中国科学技术大学
UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY OF CHINA
地址:中国安徽省合肥市 电话:0551-63602184 传真:0551-63631760 网址:http://www.ustc.edu.cn

Ch2 数值微分和数值积分

① 数值微分（基于Taylor展开，基于多项式插值，Richardson外推）

· 基于Taylor展开

几种一阶差商公式

- 向前：$f'(x_0)=\dfrac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}+R(x)$，$R(x)=-\dfrac{h}{2}f''(\xi)=O(h)$
- 向后：$f'(x_0)=\dfrac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}+R(x)$，$R(x)=\dfrac{h}{2}f''(\xi)=O(h)$
- 中心：$f'(x_0)=\dfrac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}+R(x)$，$R(x)=-\dfrac{h^2}{6}f'''(\xi)=O(h^2)$. $R(x)=\frac{h^2}{12}\ldots$

（注：类似的，展开至3阶（4阶Lagrange余项）可推出 $f''(x)$ 计算公式 -- $f''(x)\approx\frac{1}{h^2}(f(x+h)-2f(x)+f(x-h))$）

步长 h 的设计（事后估计）：以向差or后公式为例，设 $D(h)$，$D(\frac{h}{2})$ 分别为估计值，则 $\begin{cases} f'(x)-D(h)=O(h) \\ f'(x)-D(\frac{h}{2})=O(\frac{h}{2}) \end{cases}$

$\Rightarrow\cdots$ $f'(x)-D(\frac{h}{2})\approx D(h)-D(\frac{h}{2})$，因此步长 h 可选取 s.t $|D(h)-D(\frac{h}{2})|<\varepsilon$.

· 基于多项式插值

f 在结点 $x_0\sim x_n$ 上 $\exists 1$ 次数 $\leq n$ 插值多项式 $p_n(x)=\sum_{i=0}^{n}f(x_i)l_i(x)$，且由插值误差定理得 $f(x)=\sum_{i=0}^{n}f(x_i)l_i(x)+\frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi_x)w(x)$，求导后即可估算数值导数.

若是在结点处求，可知：$f'(x_k)=\sum_{i=0}^{n}f(x_i)l_i'(x_k)+\frac{1}{(n+1)!}f^{(n)}(\xi_{x_k})\prod_{j\neq k}(x_k-x_j)$ ✓ 该式对非等距结点尤为适用

· Richardson外推：巧妙运用Taylor公式，改变h进行低次项消去（巧妙组合）⇒提高精度（注：后面Runge-Kutta也有这思想）

idea：首先易得 $\underset{(f'(x))}{L}=\underset{\left(\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}\right)}{\varphi(h)}-\sum_{m=1}^{\infty}\frac{f^{(2m+1)}(x)}{(2m+1)!}h^{2m}$ -- $O(h^2)$.

令 $h \to \frac{h}{2} \Rightarrow 4\,\cancel{\varphi(\frac{h}{2})}^{L} = 4\varphi(\frac{h}{2}) - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{f^{(2m+1)}(x)}{(2m+1)!} \frac{1}{2^{2m-2}} h^{2m} \xrightarrow[\text{作差}]{\text{5原式}} L = \frac{1}{3}(4\varphi(\frac{h}{2}) - \varphi(h)) + \sum_{m=2}^{\infty} \frac{f^{(2m+1)}(x)}{(2m+1)!} (1-\frac{1}{2^{2m-2}}) \cdots$ $\sim O(h^4)$

之后记 $\psi(h) \triangleq \frac{1}{3}(4\varphi(\frac{h}{2}) - \varphi(h))$，类似向下，可不断提高精度.

一般的，对 $L = \Phi(h) + \underbrace{\sum_{m=k}^{\infty} a_m h^{2m}}_{O(h^{2k})}$，$h \to \frac{h}{2} \xrightarrow[\text{5原作差}]{\text{同乘}4^k} L = \frac{1}{4^k - 1}(4^k \Phi(\frac{h}{2}) - \Phi(h)) + \underbrace{\sum_{m=k+1}^{\infty} b_m h^{2m}}_{O(h^{2(k+1)})}$

