# 数值微分和积分

St Maxwell

2019 年 3 月 29 日

## 1 数值微分

数值微分似乎没什么花样，好像都是有限差分的方法。

由函数的 Taylor 级数（假定函数二阶连续可微）

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

其中 $c \in (x, x+h)$。该式变形得到**二点前向差分公式**

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

在计算中，当 $h$ 很小时，上式前一项近似为导数

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

后一项可看作误差。显然误差与步长 $h$ 近似成正比，因此可以减小 $h$ 从而减小误差。二点前向差分公式是近似一阶导数的一阶方法。如果误差是 $O(h^n)$，我们把该公式称为 $n$ 阶近似。

然后导出二阶近似公式。由函数的函数的 Taylor 级数（假定函数三阶连续可微）

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(c_1)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(c_2)$$

其中 $x - h < c_2 < x < c_1 < x + h$。两式相减得到

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{12}f'''(c_1) - \frac{h^2}{12}f'''(c_2)$$

由推广中值定理，可合并后两项，得到二阶公式（**三点中心差分公式**）

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(c)$$

其中 $x - h < c < x + h$。

我们以求 $f(x) = \mathrm{e}^x$ 在 $x = 1$ 处的导数为例，结果见表。比较两个表中的结果，显然二阶公式的误差具有更快的下降速度，且最小误差也小于一阶公式。表明二阶公式更具有优越性。此外，由于所有导数计算公式不可避免存在相近数字相减的情况。因此不断减小 $h$，会导致数值精度的损失，误差反而增加。对三点中心差分公式，当

$$h = (3\epsilon_{mach}/M)^{1/3}$$

时误差能达到极小。在双精度中约为 $\epsilon_{mach}^{1/3} \approx 10^{-5}$。

| $h$ | 一阶 | error | 二阶 | error |
|---|---|---|---|---|
| $10^{-1}$ | 2.8588419548739 | 0.1405601264148 | 2.7228145639474 | 0.0045327354884 |
| $10^{-2}$ | 2.7319186557871 | 0.0136368273281 | 2.7183271333827 | 0.0000453049237 |
| $10^{-3}$ | 2.7196414225332 | 0.0013595940742 | 2.7182822815057 | 0.0000004530467 |
| $10^{-4}$ | 2.7184177470829 | 0.0001359186239 | 2.7182818329896 | 0.0000000045306 |
| $10^{-5}$ | 2.7182954199567 | 0.0000135914977 | 2.7182818285176 | 0.0000000000586 |
| $10^{-6}$ | 2.7182831874306 | 0.0000013589716 | 2.7182818282956 | −0.0000000001635 |
| $10^{-7}$ | 2.7182819684057 | 0.0000001399467 | 2.7182818285176 | 0.0000000000586 |
| $10^{-8}$ | 2.7182818218563 | −0.0000000066028 | 2.7182818218563 | −0.0000000066028 |
| $10^{-9}$ | 2.7182820439009 | 0.0000002154419 | 2.7182818218563 | −0.0000000066028 |
| $10^{-10}$ | 2.7182833761685 | 0.0000015477095 | 2.7182811557225 | −0.0000006727366 |

# 2 数值积分

## 2.1 牛顿-科特斯公式

几种数值积分方法的思路都是先对考察区间上的点进行多项式插值，然后对多项式进行积分。

### 2.1.1 梯形法则

对 $f(x)$ 在区间两端点拟合，使用拉格朗日公式，得到具有误差项的插值多项式

$$f(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!} f''(c_x) = P(x) + E(x)$$

在区间内对函数积分

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{x_0}^{x_1} P(x)\,\mathrm{d}x + \int_{x_0}^{x_1} E(x)\,\mathrm{d}x$$

第一个积分结果为

$$\int_{x_0}^{x_1} P(x)\,\mathrm{d}x = y_0 \frac{h}{2} + y_1 \frac{h}{2} = h \frac{y_0 + y_1}{2}$$

误差项为

$$\int_{x_0}^{x_1} E(x)\,\mathrm{d}x = -\frac{h^3}{12} f''(c)$$

因此**梯形法则**

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,\mathrm{d}x = h \frac{y_0 + y_1}{2} - \frac{h^3}{12} f''(c)$$

其中 $h = x_1 - x_0$，$x_0 < c < x_1$。

### 2.1.2 辛普森法则

对三点进行插值，将之前的一阶公式换成二阶

$$\begin{aligned} f(x) = {} & y_0 \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + y_1 \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \\ & + y_2 \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} + \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)}{3!} f'''(c_x) \\ & = P(x) + E(x) \end{aligned}$$

