-3y_0 - 10y_1 + 18y_2 - 6y_3 + y_4) - \dfrac{h^4}{20} f^{(5)}(\xi) \\
f'(x_2) = \dfrac{1}{12h}(y_0 - 8y_1 + 8y_3 - y_4) - \dfrac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi) \\
f'(x_3) = \dfrac{1}{12h}(-y_0 + 6y_1 - 18y_2 + 10y_3 + 3y_4) - \dfrac{h^4}{20} f^{(5)}(\xi) \\
f'(x_4) = \dfrac{1}{12h}(3y_0 - 16y_1 + 36y_2 - 48y_3 + 25y_4) + \dfrac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi)
\end{cases}
$$

称之为带余项的五点数值微分公式。

3. 五点公式: 当 $n = 4$ 时,

$$\begin{cases} f'(x_0) \approx \dfrac{1}{12h}\left(-25y_0 + 48y_1 - 36y_2 + 16y_3 - 3y_4\right) \\ f'(x_1) \approx \dfrac{1}{12h}\left(-3y_0 - 10y_1 + 18y_2 - 6y_3 + y_4\right) \\ f'(x_2) \approx \dfrac{1}{12h}\left(y_0 - 8y_1 + 8y_3 - y_4\right) \\ f'(x_3) \approx \dfrac{1}{12h}\left(-y_0 + 6y_1 - 18y_2 + 10y_3 + 3y_4\right) \\ f'(x_4) \approx \dfrac{1}{12h}\left(3y_0 - 16y_1 + 36y_2 - 48y_3 + 25y_4\right) \end{cases}$$

例题

例: 给出函数表如下, 利用三点公式求各节点的数值导数。

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
$f(x_i)$	1.2051709	1.4214028	1.6498588	1.8918247	2.1487213	2.4221188

例题

例: 给出函数表如下, 利用三点公式求各节点的数值导数。

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
$f(x_i)$	1.2051709	1.4214028	1.6498588	1.8918247	2.1487213	2.4221188

解: $h = 0.1$, 由三点公式, 得

$$\begin{cases} f'(x_0) \approx \dfrac{1}{2h}\left(-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\right) \\ f'(x_5) \approx \dfrac{1}{2h}\left(f(x_3) - 4f(x_4) + 3f(x_5)\right) \end{cases}$$

其余各点, 利用中点公式得

$$f'(x_i) \approx \frac{1}{2h}\left(-f(x_{i-1}) + f(x_{i+1})\right), \quad (i = 1, 2, 3, 4)$$

例题

计算结果如下:

x_i	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
$f'(x_i)$	2.1011985	2.2234395	2.3521095	2.4943125	2.6514705	2.8164795

例题

例: 给出函数表如下, 利用三点公式求各节点的数值导数。

i	0	1	2	3	4
x_i	0.1	0.3	0.5	0.7	0.9
$f(x_i)$	1.2052	1.4499	1.7487	2.1138	2.5596

例题

例: 给出函数表如下, 利用三点公式求各节点的数值导数。

i	0	1	2	3	4
x_i	0.1	0.3	0.5	0.7	0.9
$f(x_i)$	1.2052	1.4499	1.7487	2.1138	2.5596

解: $h = 0.2$, 由三点公式, 得

$$\begin{cases} f'(x_0) \approx \dfrac{1}{2h}\left(-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\right) = 1.0882 \\ f'(x_4) \approx \dfrac{1}{2h}\left(f(x_2) - 4f(x_3) + 3f(x_4)\right) = 2.4308 \end{cases}$$

例题

其余各点, 利用中点公式得

$$f'(x_i) \approx \frac{1}{2h}\left(-f(x_{i-1}) + f(x_{i+1})\right), \quad (i = 1, 2, 3)$$

$$f'(x_1) \approx \frac{1}{2h}\left(-f(x_0) + f(x_2)\right) = 1.3587,$$

$$f'(x_2) \approx \frac{1}{2h}\left(-f(x_1) + f(x_3)\right) = 1.6597,$$

$$f'(x_3) \approx \frac{1}{2h}\left(-f(x_2) + f(x_4)\right) = 2.0273,$$