于是想到建立如下三角阵列计算：

$$
\begin{array}{llll}
D(0,0) = \varphi(h) & & & \\
D(1,0) = \varphi(h/2) & D(1,1) = \frac{4}{3}\underbrace{\varphi(h/2)}_{D(1,0)} - \frac{1}{3}\underbrace{\varphi(h)}_{D(0,0)} & & \\
\vdots & \vdots & & \\
D(n,0) = \varphi(h/2^n) & D(n,1) = \frac{4}{3}D(n,0) - \frac{1}{3}D(n-1,0) & \cdots & \overset{\text{所求}}{\boxed{D(n,n)}}
\end{array}
$$

$$
\begin{cases}
D(n,0) = \varphi(h/2^n)，\text{其中} \varphi(h) = \dfrac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \\
D(n,k) = \dfrac{4^k}{4^k-1} D(n,k-1) - \dfrac{1}{4^k-1} D(n-1,k-1).
\end{cases}
$$

此即 Richardson 外推

Th: $D(n,k-1) = L + \sum_{j=k}^{\infty} A_{j,k} (h/2^n)^{2j}$.（因此 $D(n,k-1) = L + O(h^{2k})$，且 $n\nearrow$ 会使err↓）

② 数值积分

· 固定节点 $x_0 (=a) \cdots x_n (=b)$ 下的积分公式：$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$（注：$x_0 \cdots x_n$ in $[a,b]$，这个与ode Adams 公式…）

结果对 $\leq n$ 次多项式精确成立 $\Longleftrightarrow A_i = \int_a^b l_i(x)dx$.（即：$A_i$ 计算可直接求积分 or 待系）

1° 取 $n=1$，$x_0 = a$，$x_1 = b \Rightarrow \int_a^b f(x)dx \approx \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a)$ —— 梯形公式.（$Err = -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)^3$，用插值误差定理）

复化梯形公式：$\int_a^b f dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f dx = \sum_{i=1}^{n} \frac{f(x_{i-1})+f(x_i)}{2} \Delta x_i$. 如果等距：$h = \frac{b-a}{n}$，$x_i = a + ih$

则 $\int_a^b f dx = \frac{h}{2}(f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih) + f(b))$ —— Newton-Cotes 公式.（$Err = -\frac{1}{12} f''(\xi) h^2 (b-a) = O(h^2)$）

2° 取 $n=2$，$x_0 = a$，$x_1 = \frac{a+b}{2}$，$x_2 = b \Rightarrow \int_a^b f dx = \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b))$ —— Simpson 公式.

（$Err = -\frac{f^{(4)}(\xi)}{90}(\frac{b-a}{2})^5$）

idea：为方便先写为 $\int_a^{a+2h} f dx$ … （令 $b = a+2h$）

之后记 $F = \int_a^x f dx$，则左 $= F(a+2h)$ …

可以将其应用于偶数个子区间的复化：$\int_a^b f dx = \sum_{i=1}^{n/2} \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f dx = \frac{h}{3}(f(x_0) + 2\sum_{i=2}^{n/2} f(x_{2i-2}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + f(x_n))$

（$Err = O(h^4)$）

· 回到一般情形：$I(f) \triangleq \int_a^b f\,dx \approx I_n(f) \triangleq \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$

称该积分具有 k 阶代数精度 当 $I_n(x^i) = I(x^i),\ i=0\sim k$，$I_n(x^{k+1}) \neq I(x^{k+1})$.

误差上界估计：$(A_i = \int_a^b l_i(x)\,dx)$ $\left|\int_a^b f\,dx - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)\right| \leq \frac{M}{(n+1)!}\int_a^b \prod_{i=0}^{n}|x-x_i|\,dx$.

类似于用 T_{n+1} 零点 s.t $\max\limits_{x\in[a,b]} \prod_{i=0}^{n}|x-x_i|$ 最小，如何取 x_i s.t. $\int_a^b \prod_{i=0}^{n}|x-x_i|\,dx$ 最小？

答：取 $x_0\sim x_n$ 为 U_{n+1}（第2类 Chebyshev 多项式）的 n个零点.（Th：n次首一多项式中 s.t $\int_{-1}^{1}|p(x)|dx$ 最小者为 $2^{-n}U_n(x)$，且注意 $\int_{-1}^{1}|U_n(x)|dx=2$）

此时 $\left|\int_a^b f\,dx - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)\right| \leq \frac{M}{(n+1)!}\int_a^b |2^{-(n+1)}U_{n+1}(x)|\,dx = \frac{M}{(n+1)!\,2^n}$

附：关于第2类 Tchebyshev 多项式，我们有——

定义：(1) $U_{n+1}(x) = \frac{\sin((n+2)\theta)}{\sin\theta}$，$x=\cos\theta$

(2) $U_0=1, U_1=2x$；$U_{n+1}=2xU_n-U_{n-1}, n\geq 1$.

