# 《数值分析》

# 数值微分

#### 徐岩

中国科学技术大学数学系

yxu@ustc.edu.cn

https://faculty.ustc.edu.cn/yxu

#### 内容

- 動植微分:基于Taylor展开、基于多项式插 值、Richardson外推
- ② 数值积分:通过多项式插值、待定系数法、复化数值积 分、Romberg积分、Guass积分

## 数值微积分

• 只给定函数f在n+1个点 $x_0, ..., x_n$ 上的值,如何利用这些信 息计算导数f'(c)和积分 $\int_a^b f(x)dx$ 的值?注意过这些点的函 数可以有很多,如下图所示:



# 基于Taylor展开计算数值微分

Taylor展升:

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

其中 $\xi \in (x, x + h)$ . 为了使等式成立,需要f与f'在闭区间[x, x + h]上连续,而且对应的开区间上存在f''

• 重新整理:

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

因此可利用的数值公式与误差项都出现在上述公式中。误差项由两部分组成:h的幂次以及f的高阶导数。因此当 $h \to 0$ 时,误差中的h项使得整体表达式收敛于零

 -(h/2)f"(ξ)称为截断误差。在数值计算中,截断误差与舍 入误差起着同样重要的作用 应用上述公式计算 $f(x) = \cos x \, dx = \pi/4$ 点的导数,这里取h = 0.01。它的精确度是多少?

• 数值导数值

$$f'(x) \approx \frac{1}{h} [f(x+h) - f(x)]$$

$$= \frac{1}{0.01} [0.700000476 - 0.707106781]$$

$$= -0.71063051$$

• 精度:

$$\left|\frac{h}{2}f''(\xi)\right| = 0.005|\cos \xi| \leqslant 0.005$$

- 实际上,由于 $\xi \in (\pi/4, \pi/4 + h)$ , 所以 $|\cos \xi| < 0.707107$ , 从而给出误差界为0.0035355.
- 真正的误差为

$$-\sin\frac{\pi}{4} + 0.71063051 = 0.003523729$$

# 精度分析

- 在前面的数值导数计算公式中,从截断误差— $(h/2)f''(\xi)$ 的表达式可见:为了精确计算f'(x),步长h必须很小
- 下面进行一个实验,其中令h通过给定的一个序列收敛到零,分别计算出相应的f'(x)的近似值。这里f(x) = arctan x,  $x=\sqrt{2}$ . 精确结果应当是 $f'(x)=1/(1+x^2)$ 在 $x=\sqrt{2}$ 点的值1/3
  - 运行Mathematica程序"数值微分\_Taylor展开.nb",通过改变 其中的m以得到不同的效果

```
initia f[x]:= ArcTan[x]; m = 8; s = N[Sqrt[2], m]; h = 1; M = 26; F1 = N[f[s], m];
       For [k = 0, k <= M, k++, F2 = N[f[s+h], m]; d = N[F2 - F1, m]; r = N[d/h, m];
       Print[k, "\t", h, "\t", F2, "\t", F1, "\t", d, "\t", r]; h = N[h/2, m]]
0
     1 1.1780972
                       0.95531662
                                         0.2227806
                                                       0.2227806
     0.50000000
                      1.0893836
                                    0.95531662
                                                    0.1340670
                                                                   0.2681340
     0.25000000
                      1.0297268
                                     0.95531662
                                                    0.0744102
                                                                    0.2976406
     0.12500000
                      0.99464439
                                      0.95531662
                                                      0.0393278
                                                                     0.314622
4
     0.062500000
                       0.97555095
                                       0.95531662
                                                       0.0202343
                                                                      0.323749
5
     0.031250000
                       0.96558170
                                       0.95531662
                                                       0.0102651
                                                                      0.328483
     0.015625000
                       0.96048682
                                       0.95531662
                                                       0.0051702
                                                                      0.33089
7
     0.0078125000
                        0.95791122
                                        0.95531662
                                                        0.0025946
                                                                       0.33211
8
     0.0039062500
                        0.95661631
                                        0.95531662
                                                        0.0012997
                                                                       0.33272
9
     0.0019531250
                        0.95596706
                                        0.95531662
                                                        0.0006504
                                                                       0.33303
1.0
       0.00097656250
                          0.95564199
                                          0.95531662
                                                          0.0003254
                                                                         0.3332
       0.00048828125
                          0.95547934
                                          0.95531662
                                                          0.0001627
                                                                         0.3333
12
       0.00024414063
                          0.95539799
                                          0.95531662
                                                          0.0000814
                                                                         0.3333
13
       0.00012207031
                          0.95535731
                                          0.95531662
                                                          0.0000407
                                                                         0.333
14
       0.000061035156
                           0.95533696
                                            0.95531662
                                                            0.0000203
                                                                          0.333
15
       0.000030517578
                           0.95532679
                                            0.95531662
                                                            0.0000102
                                                                          0.333
       0.000015258789
                           0.95532170
                                            0.95531662
                                                            5.1 \times 10^{-6}
                                                                         0.33
16
       7.6293945 \times 10^{-6}
                                                            2.5 \times 10^{-6}
                           0.95531916
                                            0.95531662
                                                                          0.33
       3.8146973 \times 10^{-6}
18
                           0.95531789
                                            0.95531662
                                                            1.3 \times 10^{-6}
                                                                          0.33
19
       1.9073486 × 10<sup>-6</sup>
                           0.95531725
                                            0.95531662
                                                            6. \times 10^{-7}
                                                                         0.3
       9.5367432×10<sup>-7</sup>
                           0.95531694
                                                            3. \times 10^{-7}
20
                                            0.95531662
                                                                         0.3
       4.7683716 \times 10^{-7}
                                                            2. \times 10^{-7}
21
                            0.95531678
                                            0.95531662
                                                                         0.3
       2.3841858×10<sup>-7</sup>
                                                            0. \times 10^{-8}
22
                           0.95531670
                                            0.95531662
                                                                         0.3
       1.1920929 \times 10^{-7}
                                                            0. \times 10^{-8}
23
                           0.95531666
                                            0.95531662
                                                                         0. \times 10^{-1}
24
       5.9604645 × 10<sup>-8</sup>
                            0.95531664
                                            0.95531662
                                                            0. \times 10^{-8}
                                                                         0. \times 10^{-1}
```