两端积分，得到**辛普森法则**

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(c)$$

其中 $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$，$x_0 < c < x_2$。

### 2.1.3 复合牛顿-科特斯公式

梯形和辛普森法则都是在非常小的区间上的积分。对于大的区间，可以将其分为很多个小区间积分并求和。为了计算

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

将区间 $[a,b]$ 等分为多个小格点

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{m-1} < x_m = b$$

对于所有 $i$，有 $h = x_{i+1} - x_i$。将所有小区间的积分以及误差项进行求和，得到**复合梯形公式**

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{2}\left(y_0 + y_m + 2\sum_{i=1}^{m-1} y_i\right) - \frac{(b-a)h^2}{12} f''(c)$$

其中 $h = (b-a)/m$，$a < c < b$。

复合辛普森公式与之类似，其区间划分方式为

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{2m-1} < x_{2m} = b$$

对于所有 $i$，有 $h = x_{i+1} - x_i$。在每个长度为 $2h$ 的区间 $[x_{2i}, x_{2i+2}] (i = 0, 1, \ldots, m-1)$ 上分别使用辛普森法则，然后求和。**复合辛普森公式**有

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{3}\left(y_0 + y_{2m} + 4\sum_{i=1}^{m} y_{2i-1} + 2\sum_{i=1}^{m-1} y_{2i}\right) - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(c)$$

其中 $a < c < b$。

对比复合梯形公式和复合辛普森公式的误差项，很明显后者将具有更高的精度。以 $f(x) = \ln x$ 为例，在区间 $[1,2]$ 上计算积分（精确值为 $2\ln 2 - 1$）。将区间分为十段分别计算积分，结果如下。

| | 积分 | error |
|---|---|---|
| 复合梯形公式 | 0.3858779367458 | −0.000416424374 |
| 复合辛普森公式 | 0.3862943005944 | −0.000000060526 |

## 2.2 龙贝格积分

***Euler-MacLaurin* 定理**：若积分公式 $I^{(m)}$ 是 $2m$ 阶公式 $I(f) = I^{(m)}(h) + O(h^{2m})$，则公式

$$I^{(m+1)}\left(\frac{h}{2}\right) = I^{(m)}\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{I^{(m)}\left(\frac{h}{2}\right) - I^{(m)}(h)}{2^{2m} - 1}$$

为 $2m+2$ 阶公式，即有 $I(f) = I^{(m+1)} + O(h^{2m+2})$。

龙贝格积分就是不断地组合低阶公式为高阶公式，从而计算积分的近似值。定义如下的步长序列：

$$\begin{gathered} h_1 = b - a \\ h_2 = \tfrac{1}{2}(b-a) \\ \vdots \\ h_j = \tfrac{1}{2^{j-1}}(b-a) \end{gathered}$$

定义近似公式 $R_{j1}$ 使用步长 $h_j$ 的复合梯形法则，因此 $R_{j+i,1}$ 对应外推使 $R_{j1}$ 步长减半的结果。对于 $j = 2, 3, \ldots$，有

$$R_{j1} = \frac{1}{2} R_{j-1,1} + h_j \sum_{i=1}^{2^{j-2}} f(a + (2i-1)h_j)$$

第 $jk$ 项由如下公式给出：

$$R_{jk} = \frac{4^{k-1} R_{j,k-1} - R_{j-1,k-1}}{4^{k-1} - 1}$$

由这两个递推公式，首先计算 $R_{11}$，然后计算第二行 $R_{12}$ 和 $R_{22}$，再计算第三行，依此类推。收敛条件是该行与上一行的相邻对角线上的元素之差小于容差。选择与之前相同的例子，在 $[1,2]$ 上计算积分 $f(x) = \ln x$ 的近似值。结果如下（容差为 $10^{-7}$）：

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 0.346573590279973 | | | | |
| 0.376019349194069 | 0.385834602165434 | | | |
| 0.383699509409442 | 0.386259562814567 | 0.386287893524509 | | |
| 0.385643909952095 | 0.386292043466313 | 0.386294208843096 | 0.386294309086248 | |
| 0.386131637744868 | 0.386294213675793 | 0.386294358356425 | 0.386294360729652 | 0.386294360932175 |

因此积分的近似结果为 0.3862943609322，误差为 $-0.000000000188$。