性质：(1) $\int_{-1}^{1}|U_n(x)|dx=2$

(2) 零点：$x_i=\cos\frac{(i+1)\pi}{n+2}$，$i=0\sim n$

(3) $2^{-n}U_n(x)$ 为 n次首一多项式

(4) 正交性：$\int_{-1}^{1}U_n(x)U_m(x)\sqrt{1-x^2}\,dx=\delta_{nm}\frac{\pi}{2}$

(5) 与 T_n 关系：$T_n'(x)=nU_{n-1}(x)$.

另外，对于广义积分见 2.2 $P_{36}\sim P_{43}$，回忆.

· 重积分：以矩形域 $[a,b]\times[c,d]$ 二重积分为例

$\int_a^b\int_c^d f(x,y)\,dy\,dx \xlongequal{\text{化为累次}} \int_a^b\left(\int_c^d f(x,y)\,dy\right)dx$. 看作两个定积分即可.

二重积分复化梯形公式：$\int_a^b\int_c^d f\,dy\,dx = \frac{hk}{4}$（$\sum$角点值 $+2\sum$边界值 $+4\sum$内部值），$E_T=-\frac{(b-a)(d-c)}{12}(h^2 f_{xx}+k^2 f_{yy})$（仅需在算定积分时代入之前已有的结论）

（也可如下写为 $hk\sum_{i=0}^{m}\sum_{j=0}^{n}\lambda_{ij}f(x_i,y_j)$，$\lambda_{ij}=p_iq_j$（$\{p_i\}:\{\frac{1}{2},1,\cdots,1,\frac{1}{2}\}$，$\{q_j\}:\{\frac{1}{2},1,\cdots,1,\frac{1}{2}\}$））

二重积分复化 Simpson 公式：$\int_a^b\int_c^d f\,dy\,dx = hk\sum_{i=0}^{m}\sum_{j=0}^{n}w_{ij}f(x_i,y_j)$，$w_{ij}=u_iv_j$ $\begin{cases} U=\{u_i\}:\{\frac{1}{3},\frac{4}{3},\frac{2}{3},\frac{4}{3},\ldots \\ V=\{v_j\}:\{\frac{1}{3},\frac{4}{3},\frac{2}{3},\ldots \end{cases}$

· 数值积分节点选取

在 $\int_a^b f\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 中，我们现在允许自行取节点

一种可能是令 $A_i \equiv C$（减少乘法次数），称为 Tchebyshev 公式

（例：$n=2$ 的 Simpson 是对 ≤ 3）

更一般的，$A_0 \sim A_n$ 与 $x_0 \sim x_n$ 共 $2n+2$ 个自由度，希望对 Π_{2n+1} 多项式都成立.

（pf: 用 q 除 f）

Gauss 积分定理：$w>0$ 为权，q 为 $n+1$ 次多项式且与 Π_n w 正交，设 $x_0 \sim x_n$ 为 q 零点，

那么 $\int_a^b f w\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$，$A_i = \int_a^b l_i(x) w(x)\,dx$，$\forall f \in \Pi_{2n+1}$ 精确成立

上述定理中 q 的根需 $\in [a,b]$ 并且是单的，可由如下定理确保

（pf: 反证）

符号次数变化定理：若 $0 \ne f \in C[a,b]$ 与 Π_n w 正交，则 f 在 $[a,b]$ 上至少变号 $n+1$ 次

Gauss 积分公式理论分析

（pf: 对 $p=\frac{q}{x-x_j}$（$\deg p^2 \le 2n$），公式精确成立）

Lemma：Gauss 积分定理中组合系数 $A_i > 0$，且和为 $\int_a^b w\,dx$.

（pf: ★ Weierstrass 多项式一致逼近定理）

收敛性定理：若 $f \in C[a,b]$，则近似积分公式 $\sum_{i=0}^{n} A_{n,i} f(x_{n,i}) \xrightarrow{n\to\infty} \int_a^b f w\,dx$.

（pf: 用 Hermite 插值，$\exists p \in \Pi_{2n-1}$ s.t. $p(x_i)=f(x_i)$，$p'(x_i)=f'(x_i)$）.