0.95531662

 $0. \times 10^{-8}$ 

 $0. \times 10^{-8}$  0.

 $0. \times 10^{-1}$ 

0.95531663

0.95531662

2.9802322×10<sup>-8</sup>

1.4901161×10-8

25

26

# 精度的减法相消

- 从实验中可以看到,当h趋向于零时,d的有效数字逐渐减少,直到最后d=0,r=0,因此并没有使得数值导数的精度越来越高
- 当运算中字长为8位,那么在k=11,12时得到最佳的结果0.33330000.此时d=f(x+h)-f(x)有四位有效数字,随着k的增加,d中有效数字的个数在减少,而r=d/h的有效数字个数不会比d的更多。因此当h很小时,舍入误差使得当h趋向于零时不能得到高的精度
- 当然,如果计算过程中字长变大,那么得到的精度就会更高

### 高阶公式

- 无论如何,前面给出公式的误差估计只是h的一次方,我们可以通过对Taylor展开进行简单的处理,得到更高阶的数值导数计算公式
- 实际上,由于

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1)$$
  
$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_2)$$

所以两式相减得到

$$f'(x) = \frac{1}{2h} [f(x+h) - f(x-h)] - \frac{h^2}{12} [f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)]$$



# 高阶公式的误差估计

- 只要f'''存在, 前面公式的误差项是可用的
- 进一步,根据导数的介值定理<sup>1</sup>,存在一点 $\xi \in (x-h,x+h)$ ,  $f'''(\xi) = (f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2))/2$ 。因此前页的数值微分公式可以重写为

$$f'(x) = \frac{1}{2h} [f(x+h) - f(x-h)] - \frac{h^2}{6} f'''(\xi)$$

 $<sup>^1</sup>$ 若f是[a,b]上的实值可微函数,再设 $f'(a) < \lambda < f'(b)$ ,那么存在一点 $x \in (a,b)$ , $f'(x) = \lambda$ .

设 $f(x) = \arctan x$ ,  $x = \sqrt{2}$ , 用高阶公式重新计算f'(x)的值。正确值为1/3

- 通过数值实验,此时在k=8,9,10时得到最高的五位精度
- 减法相消现象仍然存在,即当k>10后,舍入误差使得精确位数在减少

```
|n|2|= f[x] := ArcTan[x]; m = 8; s = N[Sqrt[2], m]; h = 1; M = 26;
      For [k = 0, k <= M, k++, F2 = N[f[s+h], m]; F1 = N[f[s-h], m]; d = N[F2-F1, m];
        r = N[d/2/h, m]; Print[k, "\t", h, "\t", F2, "\t", F1, "\t", d, "\t", r]; h = N[h/2, m]]
           1.1780972
                          0.3926991
                                         0.7853982
                                                        0.3926991
0
      0.50000000
                      1.0893836
                                     0.7406126
                                                   0.3487710
                                                                  0.3487710
      0.25000000
                      1.0297268
                                     0.86112983
                                                     0.1685969
                                                                    0.3371939
     0.12500000
                      0.99464439
                                                      0.0835745
                                      0.91106988
                                                                     0.3342980
      0.062500000
                       0.97555095
                                       0.93385414
                                                       0.0416968
                                                                      0.333574
      0.031250000
                       0.96558170
                                       0.94474460
                                                       0.0208371
                                                                       0.333394
6
      0.015625000
                       0.96048682
                                       0.95006969
                                                       0.0104171
                                                                       0.333348
      0.0078125000
                        0.95791122
                                        0.95270283
                                                        0.0052084
                                                                       0.33334
8
      0.0039062500
                        0.95661631
                                        0.95401213
                                                        0.0026042
                                                                        0.33333
9
      0.0019531250
                        0.95596706
                                        0.95466498
                                                        0.0013021
                                                                        0.33333
      0.00097656250
                          0.95564199
                                           0.95499095
                                                          0.0006510
                                                                         0.33333
                                                                         0.3333
       0.00048828125
                          0.95547934
                                           0.95515382
                                                           0.0003255
12
      0.00024414063
                          0.95539799
                                          0.95523523
                                                          0.0001628
                                                                         0.3333
       0.00012207031
                          0.95535731
                                           0.95527593
                                                           0.0000814
                                                                         0.3333
14
      0.000061035156
                           0.95533696
                                           0.95529627
                                                            0.0000407
                                                                           0.333
15
      0.000030517578
                           0.95532679
                                            0.95530645
                                                            0.0000203
                                                                           0.333
16
      0.000015258789
                           0.95532170
                                            0.95531153
                                                            0.0000102
                                                                           0.333
      7.6293945 \times 10^{-6}
                           0.95531916
                                            0.95531407
                                                            5.1 \times 10^{-6}
                                                                          0.33
      3.8146973 \times 10^{-6}
                                                            2.5 \times 10^{-6}
18
                           0.95531789
                                            0.95531535
                                                                          0.33
19
      1.9073486×10-6
                           0.95531725
                                            0.95531598
                                                            1.3 \times 10^{-6}
                                                                          0.33
      9.5367432×10<sup>-7</sup>
                                                            6. \times 10^{-7}
20
                           0.95531694
                                            0.95531630
                                                                         0.3
                                                            3. \times 10^{-7}
21
      4.7683716×10<sup>-7</sup>
                           0.95531678
                                            0.95531646
                                                                         0.3
22
      2.3841858×10<sup>-7</sup>
                           0.95531670
                                            0.95531654
                                                            2. \times 10^{-7}
                                                                         0.3
      1.1920929×10<sup>-7</sup>
                           0.95531666
                                            0.95531658
                                                            0. \times 10^{-8}
                                                                         0.3
       5.9604645×10-8
                            0.95531664
                                            0.95531660
                                                            0. \times 10^{-8}
                                                                         0. \times 10^{-1}
24
25
      2.9802322×10<sup>-8</sup>
                           0.95531663
                                            0.95531661
                                                            0. \times 10^{-8}
                                                                         0. \times 10^{-1}
                                                            0. \times 10^{-8}
26
      1.4901161×10<sup>-8</sup>
                            0.95531662
                                            0.95531661
                                                                         0.×10<sup>-1</sup>
                                                                            4 □ → 4 □ → 4 □ → 4 □ → ...
```

#### 差商

• 向前差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}, \quad R(x) = -\frac{h}{2}f''(\xi) = O(h)$$