带误差项的 Gauss 积分定理：若 $f \in C^{(2n)}[a,b]$，则带误差项 Gauss 积分公式

$\int_a^b f w\,dx = \sum_{i=0}^{n-1} A_i f(x_i) + E$ 中，$E = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_a^b q^2(x) w(x)\,dx$，其中 $\xi \in (a,b)$，$q(x) = \prod_{i=0}^{n-1}$

补充：Legendre 多项式. -- $L_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$（$n$ 次多项式） ★ note：$\{L_n\}$ 为 $[-1,1]$ 正交系.

可知 $L_n(x) \perp \Pi_{n-1}$（$w=1$），从而 Gauss 积分定理成立，结点就取为 $L_n(x)$ 的零点.

Legendre 多项式例子：$p_0(x)=1$，$p_1(x)=x$，$p_2(x)=\frac{3}{2}x^2-\frac{1}{2}$，$p_3(x)=\frac{5}{2}x^3-\frac{3}{2}x$.

用 $p_2(x)$ 可得 $x_0=-\frac{1}{\sqrt{3}}$，$x_1=\frac{1}{\sqrt{3}}$，此时 $\int_{-1}^{1} f\,dx \approx A_0 f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + A_1 f(\frac{1}{\sqrt{3}})$ $\xrightarrow[\text{or 积分}]{\text{待定系数（由对称性 } A_0=A_1\text{）}}$ $A_0=A_1=1$.

· Romberg 算法 —— 复化梯形公式递推.

or $\frac{h}{2}\left(f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)+f(b)\right)$

记复化梯形公式 ($x_0 \cdots x_n$ 等距结点): $T(n) = h\left(\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)+\frac{1}{2}f(b)\right)$ ($\triangleq h\sum_{i=0}^{n}{}^{(1)} f(a+ih)$) (端点减半)

△别记错　　其中 h

可得: $T(2n) = \frac{1}{2}T(n) + h'\sum_{i=1}^{n} f(a+(2i-1)h')$, 其中 $h' = \frac{b-a}{2n}$

计算时用: $T(2^n) = \frac{1}{2}T(2^{n-1}) + h_n\sum_{i=1}^{2^{n-1}} f(a+(2i-1)h_n)$ ($h_0 = b-a$, $h_n = \frac{h_0}{2^n}$). (*)

(将低阶公式组合为高阶公式, s.t. 截断误差阶↗)

下面, 采用外推手法, 进一步提高精度

(其中 A_k 由: $\frac{x}{e^x-1} = \sum_{k=0}^{\infty} A_k x^k$ 定义)

· Euler - Maclaurin 公式: $\int_0^1 f\,dt = \frac{f(0)+f(1)}{2} + \sum_{k=1}^{m-1} A_{2k}\left(f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(1)\right) - A_{2m}f^{(2m)}(\xi_0)$

由此可导出: $I(f) = \int_a^b f\,dt = T(2^n) + \sum_{k=1}^{m-1} c_k h^{2k} + c_{2m} f^{(2m)}(\xi) h^{2m}$.

(也可自行 $h \to \frac{h}{2}$ $\times 4^k$ 减消推一下)

因此记 $R(n,0) = T(2^n)$, 它符合 Richardson 算法首列要求, 于是定义

$R(n,k) = \frac{4^k}{4^k-1}R(n,k-1) - \frac{1}{4^k-1}R(n-1,k-1)$, 则可归纳出 $R(n,k) = I(f) + O(h^{2k+2})$.

综上, 令 $\begin{cases} R(n,0) = T(2^n), \text{ 采用 (*) 式递推求解} \\ R(n,k) = \frac{4^k}{4^k-1}R(n,k-1) - \frac{1}{4^k-1}R(n-1,k-1), \text{ 形成三角阵列} \Rightarrow \text{最终取対角} \end{cases}$

(应用 E-M 公式需 $f \in C^{2m}[a,b]$, 此时 $R(n,m)$ 当 $n\to\infty$ or $m\to\infty$ 均 → f 积分)

另: $f \in C[a,b]$ 时, 已有收敛性定理 $R(n,m) \xrightarrow{n\to\infty} I(f)$. (pf: 先证 $R(n,0) = \frac{1}{2}h\sum_{i=1}^{2^n} f(a+(i-1)h) + \frac{1}{2}h\sum \cdots$ → $I(f)$, 而用外推公式知 $R(n,m) \to$ 成立