• 向后差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}, \quad R(x) = \frac{h}{2}f''(\xi) = O(h)$$

• 中心差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}, \quad R(x) = -\frac{h^2}{6}f'''(\xi) = O(h^2)$$



#### 数据误差

- 数值微分对于函数值的计算误差或测量误差非常敏感,因为 此时函数值的误差被乘以1/(2h)
- 因此当计算由有误差数据确定的导数时,需要进行数据光滑 化处理(去噪)
  - 即尽可能多得用当前点周围点信息把数据噪音去掉,因此在实际应用中,为了计算数据导数,通常是根据当前点以及周围点进行数据拟合,然后根据拟合出来的表达式计算当前点的导数
- 数值积分公式对数据误差不是很敏感

#### 设定最佳步长 (事后估计法)

• 设D(h), D(h/2)分别为步长为h, h/2的差商公式

•

$$f'(x) - D(h) = O(h), \quad f'(x) - D(h/2) = O(h/2)$$

$$\Rightarrow \frac{f'(x) - D(h)}{f'(x) - D(h/2)} = \frac{O(h)}{O(h/2)} \approx 2$$

$$\Rightarrow f'(x) - D(h) = 2f'(x) - 2D(h/2)$$

$$\Rightarrow f'(x) - D(h/2) = D(h/2) - D(h)$$

• 当

$$|D(h) - D(h/2)| < \varepsilon$$

时的步长h/2就是合适的步长

### 高阶导数公式

- 根据高阶的Taylor展开,我们可以得到高阶导数的计算公式。
- 如

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(\xi_1)$$
  
$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(\xi_2)$$

两式相加,得到

$$f''(x) = \frac{1}{h^2} [f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)] - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)$$

其中 $\xi \in (x - h, x + h)$ 

• 这个公式常用于二阶微分方程的数值求解中



# 通过多项式插值计算数值导数

• 假设函数f在x<sub>0</sub>,x<sub>1</sub>,...,x<sub>n</sub>上的值已知,那么f在这些结点上 存在唯一的插值多项式,从而有

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_i)\ell_i(x) + \frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi_x)w(x)$$

其中 $\ell_i(x)$ 为Lagrange插值基函数, $w(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$ 

• 对其求导:

$$f'(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell'_i(x) + \frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi_x)w'(x) + \frac{1}{(n+1)!}w(x)\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi_x)$$

• 如果我们是在结点处计算数值导数,即不妨设 $x = x_{\alpha}$ ,由于 $w(x_{\alpha}) = 0$ ,则结果得到简化:

$$f'(x_{\alpha}) = \sum_{i=0}^{n} f(x_{i})\ell'_{i}(x_{\alpha}) + \frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi_{x_{\alpha}})w'(x_{\alpha})$$

• 而

$$w'(x) = \sum_{i=0}^{n} \prod_{\stackrel{j=0}{j\neq i}}^{n} (x - x_j) \Longrightarrow w'(x_\alpha) = \prod_{\stackrel{j=0}{j\neq \alpha}}^{n} (x_\alpha - x_j)$$

所以带有误差项的数值微分公式为

$$f'(x_{\alpha}) = \sum_{i=0}^{n} f(x_{i}) \ell'_{i}(x_{\alpha}) + \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_{x_{\alpha}}) \prod_{\substack{j=0\\j\neq\alpha}}^{n} (x_{\alpha} - x_{j})$$

• 此公式特别适用于非等距结点

给出当n=2,  $\alpha=1$ 时上述公式的显式表达

• 此时,三个Lagrange插值基函数为

$$\ell_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}$$

$$\ell_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$$

$$\ell_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

• 它们的导数分别是

$$\ell'_0(x) = \frac{2x - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}$$

$$\ell'_1(x) = \frac{2x - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$$

$$\ell'_2(x) = \frac{2x - x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

• 计算在x = x1点的值, 我们有

$$\ell'_0(x_1) = \frac{x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}$$

$$\ell'_1(x_1) = \frac{2x_1 - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$$

$$\ell'_2(x_1) = \frac{x_1 - x_0}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

• 因而带有误差项的数值微分公式是

$$f'(x_1) = f(x_0) \frac{x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}$$

$$+ f(x_1) \frac{2x_1 - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$$

$$+ f(x_2) \frac{x_1 - x_0}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

$$+ \frac{1}{6} f'''(\xi_{x_1})(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)$$

# 例:等距情形

•  $\epsilon_n = 2$ ,  $\alpha = 1$ 时, 前面的数值微分公式简化为

$$f'(x) = f(x-h)\frac{-1}{2h} + f(x+h)\frac{1}{2h} - \frac{1}{6}f'''(\xi_x)h^2$$

这就是前面给出的高阶公式

### Richardson外推

- Richardson外推(extrapolation)技术是通过巧妙应用Taylor级 数改进数值微分公式的精度
- 函数f(x)的Taylor级数为

$$f(x+h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} h^k f^{(k)}(x)$$
$$f(x-h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-1)^k h^k f^{(k)}(x)$$

两式相减,消去了所有的偶次项:

$$f(x+h)-f(x-h)=2hf'(x)+\frac{2}{3!}h^3f'''(x)+\frac{2}{5!}h^5f^{(5)}(x)+\cdots$$

• 重新整理得:

$$L = \varphi(h) + a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \cdots$$

其中
$$L = f'(x), \ \varphi(h) = \frac{1}{2h}[f(x+h) - f(x-h)],$$
  
 $a_k = -\frac{2}{(k-1)!}f^{(k-1)}(x)$ 

- 在上述公式中,我们需要h>0.在h=0时我们得不到任何信息。对每个h>0,a<sub>2</sub>h<sup>2</sup>+a<sub>4</sub>h<sup>4</sup>+···给出了误差
- 实际上,通过取不同的h,我们可以进一步消去误差项中的低次项。如根据在h和h/2的表达式,

$$L = \varphi(h) + a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \cdots$$

$$4L = 4\varphi(h/2) + a_2h^2 + a_4h^4/4 + a_6h^6/16 + \cdots$$

$$3L = 4\varphi(h/2) - \varphi(h) - 3a_4h^4/4 - 15a_6h^6/16 - \cdots$$

得到

$$L = \frac{4}{3}\varphi(h/2) - \frac{1}{3}\varphi(h) - a_4h^4/4 - 5a_6h^6/16 - \cdots$$

◆□▶◆□▶◆■▶◆■▶ ● 釣Qの

# 数值实验

• 采用公式

$$L = \frac{4}{3}\varphi(h/2) - \frac{1}{3}\varphi(h)$$
  
=  $\frac{2}{3h}[f(x+h/2) - f(x-h/2)] - \frac{1}{6h}[f(x+h) - f(x-h)]$ 

计算前面例子中的导数

• 当k = 4,5,6,7时得到六位数的精度



```
 \begin{aligned} & \text{M}(i) = \text{f}[x_{-}] := \text{ArcTan}[x]; \ m = 8; \ s = \text{N}[\text{Sqrt}[2], \ m]; \ h = 1, \ m = 30; \ d = \text{Table}[0, \ (M)]; \ Fl = \text{N}[\text{f}[s], \ m]; \\ & \text{For}[k = 0, k \le M, k + +, d[[k]] = \text{N}[\text{f}[s + h]] - \text{f}[s - h]) / 2 / h, \ m]; \ h = \text{N}[\text{h}/2, \ m]; \ For}[k = 1, \\ & \text{K} < M, k + +, r = \text{N}[\text{d}[[k]]] + \text{d}[[k]] - \text{d}[[k - 1]]) / 3, \ m]; \ Frint[[k], "t", r]; \end{aligned}
```

0.3487710 0.3341283 0.3371939 0.3333348 0.3342980 0.3333327 0.3335745 0.333333 0.333394 0.333333 6 0.333348 0.333333 0.333337 0.333333 0.33333 0.33333 0.33333 0.33333 1.0 0.33333 0.33333 11 0.33333 0.3333 12 0.3333 0.3333 13 0.3333 0.3333 14 0.3333 0.333 15 0.333 0.333 16 0.333 0.333 17 0.333 0.333 18 0.33 0.33 19 0.33 0.33 20 0.33 0.33 21 0.33 0.3 22 0.3 0.3 23 0.3 0.3  $0. \times 10^{-1}$ 24 0.3

 $0. \times 10^{-1}$   $0. \times 10^{-1}$ 

25

## 进一步外推

• 令

$$\psi(h) = \frac{4}{3}\varphi(h/2) - \frac{1}{3}\varphi(h)$$

那么可以应用 $\psi(h)$ 在h和h/2的取值进一步消去低阶项

• 实际上,

$$L = \psi(h) + b_4 h^4 + b_6 h^6 + \cdots$$

$$16L = 16\psi(h/2) + b_4 h^4 + b_6 h^6 / 4 + \cdots$$

$$15L = 16\psi(h/2) - \psi(h) - 3b_6 h^6 / 4 - \cdots$$

• 从而令

$$\theta(h) = \frac{16}{15}\psi(h/2) - \frac{1}{15}\psi(h)$$

得到

$$L = \theta(h) + c_6h^6 + c_8h^8 + \cdots$$

• 类似地,

$$L = \frac{64}{63}\theta(h/2) - \frac{1}{63}\theta(h) - \frac{3}{252}c_8h^8 - \cdots$$

# Richardson外推算法

- 上述过程可以执行任意多步,得到不断增加精度的公式
- 执行M步的Richardson外推算法为
  - ① 选取h的一个初值,如h=1,并且计算M+1个数

$$D(n,0) = \varphi(h/2^n), \quad n = 0, 1, \dots, M$$

② 执行下列公式的计算

$$D(n,k) = \frac{4^k}{4^k - 1}D(n,k-1) - \frac{1}{4^k - 1}D(n-1,k-1)$$

这里k = 1, 2, ..., M, n = k, k + 1, ..., M

- D(M, M)就是所需要的结果
- 在上述算法中, $D(0,0)=\varphi(h),\ D(1,0)=\varphi(h/2),\ D(1,1)=\psi(h)$



# 结果的精度

• 根据Richardson外推算法的计算过程,

$$D(n,0) = L + \mathcal{O}(h^2)$$

$$D(n,1) = L + \mathcal{O}(h^4)$$

$$D(n,2) = L + \mathcal{O}(h^6)$$

$$D(n,3) = L + \mathcal{O}(h^8)$$

• 我们将证明

$$D(n, k-1) = L + \mathcal{O}(h^{2k}), \qquad \stackrel{\text{def}}{=} h \to 0$$

# Richardson外推定理

#### **Theorem**

在算法中定义的D(n,k)满足下列形式的等式

$$D(n, k-1) = L + \sum_{j=k}^{\infty} A_{j,k} (h/2^n)^{2j}$$

证明: 当k = 1时, 由D(n, 0)的定义以及

$$L = \varphi(h) + a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \cdots$$

可知定理成立:

$$D(n,0) = \varphi(h/2^n) = L - \sum_{j=1}^{\infty} a_{2j} (h/2^n)^{2j}$$

因此可设 $A_{i,1} = -a_{2i}$ 



现在对k进行归纳证明。假设k-1时定理成立,那么根据算法中D(n,k)的定义以及归纳假设,

$$D(n,k) = \frac{4^k}{4^k - 1} \left[ L + \sum_{j=k}^{\infty} A_{j,k} \left( \frac{h}{2^n} \right)^{2j} \right]$$
$$- \frac{1}{4^k - 1} \left[ L + \sum_{j=k}^{\infty} A_{j,k} \left( \frac{h}{2^{n-1}} \right)^{2j} \right]$$
$$= L + \sum_{j=k}^{\infty} A_{j,k} \frac{4^k - 4^j}{4^k - 1} \left( \frac{h}{2^n} \right)^{2j}$$

从而我们可以定义

$$A_{j,k+1} = A_{j,k} \frac{4^k - 4^j}{4^k - 1}$$

显然 $A_{k,k+1} = 0$ , 定理所需要的形式成立。



#### 三角阵列

• 在算法中的D(n,k)形成如下的三角阵列

#### H.W.

编程实现用Richardson外推计算f'(x)的值, h=1。函数f(x)分别取

- $\ln x$ , x = 3, M = 3
- $\tan x$ ,  $x = \sin^{-1}(0.8)$ , M = 4
- $\sin(x^2 + \frac{1}{3}x)$ , x = 0, M = 5.

输出相应的三角阵列